

LIBRO DE MEMORIAS



11 AL 15 DE OCTUBRE 2021

CENTRO DE CONVENCIONES
JULIO CESAR TURBAY
CARTAGENA DE INDIAS



34° CLAQ

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA
CARTAGENA DE INDIAS - COLOMBIA

20
20



XVIII COLACRO

XVIII CONGRESO
LATINOAMERICANO DE
CROMATOGRAFÍA Y
TÉCNICAS AFINES



X COCOCRO

SPAE

II SIMPOSIO PANAMERICANO DE
ACEITES ESENCIALES



IV Congreso Colombiano de
Bioquímica y Biología Molecular

Centro de Convenciones Cartagena de Indias - Julio Cesar Turbay Ayala
Cartagena de Indias, Colombia
11 al 15 de octubre de 2021

AUSPICIA



ORGANIZA



SOCIAD
COLOMBIANA
DE CIENCIAS
QUÍMICAS



Diagramación:

Nicolás Pinzón Ramírez

E-mail: niko11_84@hotmail.com

Cel: 310 6259016

Memorias 34° Congreso Latinoamericano de Química

Memorias XVIII Congreso Latinoamericano de Cromatografía – X Congreso Colombiano de cromatografía

Memorias II Simposio de Aceites Esenciales

Memorias IV Congreso Colombiano de Bioquímica y Biología Molecular

Cartagena, COLOMBIA octubre de 2021

ISSN 2805-8852



Libro de Memorias



XVIII CONGRESO
LATINOAMERICANO DE
CROMATOGRFÍA Y
TÉCNICAS AFINES



IV Congreso Colombiano de
Bioquímica y Biología Molecular

Editor

Sociedad Colombiana de Ciencias Químicas

Comité Editorial

Susana Novoa
Diana Sinuco
Nestor Contreras
Gina Dominguez
Maritza Rojas
Paola Farfán
Paola Ortega
Angie Angarita
Lorena Lugo
Carolina Cuevas
Laura Leal
Andrea Garzón
Erica Díaz



Organización del Congreso

Instituciones:

Universidad de la Amazonia
Universidad de Antioquia
Universidad Antonio Nariño
Universidad de los Andes
Universidad del Atlántico
Universidad de Caldas
Universidad de Cartagena
Universidad Icesi
Universidad Industrial de Santander
Pontificia Universidad Javeriana sede Bogotá
Universidad Santiago de Cali
Universidad Tecnológica de Pereira
Universidad Nacional de Colombia
Servicio Geológico Colombiano
Red para el Análisis de la Calidad Ambiental en América Latina

Sociedad Colombiana de Ciencias Químicas

Presidente: Diana Cristina Sinuco
Vicepresidente: Harold Duban Ardila Barrantes
Secretario: Blanca Ligia Higuera
Tesorera: Susana Novoa
Vocales: Fabian Parada
Bárbara Moreno
Mario Urdaneta

Directora Ejecutiva SCCQ

Paola Ortega

Coordinadora CLAQ

Paola Farfán



Comité Científico CLAQ 2020



ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

Líder Comité: Diana Farias dmfariasc@unal.edu.co

Liliam Alexandra Palomeque
Manuel Fredy Molina
Ana Patricia Martínez
Claudia Consuelo Rubiano

lapalomequef@unal.edu.co
mfmolinac@unal.edu.co
apmartinezg@gmail.com
ccrubianoc@unal.edu.co



QUÍMICA ANÁLITICA

Líder Comité: Zuly Rivera zriveram@unal.edu.co

Jhon Erick Rivera
Drochss Petry Valencia
Jorge Ariel Martínez
Javier Eduardo García

jhrivera@lasalle.edu.co
drochss.valencia@javerianacali.edu.co
jamartinezra@unal.edu.co
jaegarciaca@unal.edu.co



QUÍMICA AMBIENTAL Y AGRICOLA

Líder Comité: Gustavo Peñuela gustavo.penuela@udea.edu.co

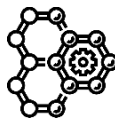
Andrea Londoño
Henry Zuñiga

yudyandrea@gmail.com
henry.zuniga@udea.edu.co



QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

Líder Comité: Jesús Olivero joliverov@unicartagena.edu.co

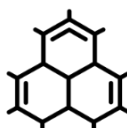


QUÍMICA DE MATERIALES, POLÍMEROS Y NANOTECNOLOGÍA

Líder Comité: Jorge Gutiérrez jgutierrez@uniquindio.edu.co

Oscar Alonso Marín
Sergio Ismael Blanco
Felipe Andrés Pineda
Oscar Alonso Marín

omarin@herrera.unt.edu.ar
siblanco@uis.edu.co
pipe8219@gmail.com
omarin@herrera.unt.edu.ar



QUÍMICA ORGÁNICA

Líder Comité: Diego Gamba da.gamba1361@uniandes.edu.co

Dr. Fabián Garzón Posse
Dra. Liliana Becerra Figueroa
Dr. Juan Carlos Castillo
Dr. Carlos Alberto Echeverri
Dra. Paola Acosta Guzmán
Dra. Andrea Ojeda Porras

fabian.garzon@juanncorpas.edu.co
lbecerraf@unbosque.edu.co
juan.castillo06@uptc.edu.co
carlos.echeverry@docentes.umb.edu.co
paolaandrea02233@gmail.com
andrea-carolina.ojeda-porras@uni-v-orleans.fr

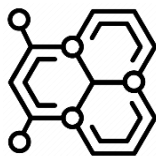


PETROQUÍMICA Y GEOQUÍMICA

Líder Comité: Daniel Ricardo Molina dmolina@uis.edu.co

Martha L. Chacon Patino
Alexánder Guzmán Monsalve
Adan Yovani León
Enrique Mejía Ospino

chacon@magnet.fsu.edu
alexander.guzman@ecopetrol.com.co
adanleon@uis.edu.co
emejia@uis.edu.co



QUÍMICA INORGÁNICA

Líder Comité: Edwin Baquero eabaquero@unal.edu.co

Carolina Blanco Jiménez
Daniel Gallego Mahecha
Gina Hincapié Triviño
Richard F. D'vries

cblancoj@unal.edu.co
daniel.gallego@uptc.edu.co
ghincapie@unal.edu.co
richard.dvries00@usc.edu.co



QUÍMICA DE ALIMENTOS

Líder Comité: Luis Felipe Gutierrez lfgutierrez@unal.edu.co

Luz Patricia Restrepo
Diego Ballesteros Vivas

lprestreos@unal.edu.co
dballesterosv@unal.edu.co



PRODUCTOS NATURALES & FARMACEUTICOS

Líder Comité: Luis Enrique Cuca lecucas@unal.edu.co

Mónica Constanza Ávila
Barbara De las Mercedes Moreno Murillo
Oscar Javier Patiño Ladino
Fabián Harvey López Vallejo

mcavilam@unal.edu.co
bdmorenom@unal.edu.co
ojpatinol@unal.edu.co
fhlopezv@unal.edu.co

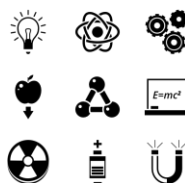


PROCESOS, TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN

Líder Comité: Jario Perilla jeperillap@unal.edu.co

Liliana Ávila Martín
Sandra Milena Arroyave Piedrahita

lavilam@unal.edu.co
sarroyave@unal.edu.co



PROCESOS, TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN

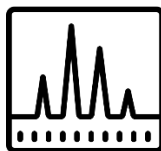
Líder Comité: Ricardo Vivas rvivasr@unicartagena.edu.co

Juan Enrique torres Castellar
Maicol Ahumado

jtorresc2@unicartagena.edu.co
mahumedom@unicartagena.edu.co



Comité Científico XVIII COLACRO – X COCOCRO / II SPAE



Jairo Guerrero	Universidad Nacional de Colombia	jaguerrero@unal.edu.co
Nelson Hurtado	Universidad de Nariño	nhurtado@udenar.edu.co
Jairo Rene Martinez	Universidad Industrial de Santander	jmartine@uis.edu.co
Fabian Parada	Universidad Nacional de Colombia	fparada@unal.edu.co
Diana Sinuco	Universidad Nacional de Colombia	dcsinuol@unal.edu.co
Camilo Duran	Universidad Industrial de Santander	diegocamilo25@gmail.com
Elena Stashenko	Universidad Industrial de Santander	elenastashenko@gmail.com
Juan Pablo Arrubla	Universidad Tecnológica de Pereira	juanpablo77@utp.edu.co



Comité Científico IV C2B2



Gian Pietro	Universidad de los Andes	gp.miscione57@uniandes.edu.co
Luis Ernesto Contreras	Universidad Nacional de Colombia	lecontrerasr@unal.edu.co
Ana Patricia Martinez	UMNG	apmartinezg@unal.edu.co



Luisa Matheus	Universidad del Rosario	luisa.matheus@urosario.edu.co
Stelia Mendez	UIS	scmendez@uis.edu.co
Natalia Mesa	Universidad de Antioquia	natalimesa@yahoo.com
Luis Alejandro Gomez	Universidad EAFIT	lgomez1@eafit.edu.co
Jesus Uribe Ardila	Universidad de los Andes	jeuribe@uniandes.edu.co



Luz Marina Lizarazo	UPTC	bio.ambient@uptc.edu.co
Luz Elena Botero	Universidad Pontificia Bolivariana	luz.boterop@upb.edu.co
Javier Eduardo Garci	Universidad Nacional de Colombia	jaegarciaca@unal.edu.co



Mauricio Soto Suárez	AGROSAVIA	m.soto.suarez@gmail.com
Liliana Franco	Universidad Militar	liliana.franco@unimilitar.edu.co
Esperanza Torres Rojas	Universidad Nacional de Colombia	etorresr@unal.edu.co
Teresa Mosquera	Universidad Nacional de Colombia	tmosquerav@unal.edu.co
Elizabeth Jimenez Diaz	Universidad de los Andes	e.jimenezd@uniandes.edu.co
Camilo Lopez	Universidad Nacional de Colombia	celopezc@unal.edu.co



ORGANIZADORES



AUSPICIA:





PATROCINADORES

Patrocinadores Diamante



Agilent



ACS Publications
Most Trusted. Most Cited. Most Read.





Patrocinadores Rubí



Patrocinadores Esmeralda



Patrocinadores Platino



Patrocinadores Oro





Tabla de Contenidos

Volumen n°1

	Pag.
Bienvenida	15
Programa General	21
Índices trabajos CLAQ	22
Magistrales	71
Plenarias CLAQ	82
Ponencias Orales CLAQ	111
Ponencias Oral Poster CLAQ	271
Ponencias Poster CLAQ	293

Volumen n°2

	Pag.
Índices trabajos COLACRO/SPAE/ C2B2	516
Plenarias COLACRO/SPAE/ C2B2	565
Ponencias Orales COLACRO/SPAE/ C2B2	590
Ponencias Oral Poster C2B2	620
Ponencias Poster COLACRO/SPAE/ C2B2	650



34°

CLAQ

2020

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA
CARTAGENA DE INDIAS - COLOMBIA



VOLUMEN I



Saludo de Bienvenida

Comunidad académica y científica asistente al CLAQ 2020:

En nombre de la Sociedad Colombiana de Ciencias Químicas (SCCQ) y el comité organizador del 34° CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA (CLAQ 2020), reciban una cordial y fraternal bienvenida. La SCCQ fue designada por la Federación Latinoamericana de Asociaciones Químicas (FLAQ) para la realización de la próxima versión del CLAQ. La ciudad de Cartagena de Indias, reconocida como patrimonio mundial por la UNESCO, ha sido seleccionada para ser la sede de este importante evento el cual se desarrollará en conjunto con el XVIII CONGRESO LATINOAMERICANO DE CROMATOGRAFÍA (COLACRO), el X CONGRESO COLOMBIANO DE CROMATOGRAFÍA (COCOCRO), el II SIMPOSIO PANAMERICANO DE ACEITES ESENCIALES (SPAE) y el IV CONGRESO COLOMBIANO DE BIOQUÍMICA Y BIOLOGÍA MOLECULAR - C2B2. y será el espacio para la discusión y la divulgación de los avances más recientes de la Química pura y aplicada de Colombia y de Latinoamérica.

Desde que inició sus actividades hace más de un año, nuestro comité organizador tenía un reto particular; estar a la altura de las versiones anteriores de este evento que por su calidad y organización, dejaron una huella indeleble en la memoria de la comunidad científica latinoamericana. Con el acompañamiento en los diferentes comités, de referentes académicos a nivel nacional como son la Dra. Elena Stashenko investigadora de la Universidad Industrial de Santander, Dr. Milton Rosero docente de la Universidad de Caldas y la Dra. Marisela Viola docente de la Universidad de Cartagena y representantes de instituciones de renombre nacional como la Universidad de la Amazonía, Universidad de los Andes, Universidad de Antioquia, Universidad Antonio Nariño, Universidad del Atlántico, Universidad de Caldas, Universidad de Cartagena, Universidad ICESI, Universidad Industrial de Santander, Universidad Javeriana - Bogotá, Universidad Javeriana - Cali, Universidad Nacional de Colombia, Universidad Santiago de Cali y Universidad Tecnológica de Pereira. Del mismo modo se encuentran como entidades organizadoras el Servicio Geológico Colombiano, la Red para el Análisis de la Calidad Ambiental en América Latina-RACAL y la red de Investigación BIO-RETO 15:50., aunaron esfuerzos para generar una versión de alta calidad científica, indeleble para nuestra comunidad académica. Sea este el momento de reconocer su esfuerzo y compromiso, estoy seguro de que el trabajo realizado se verá reflejado en estos días de congreso. Así mismo sea la oportunidad para agradecer a los diferentes conferencistas que difundirán sus invaluable experiencias y conocimientos a los diferentes actores de nuestra comunidad académica y científica.

En mi calidad de presidente del comité organizador y como vicepresidente de la SCCQ, queremos agradecer de manera especial a todas las instituciones y empresas patrocinadoras que han confiado en nuestro congreso, su ayuda es fundamental para llevar eventos de la más alta calidad, a la comunidad científica nacional y latinoamericana. No tengo duda que este espacio será una oportunidad única para fortalecer los lazos entre los investigadores nacionales e internacionales, así como para mostrar los últimos avances tecnológicos que se realizan por parte de las firmas que nos acompañan en la muestra comercial. Esperamos que los diferentes actores de la comunidad académica y científica que participan en nuestro evento; estudiantes, investigadores y profesores, se conviertan en instrumentos activos de la difusión y el fortalecimiento de la química en nuestro país.

Finalmente los invito a que disfruten de todos los espacios culturales que tiene la histórica ciudad de Cartagena.

Dr. Harold D. Ardila
Presidente del Comité Organizador
Bienvenidos



Estimados colegas:

En nombre de La Sociedad Colombiana de Ciencias Química (SCCQ) y de la Federación Latinoamericana de Asociaciones Químicas (FLAQ), es un gran placer invitarles al 34° Congreso Latinoamericano de Química CLAQ 2020, el XVIII Congreso Latinoamericano de Cromatografía – COLACRO, el X Congreso Colombiano de Cromatografía – COCOCRO, el II Simposio Panamericano de Aceites Esenciales (SPAE) y el IV Congreso Colombiano de Bioquímica y Biología Molecular - C2B2. Estos eventos científicos serán organizados por la Sociedad Colombiana de Ciencias Químicas, del 11 hasta el 15 de octubre de 2021 en el Centro de Convenciones Cartagena de Indias.

Como en ediciones anteriores, este evento será una oportunidad única para divulgar los avances recientes de la Química pura y sus aplicaciones en Ciencias Biológicas, Farmacéuticas, de Materiales e Ingeniería Química. A este encuentro internacional asistirán más de 1500 participantes, procedentes del área, industrial y empresarial.

El programa científico contemplará conferencias plenarias, presentaciones orales, mesas redondas, cursos pre-congreso y presentaciones de posters en 12 áreas temáticas.

Los asistentes al CLAQ2020 tendrán la oportunidad de conocer la cultura, la historia y la vida social de nuestro país, su hospitalidad y belleza, haciendo que su estancia sea una fructífera y agradable experiencia.

A nombre de los Comités Organizador y Científico, esperamos que su estancia sea una experiencia enriquecedora en la histórica Cartagena de Indias.

Dra. Elena Stashenko

Presidenta Comité Científico

34° Congreso Latinoamericano de Química (CLAQ 2020)

XVIII Congreso Latinoamericano de Cromatografía (COLACRO)

X Congreso Colombiano de Cromatografía (COCOCRO)

II Simposio Panamericano de Aceites Esenciales (SPAE)



Bienvenidos

En nombre de La Sociedad Colombiana de Ciencias Química (SCCQ) es un gran placer invitarles al IV Congreso Colombiano de Bioquímica y Biología Molecular – C2B2, que se realizará en conjunto con el 34° Congreso Latinoamericano de Química CLAQ 2020, el II Simposio Panamericano de Aceites Esenciales – II SPAE, el XVIII Congreso Latinoamericano de Cromatografía – COLACRO, el X Congreso Colombiano de Cromatografía – COCOCRO, Workshop Em Avanços Recentes No Preparo De Amostras – WARPA. Estos eventos científicos serán organizados por la Sociedad Colombiana de Ciencias Químicas, del 11 al 15 de octubre de 2021 de manera híbrida presencial en el Centro de Convenciones Cartagena de Indias y virtual en el portal virtual del congreso.

Como en ediciones anteriores, este evento será una oportunidad única para divulgar los avances recientes en Bioquímica y Biología Molecular además de las Ciencias Biológicas y Farmacéuticas.

El programa científico contemplará conferencias plenarias, presentaciones orales, mesas redondas, cursos pre-congreso y presentaciones de posters en 4 áreas temáticas.

Los asistentes al C2B2 2020 tendrán la oportunidad de conocer la cultura, la historia y la vida social de nuestro país, su hospitalidad y belleza, haciendo que su estancia sea una fructífera y agradable experiencia.

A nombre de los Comités Organizador y Científico, esperamos que su estancia sea una experiencia enriquecedora en la histórica Cartagena de Indias.

Dra. Maricela Viola Rehinals.
Presidente IV C2B2



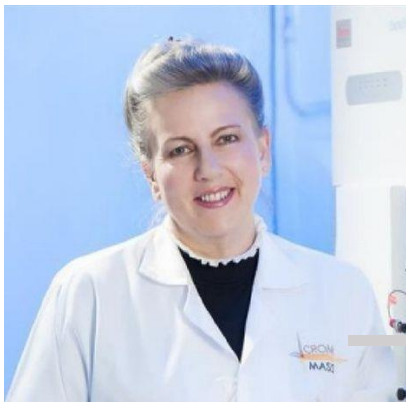
Dr. Harold Ardila Bustamante

Químico de la Universidad Nacional de Colombia, sede Bogotá, institución que posteriormente le otorgaría los títulos de Magister en Ciencias-Química y Doctor en Ciencias-Química. Su pasantía Doctoral fue realizada en el laboratorio Bioquímica y Proteómica Vegetal y Agroforestal, Departamento de Bioquímica y Biología Molecular de la Universidad de Córdoba en España.

Es profesor Asociado-Dedicación exclusiva del departamento de Química en la Universidad Nacional de Colombia, sede Bogotá. Actualmente es el director del área curricular de Química y hace parte del grupo de investigación Estudio de Actividades Metabólicas Vegetales.

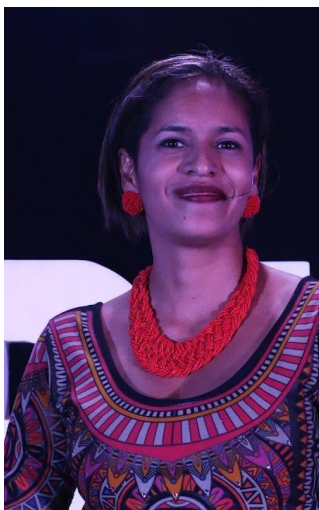
Su investigación se enfoca principalmente en conocimiento de los mecanismos bioquímicos y moleculares relacionados con procesos de defensa o procesos de colonización, en interacciones planta-patógeno, siendo el modelo Clavel-Fusarium oxysporum f. sp. dianthi, el más estudiado dentro de su grupo de investigación.

El profesor Harold Ardila, es el actual presidente de la Sociedad Colombiana de Ciencias Químicas, de la cual hace parte desde hace varios años, desempeñando otros cargos como Vice-presidente y tesorero, entre otros. Ha participado en las versiones anteriores del C2B2, siendo parte del comité organizador.



Dra. Elena Stashenko

Doctora en Ciencias Químicas y en Química Orgánica e Instrumental de la Universidad Druzhbi Narodov de Moscú (URSS). Ha realizado estancias postdoctorales en las Universidades de California (Davis, Estados Unidos), Braunschweig (Alemania), Québec (Canadá) y en el Royal Melbourne Institute of Technology (Australia). En la actualidad, es profesora Titular Laureada y Directora del Laboratorio de Cromatografía y Espectrometría de Masas CROM-MASS de la Universidad Industrial de Santander y Directora del Centro Nacional de Investigaciones para la Agroindustrialización de Especies Vegetales Aromáticas y Medicinales Tropicales (CENIVAM). Es miembro del Consejo Asesor del Instituto Nacional de Metrología de Colombia, del Consejo Científico del Instituto de Investigación de Recursos Biológicos Alexander von Humboldt, del Consejo del Programa Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación en Biotecnología de Colciencias, y de la Asociación Colombiana para el Avance de la Ciencia (ACAC); además, es Académica de Número de la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales (ACCEFYN). Ha dirigido más de 200 tesis de Pregrado, Maestría y Doctorado en Química y participado en la publicación de más de 250 artículos científicos en revistas indexadas internacionales, nacionales, memorias de congresos y simposios internacionales. Fue seleccionada por la revista *The Analytical Scientist*, en el año 2016, como una de las 50 mujeres más influyentes, a nivel mundial, en las Ciencias Analíticas.

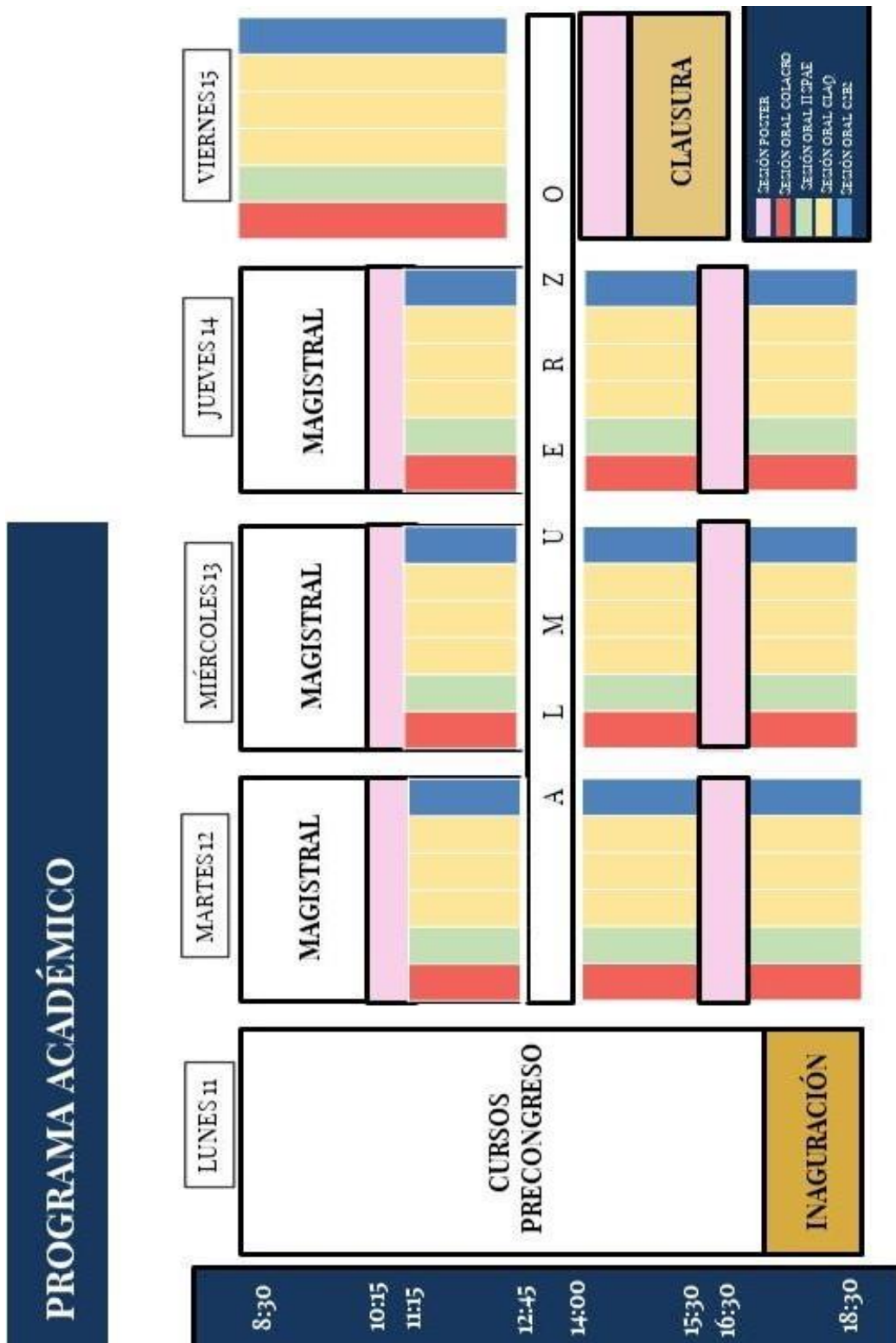


Dra. Maricela Viola

La Dra. Maricela del Carmen Viola-Rhenals, es investigadora científica colombiana. Actualmente es docente del departamento de Química de la Universidad de Cartagena. Entre su logros se resaltan la investigación en bioquímica del cáncer y estrés oxidativo. Beca de Excelencia, Instituto Venezolano Investigaciones Científicas, 2004-2005, Becaria del Programa Promoción Investigador, ONCTI, Venezuela, 2007. Gnóstico.



Programación General





Índice de Trabajos

Magistrales

MG 01

Next Generation Antibiotics

Dra. Ada Yonath

MG 02

Observing the colourful, aromatic and intriguing biodiversity, through the chemical lens

Dra. Elena Stashenko

MG 03

Carbon-based Compounds and Materials for Enhanced Solar Cell

Dr. Luis Echegoyen

MG 04

Sistemas Organizados y sus Aplicaciones: Transporte de Fármacos y la Síntesis de Nanopartículas con Diferentes Aplicaciones

Dr. Mariano Correa

MG 05

Reología no Teología

Dr. Octavio Manero

MG 06

Chemistry for a Sustainable World.

Dr. Tom Welton president RSC

MG 07

LC-GC fundamentals

Dr. Janusz Pawliszyn

MG 08

Comprehensive Gas Chromatography for the Analysis of High Complex Samples. An Overview of different approaches

Dr. Luigi Mondello

MG 09

El futuro de la profesión química

Dr. Javier García Presidente IUPAC

MG 10

Protein Chemistry in Vaccine Development

Dr. Daniel García presidente FLAQ



Plenarias CLAQ 2020

PCQS01

Design and synthesis of potent adenylate cyclase inhibitors and their potential therapeutic applications.

Dr. Zlatko Janeba

PCQS02

Voacangine, bioactive metabolite from *Tabernaemontana cymosa*: its chemistry and biological activity.

Dr. Fredyc Díaz Castillo

PCQS03

Integrated biorefineries: an alternative future for the traditional refining industry.

Dr. Eduardo Falabella

PCQS04

Magneto Induced Catalysis with Organometallic Nanoparticles.

Dr. Bruno Chaudret

PCQS05

Perspectives and Challenges for a Bioeconomy based on Natural Products from Brazilian Huge Biodiversity

Dra. Vanderlan da Silva Bolzani

PCQS06

Remote Functionalization (Merging metal-walk with C-C Bond Cleavage)

Dr. Ilan Marek

PCQS07

Diseño molecular de catalizadores para la reducción de las emisiones de CO₂.

Dr. Javier García

PCQB01

Kilogram instead of milligram samples: new multi-element analysis opportunities for geo- and other applied sciences.

Dr. Peter Bode

PCQB02

Colombian Rivers: between the abandonment and the chemico-biological death.

Dr. Jesús Olivero

PCQB03

N-Heterocyclic Carbene-Stabilized Metallic Nanoparticles for Catalytic Applications in Water.

Dr. Edwin Baquero

PCQB04

Mechanisms of removal of heavy metals and arsenic from water by TiO₂ -heterogeneous photocatalysis.

Dra. Marta Irene Litter



PCQB05

Frutas y tubérculos: estudio de su biodiversidad, aprovechamiento de residuos, diseño de alimentos y enseñanza de la química de alimentos.

Dr. Carlos Narvaez

PCQB06

Sampling is the chemist's responsibility.

Dr. Rodolfo Romañach

PCQB07

Aplicación de tecnologías ómicas a la autenticidad de alimentos: de la electroforesis a la Proteómica de próxima generación.

Dr. Ignacio Ortea

PCQB08

Industrial waste-derived nanomaterials for energy, health and environmental applications.

Dr. Edgar Mosquera

PCQB09

Desafíos de una educación química centrada en el aprendizaje.

Dra. Diana Faraías

PCQB10

Implementación de la sostenibilidad en las etapas tempranas del diseño de productos y procesos químicos.

Dr. Paulo César Narváez Rincón

PCQA01

Avances significativos en el estudio de los contaminantes orgánicos persistentes en Colombia.

Dr. Esteban Abad

PCQA02

Chlorosulfonium salts and a-chlorosulfides, versatile precursors of heterocycles.

Dr. Diego Gamba

PCQA03

Estudios sobre la solvatación de RESORCIN[4]ARENOS en solución.

Dr. Edgar Vargas

PCQA04

Educación química y sociedad en tiempos de incertidumbre.

Dr. Mario Quintanilla

PCQA05

Hacia La Economía del Hidrógeno.

Dr. Andrés Mantilla Zárate

PCQA06

Iron containing salts, Fe-oxides and Fe-complexes dramatically enhance solar water disinfection.

Dr. Cesar Pulgarín



PCQA07

Computational Design of Copper Ligands for Alzheimer's Disease.

Dr. Jorge Ali

Charlas Técnicas

CT01

Microplastics – comprehensive analytical workflows for improving the understanding of their occurrence.

Dra. Ruth Marfil-Vega

CT02

Connecting data: the way to create new value and accelerate your discovery.

Zach Baum; Jacob Al-Saleem

CT03

Retos en análisis cromatográficos de biomoléculas.

Alicia Guadalupe Soto Ramos

COMUNICACIONES ORALES

ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

ILFCL-252

IMPROVING ALL PEOPLE'S LIVES THROUGH THE TRANSFORMING POWER OF CHEMISTRY OUTREACH

Lily Raines, David Horwitz, Patricia Galvan, LaTrease Garrison.

SLFCL-95

CUESTIONES SOCIO-CIENTÍFICAS: POSIBILIDADES PARA ENSEÑAR CIENCIAS EN LA ESCUELA PRIMARIA

Jorge Cardoso Messeder, Ana Rita Goncalves Ribeiro de Mello, Caio Vitor Ferreira, Marcelo Augusto dos Santos.

SLFCL-200

CASOS DE ESTUDIOS DE CRISTALOGRAFÍA A NIVEL PRE-DOCTORAL: UNA ACTUALIZACIÓN

Peter J. Rosado Flores, Luke Czerwonka.

SLFCL-219

EL APRENDIZAJE EFECTIVO DE BIOQUÍMICA EN CIENCIAS DE LA SALUD A TRAVÉS DE LA GAMIFICACIÓN CONCEPTUAL

Diana Alexandra Ospina Riaño.

SLFCL-220

DIDÁCTICA E HISTORIA DE LA QUÍMICA: UN PUNTO DE ENCUENTRO DESDE UN ANÁLISIS ICONOGRÁFICO DE LA FILATELIA

Marlon Martínez-Reina, Ingrid Guzmán-Beltrán



SLFCL-298

ACTIVIDADES PARA EL APRENDIZAJE ACTIVO EN CLASES DE BIOQUÍMICA PARA ESTUDIANTES DE PREGRADO EN BIOLOGÍA

Geovanna Tafurt-García.

SLFCL-421

TENDENCIAS DE EDUCACIÓN EN CIENCIAS COMO CONSECUENCIA DEL COVID-19: INDICIOS A PARTIR DE UNA REVISIÓN DOCUMENTAL

Alexander Cárdenas Acero, Liliam Alexandra Palomeque Forero, Juliana Cañón Farieta, Julián David Ocampo Guzmán, Daniel Esteban Jiménez Correa.

FISICOQUÍMICA

ILBCL-112

SYNTHESIS OF ZnTiO₃/TiO₂ NANOCOMPOSITE SUPPORTING IN ECUADORIAN CLAYS FOR THE ADSORPTION AND PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF METHYLENE BLUE

Ximena Jaramillo-Fierro, Silvia González, Hipatia Jaramillo, Francesc Medina

ILBCL-117

THE OLIGOMER APPROACH: AN EFFECTIVE STRATEGY TO ASSESS PHENYLENE VINYLENE SYSTEMS AS ORGANIC HETEROGENEOUS PHOTOCATALYSTS

Cesar Augusto Sierra, Leon Perez, Mauricio Acelas

ILBCL-236

EXPLORING THE ROLE OF CAROTENOIDS IN THE SUSCEPTIBILITY OF STAPHYLOCOCCUS AUREUS TO THE EXPOSURE OF COLD ATMOSPHERIC PLASMA AND REACTIVE OXYGEN AND NITROGEN SPECIES

Gerson-Dirceu López, Chiara Carazzone, Joseph Lorent, Chad Leidy

SLBCL-139

EFFECTO DE LOS CAROTENOIDES EN EL COMPORTAMIENTO TERMOTRÓPICO DE MEMBRANAS REPRESENTATIVAS DE STAPHYLOCOCCUS AUREUS

Jessica Múnera-Jaramillo, Elizabeth Suesca, Gerson-Dirceu López, Małgorzata Jemioła Rzeminska, Kazimierz Strzałka, Chad Leidy, Marcela Manrique-Moreno.

SLBCL-187

EVALUACIÓN DE LA HIDROFOBICIDAD SUPERFICIAL DE LA CUTÍCULA DE LARVAS DE TERCER INSTAR DE *Diatraea saccharalis*, *Helicoverpa zea* Y *Chloridea virescens*

Diana Rocio Vasquez Carreño, Martha Isabel Gomez Alvarez, Diana Marcela Aragón Novoa.

SLBCL-219

CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA DE CARBONES ACTIVADOS PREPARADOS A PARTIR DE CUESCO DE PALMA AFRICANA EN EL PROCESO DE ADSORCIÓN DE CO₂

Sergio Alberto Acevedo Corredor, Liliana Giraldo Gutiérrez, Juan Carlos Moreno- Pirajan.



SLBCL-222

ESTUDIO TERMODINÁMICO DE LA SOLUBILIDAD DE LA SULFAMETAZINA EN MEZCLAS COSOLVENTES ETILENGLICOL+AGUA A DIFERENTES TEMPERATURAS.

Daniel Ricardo Delgado, Claudia Patricia Ortiz.

PETROQUÍMICA Y GEOQUÍMICA

SLLCL-51

CUANTIFICACIÓN ELEMENTAL EN MINERALES A PARTIR DEL TRATAMIENTO DE ESPECTROS EDS, UTILIZANDO EL MICROSCOPIO ELECTRÓNICO DE BARRIDO-SEM DEL SERVICIO GEOLÓGICO COLOMBIANO

David Andrei Contreras Fayad, Carolina Jiménez Triana, Mary Luz Peña Uruña.

SLLCL-55

DETERMINACIÓN DE LA EDAD RELATIVA DE ROCAS CALCÁREAS POR MEDIO DE LAS RELACIONES ISOTÓPICAS DE $\Delta^{13}C$ Y $\Delta^{18}O$ EN CARBONATOS DE LA SERRANÍA DEL PERIJÁ

Andrea Rocha Abella, Mary Luz Peña, Alejandro Piraquive, Maribel Moreno.

SLLCL-56

ESTUDIO DEL CIRCÓN NATURAL Z-SGC-3 COMO POTENCIAL MATERIAL DE REFERENCIA NATURAL PARA DETERMINAR EDADES U/PB POR LA-ICP-MS.

Jimmy Alejandro Muñoz, Carolina Jimenez, Alejandro Piraquive, Nicolás Villamizar, David Contreras, Mary Luz Peña.

SLLCL-180

ÍNDICES DE ORIGEN PARA HTP E HPA EN AMBIENTES ACUÁTICOS: CASO DE ESTUDIO EN LA QUEBRADA LA PERDIZ, FLORENCIA - CAQUETÁ.

Claudia-Yolanda Reyes, Katerine Botero Ñañez, Jairo Andrés Cerón Bolaños.

SLLCL-231

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE BIODIESEL EMPLEANDO CATALIZADORES HOMOGÉNEOS Y HETEROGÉNEOS

Guillermo Manuel González Guerra, Miriam Mayela Alcocer Anaya, Sofia del Pilar Cap González, Martín Alatorre Alatorre Ordaz, Fernando Israel Gómez Castro, Salvado Hernández Castro.

SLLCL-300

HIDROGEOQUÍMICA DEL AS EN LAS FUENTES DE AGUA QUE ABASTECEN EL ACUEDUCTO DE SANTA ROSA DE CABAL – RISARALDA, COLOMBIA.

Olger Giovani Mendoza Villabona, Lina Maria Tabares, Maria Clara Zuluaga, Margy Paola Acevedo, Gloria Prieto Rincón.

SLLCL-348

METODOLOGÍA PARA LA CONCENTRACIÓN DE CIRCONES EN ROCAS GRANITOIDES

CJohn Mauro Castaño, Fredy Rodriguez, Carlos Garcia.



SLCL-358

EVALUACIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE MERCURIO EN UNA INSTALACIÓN DE GENERACIÓN ELÉCTRICA A CARBÓN

Billy Rodríguez, Sonia Guerra, Manuel Romero.

PROCESOS, TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN

ILJCL-271

FROM LIGNIN-DERIVED PHENOLICS TO SECONDARY AMINES VIA CATALYTIC TRANSFORMATION ON Rh/C AND Pd/C

Luis Arteaga, Maray Ortega, Raydel Manrique, Romel Jiménez R.

SLJCL-42

ESTUDIO DE LA DETERMINACIÓN DE HIERRO EN VINOS EMPLEANDO SISTEMAS INTELIGENTES MEDIANTE EL USO DE SMARTPHONES

Rafael Alonso Salinas Téllez, Ily Maza Mejía.

SLJCL-46

OPTIMIZACIÓN EN LA DOSIS DE QUÍMICOS EMPLEADOS EN LA POTABILIZACIÓN Y SU EFECTIVIDAD EN LA REMOCIÓN DE MATERIA ORGÁNICA NATURAL

Victor Acevedo.

SLJCL-55

NANOSIZED APATITE COATINGS ON TITANIUM BY ACCELERATED BIOMIMETIC METHOD

Loreley Morejón-Alonso, Mauricio A. Bussulo, Eduardo González, Abel Fumero, Jesús González.

SLJCL-134

RESIDUOS DE BIOMASA PARA LA FABRICACIÓN DE ELECTROCATALIZADORES A BASE DE PUNTOS CUÁNTICOS DE CARBONO RECUBIERTOS CON NANOPARTÍCULAS DE PLATINO PARA REACCIONES MOR Y HER.

Santiago Urbano Narváez, Luisa D. Ramos Riascos, Cristian David Miranda Muñoz, Alfonso Enrique Ramírez Sanabria

SLJCL-215

EXTRACCIÓN CON FLUIDOS COMPRIMIDOS EN LATINOAMÉRICA, REALIDAD O FANTASÍA

Diego Ballesteros Vivas, Andrea del Pilar Sánchez Camargo, Jenny Paola Ortega Barbosa, Luis Ignacio Rodríguez Varela, Fabián Parada Alfonso.

SLJCL-288

ACETILACIÓN DE GLICEROL A ADITIVOS DE BIOCOMBUSTIBLE SOBRE CATALIZADOR DE GRAFENO SULFONADO

Luisa Ramos, Alfonso Ramirez, Cristián Miranda.

SLJCL-311

PRODUCCIÓN DE INMUNOGLOBULINAS AVIARES (IGYS) COMO HERRAMIENTA PARA LA DETECCIÓN DE ERITROPOYETINA EN COLOMBIA

Luisa María Caldas-Ortega, Laura Estefanía Riascos-Orjuela, María Helena Ramírez-Hernández, Gonzalo Jair Díaz-Gonzales.



SLJCL-312

EVALUACIÓN FUNCIONAL DE LOS TRANSPORTADORES NAD DE LEISHMANIA BRAZILIENSIS LBNDT2 Y LBNDT3, MEDIANTE ENSAYOS DE COMPLEMENTACIÓN DE LEVADURAS

Sharon Eliana Villamil-Silva, María Helena Ramírez-Hernández.

SLJCL-322

PRODUCCIÓN DE CIMENO POR PIRÓLISIS CATALÍTICA DE NEUMÁTICOS DESCARTADOS SOBRE PD SOPORTADO EN HALLOISITAS

Luis E. Arteaga-Pérez, Paula Osorio-Vargas, Cristian Campos, Cecilia Torres, Francisca Castillo-Puchi.

SLJCL-344

EFFECTO DE LA INCORPORACIÓN SUPERCRÍTICA DE CINAMALDEHÍDO SOBRE LAS PROPIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS Y DE DESINTEGRACIÓN DE NANOCOMPÓSITOS BASADOS EN PLA/LIGNINA

Alejandra Torres, Daniela Cerro, Gonzalo Bustos, Luis Constandil, Carolina Villegas, Francisco Rodríguez.

SLJCL-350

HERRAMIENTAS CONCEPTUALES PARA LA OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS DE DESTILACIÓN EXTRACTIVA EN LA PRODUCCIÓN DE ETANOL CARBURANTE UTILIZANDO ETILENGLICOL COMO SOLVENTE

César Augusto Sánchez Correa.

SLJCL-364

SISTEMA INSTITUCIONAL INTEGRADO DE LABORATORIOS DE LA UNIVERSIDAD DEL VALLE (SIILUV): UNA FÁBRICA DE CONOCIMIENTO Y DESARROLLO TECNOLÓGICO A TRAVÉS DE LA GESTIÓN OPTIMIZADA Y SOSTENIBLE DE LABORATORIOS.

Fernando Luna Vera, Diana Velasquez Ramirez, Carolina Villamil, Giseth Cardozo Pernia, Juan Manuel Peña Herrera.

SLJCL-418

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CATALIZADORES ACTIVOS EN LA OBTENCIÓN DE AMINOCOMPUESTOS

Doris Ruiz, Carolina Quezada, Karen Morales, André Rosa Martins, Luciene Santos Carvalho.

QUÍMICA AMBIENTAL Y AGRÍCOLA

ILICL-122

ADSORPTION OF TRICLOSAN ON CARBON MATERIALS FOR ITS DISPOSAL OF CONTAMINATED WATERS

Lázaro Adrián González Fernández, Nahúm Andrés Medellín Castillo, Raúl Ocampo Pérez, Héctor Hernández Mendoza

ILICL-683

OLIGO (PHENYLENE VINYLENE)-GRAFTED TiO₂ PHOTOCATALYST FOR VISIBLE-LIGHT DRIVEN CONTROL OF 17 β ESTRADIOL IN WATER

Mauricio Acelas, Nelson J. Castellanos, César A. Sierra



ILICL-168

OCCURRENCE AND DISTRIBUTION OF PERSISTENT ORGANIC POLLUTANTS (POPs) IN THE ATMOSPHERE OF THE ANDEAN CITY OF MEDELLIN, COLOMBIA

Boris Santiago Avila, Diana Pemberthy M, Gustavo A. Peñuela, Andrés Ramírez.

ILICL-294

Rh-CATALYZED AMINATION OF CYCLOHEXANONE: THROUGHPUT STUDY ON THE REACTION CONDITIONS

Raydel Manrique, Maray Ortega, Romel Jiménez, Luis E. Arteaga-Pérez.

ILICL-372

MAGNETIC MODIFICATION OF THE *Stenocereus griseus* AND *Melocactus* sp MUCILAGE, THROUGH CROSSLINKING METHOD.

Jeny Catalina Nitola Orduz, Lucia Marlen Moreno Bastidas

SLICL-50

OCURRENCIA Y DEPURACIÓN DE CONTAMINANTES EMERGENTES TIPO PRODUCTOS FARMACÉUTICOS Y DE CUIDADO PERSONAL EN AGUAS RESIDUALES DE LA UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE PEREIRA (UTP), COLOMBIA.

Juan Pablo Arrubla Vélez, Diego Paredes Cuervo, Janeth Cubillos Vargas, Juliana Peña Gómez.

SLICL-108

IMPACTO DE LAS EMISIONES VEHICULARES EN RESIDENCIAS CIRCUNDANTES A VÍAS DE ALTO TRÁFICO EN UNA CIUDAD ANDINA

David Chuquer-Sola, Santiago Ampudia, Francisco Ramírez, Carolina Puertas, Valeria Díaz-Suarez, Patricio Espinoza-Montero.

SLICL-123

USO DE LODOS GALVÁNICOS COMO MATERIA PRIMA EN LA INDUSTRIA CERÁMICA PARA LA MITIGACIÓN DE LA CONTAMINACIÓN AMBIENTAL

Jhon Jairo Castañeda Bocanegra, Gloria Ivonne Cubillos Gonzalez, Edgar Espejo Mora.

SLICL-130

EFFECTO DEL ÁCIDO 1-NAFTALENACÉTICO SOBRE ALGUNOS COMPONENTES DE RENDIMIENTO EN YUCA (*Manihot esculenta* Crantz) VARIEDAD MCol 2066.

Yuri Janio Pardo Plaza, Miriam Cantero Guevara, Jhonatan Ávila Arciria; Miranda Cardona, Cristian Miranda Cardona, Alonso Segura Delgado.

SLICL-177

INFLUENCIA DE PARÁMETROS FÍSICOQUÍMICOS DE CALIDAD DEL AGUA EN LA FORMACIÓN DE TRIHALOMETANOS Y ÁCIDOS HALOACÉTICOS EN AGUA DE PISCINA

William A Hernández Herrera, Olga I Vallejo Vargas, Carlos H Montoya Navarrete, Leonardo Beltrán Angarita.

SLICL-202

GENERACIÓN DE PRODUCTOS CON VALOR AGREGADO A PARTIR DE LA TRANSFORMACIÓN DE BIOMASA RESIDUAL

Beatriz Pava Gómez, Ariel M. Sarotti, Rolando A. Spanevello y Alejandra G. Suárez.



SLICL-248

SÍNTESIS DE REDES METALORGÁNICAS (MOFs) FUNCIONALIZADAS CON ÓXIDO DE GRAFENO PARA LA REMOCIÓN DE Ba, Cd Y Pb EN AGUA

Ivon Esther Valenzuela Jaramillo.

SLICL-274

ADSORCIÓN DEL GLIFOSATO EN DISOLUCIONES ACUOSAS UTILIZANDO ARCILLAS NATURALES IMPREGNADAS CON HIERRO

Yeyzon Javier Cruz, Ana María Montañez, Lisette Ruiz Bravo, Mery Carolina Pazos Zarama.

SLICL-293

EFICIENCIA DE REMOCIÓN DE DIVERSOS MICROCONTAMINANTES ORGÁNICOS EN HUMEDALES DE TRATAMIENTO

Amado Enrique Navarro Frómata, Jorge Antonio Herrera Cárdenas.

SLICL-294

SORCIÓN DE CARBOPLATINO DE MATRICES ACUOSAS EN CENIZAS DE CÁSCARA DE ARROZ

Dixon Andi Grefa.

SLICL-326

ENVIRONMENTAL SUSTAINABILITY OF AGRICULTURE SYSTEMS BASED ON THERMODYNAMIC INDICATORS

Yannay Casas Ledón, Javiera Silvana Silva, Yenisleidy Martínez Martínez.

SLICL-338

UNA APROXIMACIÓN METODOLÓGICA PARA LA IDENTIFICACIÓN DE VARIABLES QUE AFECTAN EL COMPORTAMIENTO MECÁNICO DE MATERIALES ARCILLO LIMOSOS Y SUS PROPIEDADES MINERALÓGICAS: CASOS DE ESTUDIO SABANA DE BOGOTÁ, EJE CAFETERO

Yolanda Calderón, Julián Rodríguez, Luz Myrian Gómez, John Deiver Bonilla

SLICL-340

USO DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL PARA EVALUAR EL RIESGO POR PRESENCIA DE SUSTANCIAS QUÍMICAS EN EL RÍO CAUCA

Rodrigo Sarria Villa, William Ocampo Duque, Martha Páez.

SLICL-355

EVALUACIÓN DE ESPECIES LIXIVIALES EN RELAVES PROVENIENTES DE PROCESAMIENTO DE ORO FILONIANO EN DISTRITO MINERO SANTA ROSA DEL SUR –Dpto. DE BOLÍVAR- APLICACIÓN MÉTODO TCLP.

Verónica Ruiz Solano, Liseth Irene Franco Rosero.

SLICL-359

EVALUACIÓN QUÍMICO AMBIENTAL DEL CONTENIDO DE MERCURIO EN MUESTRAS DE SEDIMENTOS ACTIVOS DE RÍO EN DISTRITO MINERO DE SANTA ROSA DEL SUR-BOLÍVAR, POR E.A.A.-G.H.

Annie Alexandra Arango Escobar, Daniel Esteban Castañeda Pinzón.



SLICL-388

CENIZAS VOLANTES COMO ADSORBENTES DE BAJO COSTO PARA LA RETENCIÓN DE ATRAZINA EN SUELO

María José Martínez-Cordón, Erika J. Pérez-Manosalva, Yazmin Agámez-Pertuz.

SLICL-589

STUDY OF BIOLOGICALLY CHELATING COMPOUNDS IN METAL-PROMOTED ALZHEIMER DISEASE

Areli Flores-Gaspar.

QUIMICA ANALITICA

SLACL-57

ESTUDIO DE LA TÉCNICA DE DATACIÓN POR CARBONO-14 EN EL SERVICIO GEOLÓGICO COLOMBIANO

Daniel G. Pinacho, Miguel Rojas Amaya, Guillermo Parrado Lozano, Mary Peña Urueña.

SLACL-74

DETECCIÓN Y REMOCIÓN DE METALES PESADOS EN AGUA RESIDUAL MEDIANTE STRIPPING ANÓDICO VOLTAMPEROMÉTRICO CON ELECTRODOS DE TRABAJO MODIFICADOS Y ENERGÍA FOTOVOLTAICA

Diomer Hernán Aristizábal Buitrago, Gonzalo Taborda Ocampo, Laura Cardona, Camila Betancurth Vásquez, Jhon Edward Patiño Patiño, Juan Camilo Carvajal Ocampo, Pablo Valencia Osorio.

SLACL-162

USO DE LA BIOMASA MUERTA DE BACTERIAS *Lysinibacillus sphaericus* COMO FASE EXTRACTANTE EN UN SISTEMA DE MICROEXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA PARA LA DETERMINACIÓN DE MERCURIO INORGÁNICO EN MEDIO ACUOSO

Ingrid Quinchanegua, Ricardo Rivas.

SLACL-173

VALIDACIÓN DE UN MÉTODO POR CROMATOGRAFÍA DE GASES PARA EL ANÁLISIS DE NITROSAMINAS EN ENSAYOS DE MIGRACIÓN DE EMPAQUES PLÁSTICOS.

Felipe Rico Sarmiento, Diana Cristina Sinuco León, Cristian Nicolas Patiño Gomez, Diego Alejandro Mora Rojas

SLACL-215

DEVELOPMENT AND CERTIFICATION OF REFERENCE MATERIAL OF PESTICIDES RESIDUES IN AVOCADO

Diego Alejandro Ahumada Forigua, Laura V Morales Erazo, Andrés Sebastián Salinas Trujillo, Amadeo Fernandez-Alba, José Francisco Díaz Galeano, Clemens Jaitner, Hermann Unterluggauer, Laura Quinn.

SLACL-232

ESTUDIO DE LA CINÉTICA DE FORMACIÓN DEL CRISTAL β -HEMATINA EN PRESENCIA DE ANTIMALARICOS EN UN MEDIO ACUOSO.

Julieth Herrera, Julian Zapata, Karen Garcia, Cesar Barrero, Adriana Pabon.



SLACL-240

NUEVAS FIBRAS SPME HECHAS EN LABORATORIO CON UN REVESTIMIENTO VERDE BASADO EN UNA ARCILLA MODIFICADA MEDIANTE DEPOSICIÓN FÍSICA DE VAPOR PARA LA DETERMINACIÓN DE HIDROCARBUROS EN MUESTRAS DE AGUAS

Diana Castillo Gómez, Jhon Fiscal Ladino, Álvaro Pulzara Mora, Milton Rosero Moreano.

SLACL-247

MATERIALES DE REFERENCIA: EFECTO DE LA LIXIVIACIÓN SOBRE LA INCERTIDUMBRE DEL VALOR CERTIFICADO.

Juliana Serna Saiz, Paula Lucía Sanchez Garcia, Diego Alejandro Ahumada Forigua

SLACL-311

DETERMINACIÓN DE α -pirrolidinopentiofenona (α -PVP) MEDIANTE UN BIOSENSOR ELECTROQUÍMICO BASADO EN LA ENZIMA CYP2D6

Andrés Felipe Lugo Vargas, William Giovanni Quevedo Buitrago, Diana Carolina Chaves Silva,, Jaime Fernando Martínez Suárez

SLACL-540

PREPARACIÓN Y CERTIFICACIÓN DE UN MATERIAL DE UN MATERIAL DE REFERENCIA CERTIFICADO DE AFLATOXINA B1 EN ACETONITRILLO

Laura V Morales Erazo, Silvia Ramírez, Juliana Serna, Yeraldin Aguilar , Ivonne. A Gonzáles, Diego. A Ahumada Forigua

QUÍMICA DE ALIMENTOS

ILKCL-269

CHEMICAL CHARACTERIZATION OF TEQUILA MATURATION PROCESS AND THEIR CONNECTION WITH THE PHYSICOCHEMICAL PROPERTIES OF THE CASK

Walter M Warren Vega, Rocío Fonseca Aguiñaga,, Linda Victoria González Gutiérrez,, Francisco Carrasco Marín,, Ana Itzél Zárate Guzmán,, Luis Alberto Romero Cano

SLKCL-118

OBTENCIÓN DE EXTRACTOS ANTIOXIDANTES DE CÁSCARA DE MANDARINA (C. RETICULATA VAR. ARRAYANA) Y SU USO COMO AGENTE PROTECTOR CONTRA LA OXIDACIÓN LIPÍDICA DE UNA MAYONESA.

Franco-Arnedo, G. Buelvas-Puello, L.M. Miranda-Lasprilla, D. Martínez-Correa, H.A. Parada-Alfonso, F.

SLKCL-128

USO DE UNA RELACIÓN INSTRUMENTAL-SENSORIAL PARA EVALUAR TEXTURA DURANTE EL DISEÑO DE UN PONQUÉ CON ADICIÓN DE CASCARILLA DE CACAO

Jorge Villamizar Villamizar, Liliam Palomeque Forero.

SLKCL-137

DISEÑO DE UN PRODUCTO HORNEADO ADICIONADO CON FIBRA DIETARIA PROVENIENTE DE LA CASCARILLA DE CACAO (*Theobroma cacao* L.)

Laura Melissa Ramírez Gómez, Liliam Alexandra Palomeque Forero.



SLKCL-188

INFLUENCIA DEL PROCESO DE PREPARACIÓN DE LA MUESTRA EN LA DETERMINACIÓN DEL CONTENIDO DE MATERIA SECA EN AGUACATE HASS (PERSEA AMERICANA. MILL. VAR. HASS).

Giraldo, J. M.; Ramírez, S.L., González, I. A.; Barrios-Guio, J.

SLKCL-191

VALIDACIÓN DE MÉTODO Y DETERMINACIÓN DE CADMIO, PLOMO Y ZINC EN GRANOS DE CACAO POR LA TÉCNICA DE DIGESTIÓN ASISTIDA POR MICROONDAS CON ESPECTROMETRÍA DE ABSORCIÓN ATÓMICA.

Felipe Arcila-Zambrano, Olga I. Vallejo-Vargas, Carlos H. Montoya-Navarrete, Leonardo Beltrán-Angarita.

SLKCL-285

EXTRACCIÓN VERDE DE COMPUESTOS BIOACTIVOS PRESENTES EN LOS RESIDUOS DEL BENEFICIO DEL CACAO (*Theobroma cacao*. L.)

Vladimir Ernesto Vallejo-Castillo, Juan David Benavides-Gómez, Angie Daniela Solarte-Romo.

SLKCL-287

VALORIZACIÓN DE RESIDUOS DE PLAZAS DE MERCADO PARA LA OBTENCIÓN DE COMPUESTOS BIOACTIVOS

William Alexander Diaz-Lopez, Vladimir Ernesto Vallejo-Castillo, Esteban Hernan Arteaga-Cabrera, Kimberly Yaritza Vallejo-Escobar, Gregory Ordoñez-Gomez, Oswaldo Osorio-Mora.

SLKCL-296

EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIFÚNGICA DE LOS ACEITES ESENCIALES DE TOMILLO (*Thymus vulgaris*) Y LIMÓN (*Citrus lemon*) CONTRA *Botrytis* sp. causante DEL MOHO GRIS EN UCHUVA (*Physalis peruviana* L.)

Angie Vaca Portillo, Oswaldo Osorio.

SLKCL-311

POLIFENOLES Y ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE EN POROTOS AUTÓCTONOS CHILENOS (*Phaseolus vulgaris* L.)

Nélida Nina, Cristina Theoduloz, Guillermo Schmeda-Hirschmann.

SLKCL-344

EVALUACIÓN DE LOS NIVELES DE ARSÉNICO Y OTROS METALES TÓXICOS EN EL ARROZ PRODUCIDO EN CHILE E IMPORTADO PARA PROMOVER Y ASEGURAR LA INOCUIDAD ALIMENTARIA.

Eimmy E. Ramírez, Karen S. Bastías, Viviana L. Becerra, Gabriel H. Donoso, Mario O. Paredes, Jorge C. Yáñez.

SLKCL-345

EVALUACIÓN DE LAS CONDICIONES DE HIDRÓLISIS DE PROTEÍNAS DE LACTOSUERO A ESCALA DE LABORATORIO

Castellanos Baez, Y. T., Aponte Colmenares, A. P., Prieto Suarez, G. A., Muvdi Nova, C. J.



QUÍMICA DE MATERIALES, POLÍMEROS Y NANOTECNOLOGÍA

ILGCL-161

CHOLESTEROL-BASED AMPHIPHILIC POLYMERIC NANOPARTICLES FOR IMPROVED CANCER CHEMOTHERAPY

Laura Gonzalez-Fajardo, Dennis Ndaya., Rajeswari Kasi., Xiuling Lu

ILGCL-205

NATIVE STARCH-FILM FORMATION STUDY FROM ANDEAN CROPS FOR POTENTIAL SUSTAINABLE BIOPLASTICS

Sandra Arroyave, Liliana Ávila-Martín., Elma Naranjo., Jairo Perilla., Paulo Cesar Narváez., Albeiro Cadavid,

ILGCL-259

CHITOSAN-GRAFTED CARBON NANO-ONIONS NANOCOMPOSITE SCAFFOLDS FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS

Carlos David Grande Tovar, Carlos Humberto Valencia Llano, José Hermínsul Mina Hernandez

ILGCL-284

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF SUNFLOWER OIL-BASED NON-ISOCYANATE POLYURETHANES FILMS OBTAINED THROUGH A SOLVENT AND CATALYST-FREE ROUTE

María del Pilar Maya., Betty Lucy López., Carmiña Gartner

ILGCL-289

GREEN AND SCALABLE SYNTHESIS OF bioMOFs BASED ON Mg²⁺ AND PHENOLIC ACIDS EXTRACTED FROM COCOA WASTE

Andrea Yulieth Garzón Serrano., Cesar Augusto Sierra Avila

SLGCL-50

DESARROLLO DE COMPLEJOS DE INCLUSIÓN PARA APLICACIÓN EN MATERIALES DE ENVASE ANTIFÚNGICO DE ALIMENTOS

Cristina Muñoz-Shugulí, Francisco Rodríguez, Abel Guarda, Ma. José Galotto

SLGCL-66

MEMBRANAS DE INTERCAMBIO PROTÓNICO BASADAS EN MATERIALES COMPUESTOS SÍLICA-POLÍMERO CON POTENCIAL APLICACIÓN EN CELDAS DE COMBUSTIBLE

Natalia Andrea Agudelo Pérez, Betty Lucy López Osorio

SLGCL-85

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UN COPOLÍMERO BASADO EN POLIACRILAMIDA - ACIDO MALEICO PARA CAMBIOS DE HUMECTABILIDAD DE ROCAS RESERVORIOS.

José Cárdenas

SLGCL-87

EFFECTO DE V₂O₅ EN LA SÍNTESIS DE MEMBRANAS DE INTERCAMBIO PROTÓNICAS A PARTIR DE ESTIRENO ESTER ACRÍLICO Y QUITOSANO

Dina Mendoza Beltrán, Alvaro Realpe Jiménez



SLGCL-145

MEMBRANAS ELECTROHILADAS COMPUESTAS DE UNA MATRIZ POLIMÉRICA Y SISTEMAS HÍBRIDOS METAL/NTC PARA FILTRACIÓN Y SANITIZACIÓN DE AIRE

Andrea García Jiménez, Laura Pineda Bonilla, Manuela Alzate Tobón, Jaime Gallego Marin

SLGCL-150

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE SISTEMAS HÍBRIDOS M/NTC CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA O ANTIVIRAL, PARA LA FABRICACIÓN DE FILTROS DE SANITIZACIÓN DE AIRE

Laura Carolina Pineda Bonilla, Andrea García,, Manuela Alzate,, Gallego Jaime

SLGCL-162

EFFECTO DEL pH EN LA REACCIÓN SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS DE OXIDO DE COBRE UTILIZANDO COMO AGENTE REDUCTOR EXTRACTOS DE *Psidium guajava* Y *Moringa oleifera*

José Gabriel López Ortiz, Pablo Andrés Castellanos Pinzón, Carlos Jovany Ulloa Suarez,, Debora A. Nabarlatz,

SLGCL-207

SÍNTESIS DE PELÍCULAS DE HEMATITA DOPADAS CON FÓSFORO PARA OXIDACIÓN DEL AGUA INDUCIDA POR LUZ SOLAR.

Juliana Herrera, Sebastián Montoya,, Juan Manuel Jaramillo

SLGCL-219

PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ÓPTICAS DEL GRANATE $\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce}^{3+}$ DOPADO CON Fe^{3+}

Christian Fabian Varela Olivera, Yeison Daniel Molina Monsalve, Santiago Sandoval Gutiérrez, Luis Carlos Moreno Aldana, Carlos Arturo Parra Vargas

SLGCL-222

PREPARACIÓN DE CATALIZADORES BASADOS EN FERRITAS DE SODIO NaFeO_2 PARA LA COMBUSTIÓN CATALÍTICA DE HOLLÍN PROVENIENTE DE LAS ARENAS DE FUNDICIÓN

Aaron Achancecaray Ninantay, Romulo Cruz Simbrón, Mario Hurtado Cotillo,, Gino Picasso,, Rosario López

SLGCL-265

ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES FÍSICAS Y MECÁNICAS DE MEZCLAS TERMOPLÁSTICAS DE ALMIDÓN/ÁCIDO POLILÁCTICO MODIFICADAS CON AGENTES ÁCIDOS

Carolina Caicedo Cano, Heidy Lorena Calambás Pulgarín

SLGCL-293

EVALUACIÓN DEL EFECTO DEL SOPORTE (SiO_2 , C y Al_2O_3) Y TAMAÑO DE CLÚSTER METÁLICO EN LA AMINACIÓN DE FENOLES SOBRE CATALIZADORES DE Pd

Maray Ortega Díaz, Raydel Manrique Suárez,, Daviel Gómez Acosta,, Romel Jiménez Concepción,, Luis Ernesto Arteaga Pérez



SLGCL-311

FUNCIONALIZACION DE TEXTILES CON NANOPARTICULAS DE SiO_2 Y TiO_2

José Miguel Montero Vasquez, Brayan Stick Betin Bohórquez, Lady Johana Endo Aguilar, Indry Milena Saavedra Gaona, Carlos Arturo Parra Vargas, Rolando Javier Rincon,, Daniel Llamosa Pérez,, Mónica Losada Barragán

SLGCL-319

NANOPARTÍCULAS DE Fe_3O_4 @ SiO_2 FUNCIONALIZADAS CON UN PÉPTIDO BIOMARCADOR COMO POTENCIAL AGENTE DE CONTRASTE.

Brayan Stick Betin Bohórquez, José Miguel Montero Vasquez, Lady Johana Endo Aguilar, Indry Milena Saavedra Gaona, Carlos Arturo Parra Vargas, Karina Vargas Sanchez,, Rolando Javier Rincon, Daniel Llamosa Pérez,, Mónica Losada Barragán, .

SLGCL-338

OXIDACIÓN FOTOELECTROQUÍMICA DE AGUA CON NANOBARRAS DE TiO_2 REDUCIDAS Y MODIFICADAS CON PUNTOS CUÁNTICOS DE CARBONO

Jhon Puerres, Sergio Polanía, Andrés Pérez, Pablo Ortiz, María-T Cortés.

SLGCL-344

ELECTRODEPOSICIÓN DE PEDOT- Al_2O_3 PARA CELDAS INVERTIDAS DE PEROVSKITA CON EFICIENCIA Y POTENCIA ESTABILIZADA MEJORADA.

Eider Erazo, Martín Gómez, Leonardo Rios, Edgar Patiño, Pablo Ortiz, María-T Cortés

SLGCL-372

PROPIEDADES ELECTRÓNICAS, ELECTROQUÍMICAS Y BACTERICIDAS VÍA ERO DE NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDOS METÁLICOS ACTIVADAS FOTOQUÍMICAMENTE

Yenny Avila, Jhonatan Corrales, Israel Valencia, Yuberth Garcia

SLGCL-584

SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA (Ag-NP) EN TELA DE ALGODÓN UTILIZANDO EXTRACTOS DE HOJAS DE *Eucalyptus globulus*

Pablo Salgado, Luis Bustamante, Manuel Francisco Meléndrez, Olga Rubilar, Claudio Salazar, Gladys Vidal Vidal

QUÍMICA DE PRODUCTOS NATURALES Y FARMACÉUTICOS

ILHCL-64

OPTIMIZATION OF THE ULTRASOUND ASSISTED EXTRACTION (UAE) OF *Passiflora ligularis* LEAVES FLAVONOIDS AND EVALUATION OF THEIR HYPOGLYCEMIC ACTIVITY

Paula Michelle Sepúlveda Ramos, Sandra Echeverry, Geison Costa, Marcela Aragón

ILHCL-71

DESIGN OF A NOVEL BIOASSAY FOR EVALUATION OF INSECTICIDAL ACTIVITY OF VOLATILE ORGANIC COMPOUNDS (VOCs) EMITTED BY BACTERIA

Albert Patiño Restrepo, Diana Cristina Sinuco León, Juliet Angélica Prieto Rodríguez



ILHCL-102

FLAVONES ISOLATED FROM *Scutellaria incarnata* ROOTS AND THEIR NEUROPROTECTIVE EFFECTS IN SH-SY5Y AND CAD CELLS

Carlos Alberto Vásquez-Londoño, Melanie-Jayne R. Howes, Gonzalo Arboleda, Maritza Adelina Rojas-Cardozo

ILHCL-297

MORPHOLOGICAL IDENTIFICATION AND CHEMICAL SCREENING OF MUSHROOMS FROM THE MADIDI NATIONAL PARK

Sergio M. Espinoza Orellana, Elizabeth Melgarejo Estrada, Sonia Torrico Vallejos

SLHCL-51

RELACIÓN DE LA PRODUCCIÓN METABÓLICA DE BIOSURFACTANTES CON ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA PROVENIENTES DE BACTERIAS MARINAS.

Albert Danilo Patiño Restrepo, Manuela Montoya Giraldo, Marynés Quintero de la hoz, Lina M. Blandón García, Javier Gómez León

SLHCL-131

EVALUACIÓN DE LOS EXTRACTOS DE LIPPIA ORIGANOIDES Y THYMUS VULGARIS EN MODELOS DE MEMBRANAS BACTERIANAS POR ESPECTROSCOPIA INFRARROJA

Maria Camila Klais Luna, Andrés Martínez,, Claudia Ortiz,, Marcela Manrique-Moreno

SLHCL-134

PÉPTIDOS DERIVADOS DE LACTOFERRICINA BOVINA (LFCINB) CON ACTIVIDAD ANTICANCERÍGENA RÁPIDA Y SELECTIVA CONTRA CÁNCER DE MAMA

Diego Sebastián Insuasty Cepeda, Andrea Carolina Barragán Cárdenas,, Alejandra Ochoa Zarzosa, Joel Edmundo López Mesa, Javier Eduardo García Castañeda,, Zuly Jenny Rivera Monroy

SLHCL-136

AGENTES CITOTÓXICOS SELECTIVOS CONTRA CÉLULAS $CaCo-2$ DERIVADOS DE PÉPTIDOS CORTOS ANALÓGOS DE LACTOFERRICINA

Andrea Carolina Barragán-Cárdenas, Diego Sebastian Insuasty Cepeda, Adriana Umaña Pérez, Joel Edmundo López Meza, Alejandra Ochoa Zarzosa, Zuly Jenny Rivera Monroy, Javier Eduardo García Castañeda

SLHCL-146

PURIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE LA LECTINA DEL VENENO DE CROTALUS DURISSUS CUMANENSIS

Shaha Noor Alam, Nohora Angelica Vega, Ariadna Rodriguez, Andrés Reyes

SLHCL-147

ESTUDIO DE LAS LECTINAS PRESENTES EN EL ALGA ROJA TRICLEOCARPA CYLINDRICA

Angie Patricia Duarte Tayo, Nohora Angélica Vega Castro, Mónica Puyana Hegedus, Edgar Antonio Reyes Montaña



SLHCL-149

DISEÑO Y SÍNTESIS DE INHIBIDORES DE LA RECAPTACIÓN DE SEROTONINA ISRS ANÁLOGOS A FÁRMACOS COMERCIALES MEDIANTE VIRTUAL SCREENING BASADO EN ESTRUCTURA Y EN LIGANDO.

James Guevara Pulido, Natalia Quintana, Herly Herrera

SLHCL-167

DIFERENCIACIÓN DE ESPECIES DE PHYTOPHTHORA CAUSANTES DEL TIZÓN TARDÍO: DETECCIÓN RÁPIDA MEDIANTE PERFILES DE LÍPIDOS Y PÉPTIDOS/PROTEÍNAS POR MALDI-MS

Paula Galeano García, Fabio Neves dos Santos, Natalia Guayazán,, Silvia Restrepo, Edna Dora Martins Newman Luz,, Marcos Eberlin,, Chiara Carazzone

SLHCL-181

EFFECTO ANTIMICROBIANO, ANTIBIOFILM Y ANTIQUORUM SENSING DE ACEITES ESENCIALES DE PLANTAS COLOMBIANAS FRENTE A *E. coli*, *P. aeruginosa* Y *Salmonella Typhimurium*

Jennifer Andrea Ruiz Duran, Marlon Yesid Cáceres Ortiz, Claudia Cristina Ortiz López.

SLHCL-183

ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA, ANTI-BIOFILM Y ANTI-QUORUM SENSING DE EXTRACTOS VEGETALES FRENTE A BACTERIAS PATÓGENAS

Marlon Cáceres Ortiz., Elena Stashenko., Claudia Ortiz Lopez

SLHCL-192

EVALUACIÓN DE PÉPTIDOS EN LESIONES DE LEISHMANIASIS CUTÁNEA FIJADAS CON FORMALINA E INCLUIDAS EN PARAFINA (FFPE) UTILIZANDO ESPECTROMETRÍA DE MASAS DE IMÁGENES (MALDI-MSI)

Betsy Muñoz-Serrano, Eduardo Chicano-Galvez, Enrique Mejía-Ospino, Patricia Escobar-Rivero.

SLHCL-239

EVALUACIÓN DE LA CAPACIDAD ANTIOXIDANTE Y CITOTÓXICA DE EXTRACTOS OBTENIDOS A PARTIR DE BASIDIOMAS DE TRAMETES VERSICOLOR.

Juan Carlos Quitian Romero, Sergio Armando Loza Rosas, Juan Pablo Ortiz Rosas,, Sandra Montoya Barreto

SLHCL-243

GLICOLÍPIDOS: AISLAMIENTO, DIVERSIDAD QUÍMICA Y POTENCIAL BIOLÓGICO

Jhon Fredy Castañeda Gómez, Rogelio Pereda Miranda, Mabel Clara Fragozo Serrano, Eunice Ríos Vásquez, Paula Charry Sánchez.

SLHCL-280

COMPARACIÓN DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DE TRES VARIEDADES DE CANNABIS NO PSICOACTIVO DEL CAUCA Y SU POSIBLE APLICACIÓN MÉDICA

Paola Arango Romero, Ricardo Benítez Benítez, Jaime Martín

SLHCL-295

ACTIVIDADES BIOLÓGICAS Y CARACTERIZACIÓN QUÍMICA, POR UHPLC-ESI+-Orbitrap-MS, DEL EXTRACTO DE LA FLOR DE *Posoqueria latifolia*

Lady J. Sierra Prada, Raquel E. Ocazonez, Elizabeth Quintero, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko



SLHCL-324

DESARROLLO DE FOTOPROTECTORES SOLARES CON BASE EN EXTRACTOS AISLADOS DE BIOMASA RESIDUAL DE *L. origanoides*

Jesica Julieth Mejía Medina, Raquel E. Ocazonez, Elizabeth Quintero, Eduardo Ricci, Jairo R. Martínez-Morales, Elena E. Stashenko

SLHCL-347

ACOPLAMIENTO MOLECULAR DE DERIVADOS PIRAZOLOISOQUINOLINICOS DIRIGIDOS AL RECEPTOR GABAA Y EL RECEPTOR 5HT1A

Estefany Arias

SLHCL-348

ESTUDIO DE LA CAPACIDAD DE EXTRACTOS VEGETALES PARA POTENCIAR EL EFECTO ANTIFÚNGICO DE LIPOPEPTIDOS DE BACILLUS TEQUILENSIS EA-CB0015 CONTRA FUSARIUM OXYSPOURUM Y COLLETOTRICHUM ACUTATUM

Julieta María Ramírez Mejía, Valeska Villegas Escobar, Luis Alejandro Gómez Ramírez, Luis Fernando Echeverri

SLHCL-359

DETERMINACIÓN DE PARÁMETROS DE EXTRACCIÓN Y CARACTERIZACIÓN POR HPLC Y LC/MS DE EXTRACTOS HIDROETANÓLICOS DE *Scutellaria incarnata* (LAMIACEAE)

Silvia M. Porras, Lady J. Sierra, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko

SLHCL-364

AISLAMIENTO, CARACTERIZACIÓN, CUANTIFICACIÓN Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE LOS FLAVONOIDEOS DE LA ESPECIE VEGETAL HELIOTROPIUM ANGIOSPERMUM MURRAY

Arlen Camilo Ceballos Vargas

QUÍMICA INORGÁNICA

SLDCL-19

SELF-ASSEMBLY AND SUPRAMOLECULAR ISOMERISM IN 1D METAL-ORGANOMETALLIC NETWORKS BASED ON TRANSITION METAL ASSEMBLIES FROM 1, 1'-FERROCENE-DICARBOXYLIC ACID AND ANCILLARY NITROGEN HETEROCYCLE LIGANDS

Maria Liliana Ospina Castro, Alexander Briceño, Nataly Galan, Edward E. Avila, Leonardo Pacheco, Andreas Reiber

SLDCL-96

LA PRIMERA FAMILIA DE MODELOS ESTRUCTURALES Y FUNCIONALES DEL SITIO ACTIVO DE UNA OXIGENASA MUY PARTICULAR: ACIREDUCTONE DIOXIGENASA (ARD)

Santiago Toledo, Glenn Blade, Jennifer Jaimes, Riffat Parveen, Wrenell Ilustre, Diego Saldaña, Denisa A. Ivan, Vincent M. Lynch, Thomas R. Cundari



SLDCL-127

THIN FILMS OF TRANSITION METAL OXYNITRIDES: AN EXCELLENT ALTERNATIVE TO INCREASE THE CORROSION RESISTANCE OF STAINLESS STEELS.

B.F. Méndez, N.C. López, G.I. Cubillos.

SLDCL-191

SÍNTESIS Y RESISTENCIA A LA CORROSIÓN DE OXINITRUROS DE ZIRCONIO-CERIO

Brian Felipe Mendez Bazarro, Gloria Carolina Numpaque, Gloria Ivonne Cubillos González

SLDCL-194

MODIFICACIÓN DE POLIETILENIMINA RAMIFICADA CON GOMA DE MESQUITE PARA MEJORAR SU BIOCMPATIBILIDAD Y PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS

Ana María Pinilla Torres, Hugo Gallardo Blanco, Celia Sánchez Dominguez, Margarita Sánchez - Dominguez

SLDCL-220

SÍNTESIS HIDROTHERMAL DE UN MATERIAL COMPUESTO A PARTIR DE DESECHOS DE YUCA (MANIHOT ESCULENTA CRANTZ), POLIESTERENO, PAPEL ALUMINIO Y ACEITE ESENCIAL DERIVADO CONCHAS DE NARANJA.

Roiner E. Ruidiaz,, Viviana Montañez Valderrama,, José H. Quintana Mendoza,, Diana Alexandra Torres Sánchez

SLDCL-372

FOTOOXIDACIÓN SELECTIVA DE VALENCENO Y TIMOL POR EL COMPLEJO DIOXO-MOLIBDENO(VI)BIPYRIDINA ANCLADO EN TiO₂

Jane Angelica Neira Dulcey, Henry Martínez Quiñonez, Edgar Alberto Páez Mozo, Fernando Martínez Ortega

SLDCL-377

DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA PARA MAPEO DE LA PARTÍCULA DE ORO MEDIANTE MICRO FLUORESCENCIA DE RAYOS X (μ -FRX)

Jose Bonney Ruiz, Oscar Fernando González Vera, Julian Velez Correa

QUÍMICA ORGÁNICA

SLCCL-8

PLATOS BIODEGRADABLES A BASE DE NOPAL.

Martha Vázquez Briones, Maria del Carmen Vázquez Briones, Moisés Mata García, Beda Luz Caporal Sayavedra, Eric Ceballos Palmeros, Jazmín Itzel Pacheco López

SLCCL-92

SÍNTESIS DE ALCALOIDES AZA-BICÍCLICOS POR ACTIVACIÓN DE IMIDAS

Yovanny Quevedo-Acosta, Igor Días-Jurberg, Diego Gamba-Sánchez

SLCCL-121

SISTEMA PIRAZOLO[1,5-A]PIRIMIDÍNICO: UN FLUORÓFORO EMERGENTE PARA APLICACIONES FOTOFÍSICAS

Alexis Tigreros, Jaime Portilla.



SLCCL-127

SÍNTESIS Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIFÚNGICA PARA DERIVADOS DE 2-(N-AZOLIL)-1-(4-PIRAZOLIL)ETANOL

Sandra Lorena Aranzazu Giraldo, Jaime Antonio Portilla Salinas

SLCCL-146

SÍNTESIS DE ALCALOIDES AZA-BICÍCLICOS POR ACTIVACIÓN ELECTROFÍLICA DE IMIDAS

Yovanny Quevedo-Acosta, Igor D. Jurberg, Diego Gamba-Sánchez

SLCCL-166

N-ALQUILACIÓN DE 3-CIANO-2(1H)-PIRIDONAS: SÍNTESIS REGIOSELECTIVA Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTITUMORAL

Kevin Salamanca Perdigón, Hugo Rojas Sarmiento, Jaime Portilla Salinas, Diana Becerra Córdoba, Juan Castillo Millán.

SLCCL-175

AMIDACIÓN DIRECTA DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS NO ACTIVADOS CON AMINAS

Angélica Andrea Salinas Torres, Hugo Rojas Sarmiento, José Martínez Zambrano, Jaime Portilla Salinas, Diana Becerra Córdoba, Juan Castillo Millán

SLCCL-191

HÍBRIDOS MOLECULARES INSPIRADOS EN RIVASTIGMINA Y ÁCIDOS CINÁMICOS COMO POTENCIALES AGENTES MULTITARGET CONTRA LA ENFERMEDAD DE ALZHEIMER: DISEÑO, SÍNTESIS Y EVALUACIÓN BIOLÓGICA.

Marlyn Rada, Wilson Cardona, Karina Sierra, Edison Osorio, Luis Alfonso Gonzales Molina, Rafael Posada Duque, Andres Yepes

SLCCL-199

SÍNTESIS DE CHALCONAS HÍBRIDAS Y SU POTENCIAL APLICACIÓN COMO INHIBIDORES DE CORROSIÓN

Carlos Andrés Coy Barrera, Inti Camilo Monge, Tatiana Bolaños, Diego Cárdenas, Diego Quiroga Daza

SLCCL-239

SÍNTESIS DE 3-HIDROXI-2,3-DIHIROBENZO[b] FURANOS ANÁLOGOS DE COMBRETASTATINA A-4 CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTITUMORAL

Cristian David Tocancipá Manrique, Hugo Rojas Sarmiento, Jaime Portilla Salina, Juan Castillo Millán, Diana Becerra Córdoba

SLCCL-254

RUTAS ALTERNATIVAS PARA LA SÍNTESIS DEL PRECURSOR DE ANÁLOGOS DE BRASINOESTEROIDES (20S)-6-Oxo-5 α -Pregn-2-eno-20-carboxilato de metilo.

María Nuñez Gutierrez, Luis Espinoza Catalán, Cesar González, Paula Droguett

SLCCL-274

OBTENCIÓN DE ALILFENOLES ASISTIDO POR MICROONDAS

Manuel Diaz Maldonado, Lautaro Taborga, Susana Restrepo, Ligia Llovera



SLCCL-340

EVIDENCIA DE QUIRALIDAD PUNTUAL DEPOSITADA EN NITRÓGENO NO CUATERNIZADO EN SISTEMAS HETEROCÍCLICOS DE TIPO N-ALQUIL-ESPIRO[CICLOHEXANO-1,4-PIRAZOLO][1,4]TIAZEPINONICOS.

Christian Becerra Rivas, Fabian Orozco Lopez, Paola Cuervo Prado

SLCCL-343

ESTUDIO EN EL ESTADO SÓLIDO DE LA INTERACCIÓN ARENO/PERFLUOROARENO PRESENTE EN MOLÉCULAS HÍBRIDAS TRIAZOL-CUMARINA PARA LA SÍNTESIS DE COMPUESTOS ORGÁNICOS CON PROPIEDADES METÁLICAS

Rigoberto Barrios-Francisco, Abraham Colín Molina, David Corona Becerril, Janeth Cruz De La Cruz,

QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

ILECL-279

ACETOPHENONE ADSORPTION ON MONOMETALLIC AND BIMETALLIC PT-CO MODEL CATALYST SURFACES: A DFT STUDY

Santiago Gómez Jaramillo, Juan F. Espinal, Alejandro Montoya, Diana López

ILECL-659

MECHANISTIC INSIGHTS INTO THE BPO₄-DRIVEN CATALYTIC FORMATION OF CYCLIC CARBONATES FROM CO₂ AND EPOXIDES

Fernando Castro-Gómez, Anderson Gonzalez-Vargas, and Pedro J. Castro

SLECL-139

EFEECTO SOLVATOCRÓMICO DE (E)-4-HIDROXI-N'-(1-(p-TOLIL)ETILIDEN)BENZOHIDRAZIDA: UN ESTUDIO TEÓRICO.

ALISSON INES RODELO HENRIQUEZ, ALFREDO PEREZ GAMBOA

SLECL-156

DISEÑO DE MOLÉCULAS CON ACTIVIDAD ANTI-TOXOPLASMA GONDII DERIVADAS DEL NÚCLEO 4-TIAZOLIDINONA BASADA EN UN MODELO DE PREDICCIÓN QSAR

Lina Marcela Pedraza Castillo, Edwar Cortés González, Gladys Elena Salcedo Echeverry, Cristian Rocha, Diego Alejandro Molina Lara, Gerardo Ramos, Jorge Enrique Gómez Marín

SLECL-191

ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE PROTEÍNAS CARBONILADAS CON ALDEHÍDOS REACTIVOS DERIVADOS DE PRODUCTOS FINALES DE LIPOXIDACIÓN AVANZADA MEDIANTE SIMULACIÓN POR DINÁMICA MOLECULAR

Darío Méndez Cuadro, Rafael Pineda-Alemán, Antistio Alviz-Amador, Humberto Pérez-González, Erika Rodriguez-Cavallo

SLECL-290

EVALUACIÓN IN SILICO DE DERIVADOS DE NAFTOQUINONA CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTICHAGAS

Lina Sofía Prieto Cárdenas, Jovanny Arlés Gómez Castaño, Pablo Duchowics, Diana Nossa, Agobardo Cárdenas Chaparro.



SLECL-327

ESPECTROSCOPIA COMPUTACIONAL DE IONES EN SOLUCIÓN

Lina Uribe, Sara Gómez, Tommaso Giovannini,, Franco Egidi,, Albeiro Restrepo

SLECL-374

ANÁLISIS DEL EFECTO DE VARIACIONES EN EL GRADO DE INSATURACIÓN DE LAS CADENAS CARBONADAS DE GLICEROFOSFOLÍPIDOS SOBRE EL COMPORTAMIENTO ELÁSTICO Y DE FASE DE BICAPAS LIPÍDICAS MEDIANTE DINÁMICA MOLECULAR

Maria Clara Quintero Gómez, Jorge David, Luis Alejandro Gómez

SLECL-390

ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA INSERCIÓN DEL NAPROXENO ANIÓNICO EN UNA BICAPA FOSFOLIPÍDICA

Natalia Andrea Rojas Valencia, Sara Gómez, Francisco Núñez, Chiara Cappelli, Albeiro Restrepo

SLECL-436

ANÁLISIS ESTRUCTURAL Y DE DOCKING MOLECULAR PARA COMPUESTOS TIPO BENZAMIDA; IMPLICACIONES DEL ENLACE DE HALÓGENO

K. Arango-Daraviña, R. Moreno-Fuquen, E. García, Juan C. Tenorio

SLECL-609

SÍNTESIS, ESTRUCTURA CRISTALINA, SUPERFICIES DE HIRSHFELD, POTENCIAL ELECTROSTÁTICO Y DOCKING MOLECULAR DEL COMPUESTO (5-AMINO-3-(METILTIO)-1H-1,2,4-TRIAZOL-1-IL)(TIOFEN-2-IL)METANONA

K. Arango-Daraviña, R. Moreno-Fuquen. A. Kennedy

SLECL-686

ANÁLISIS FISCOQUÍMICO DE LA INTERACCIÓN ENTRE ÓXIDO DE GRAFENO FUNCIONALIZADO Y POLISULFUROS DE LITIO EN CÁTODOS DE BATERÍAS DE LITIO-AZUFRE A PARTIR DE CÁLCULOS DE TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD

Arnovis Enrique Yepes Payares

COMUNICACIONES ORAL PÓSTER

QUÍMICA ANALÍTICA

ILACL-76

DEPTH-DEPENDENT PIGMENT PROFILES IN PHYTOPLANKTON SAMPLES FROM THE CARIBBEAN OCEAN USING MALDI-MS

Luis M. Díaz-Sánchez, Milena Benavides, María Criales, Cristian Blanco-Tirado, Marianny Y. Combariza

SLACL-187

EVALUACIÓN DEL EFECTO DEL USO ENCAPSULADOS SOBRE LA ESTABILIDAD DE MATERIALES DE REFERENCIA DE PLAGUICIDAS EN AGUACATE

Laura Morales Erazo, Andrés Sebastian Salinas Trujillo, Ivonne Alejandra Gonzalez, Diana Sinuco León, Diego Ahumada Forigua

SLACL-308

BIOSENSOR AMPEROMÉTRICO BASADO EN LA INMOVILIZACIÓN DE ACETILCOLINESTERASA EN ORGANOARCILLAS APLICADO A LA DETECCIÓN DE



CLORPIRIFOS.

Sergio Andrés Ospina Rodríguez, Natalia Prieto Castañeda, Milton Hernando Rosero Moreano
SLECL-327

SLACL-359

**DETERMINACIÓN DE ORO EN SOLUCIONES CIANURADAS POR
ESPECTROFOTOMETRÍA ULTRAVIOLETA VISIBLE. MÉTODO DE PÚRPURA DE
CASSIUS**

Liseth Irene Franco Rosero, Luz Maria Arbeláez, Verónica Ruiz Solano

QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

ILECL-62

**A SYSTEMATIC DFT STUDY OF THE ORDER OF O-O BOND DISSOCIATION
ENTHALPY WITHIN A SERIES OF PEROXIDES**

Danilo Carmona, Esteban Vöhringer-Martinez, Pablo Jaque



QUÍMICA ORGÁNICA

SLCCL-298

REACCIÓN ENTRE L-CISTEÍNA Y ÁCIDO 6-MALEIMIDOHEXANOICO: CARACTERIZACIÓN DE LOS PRODUCTOS Y ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DE PH

Victor Alfonso Niño Ramírez, Diego Sebastian Insuasty Cepeda, Zuly Jenny Rivera Monroy,
Mauricio Maldonado Villamil

QUÍMICA INORGÁNICA

SLDCL-37

SÍNTESIS, ESTUDIOS ESPECTROSCÓPICOS, ESTRUCTURALES Y CÁLCULOS COMPUTACIONALES DE ALGUNOS NITROSILOS DE METALES DE TRANSICIÓN

L. Diana Castañeda Trujillo, Carlos Franca, Oscar Piro, Jorge Güida

SLDCL-463

OXIDACIÓN DE ACETATO DE COLESTERILO VÍA TAED-PERÓXIDO Y CATALIZADOR DE JACOBSEN

Hernán Gabriel Astudillo Campo, Olga Lucia Hoyos Saavedra

SLDCL-66

ESTABILIDAD DE PARTÍCULAS OBTENIDAS A PARTIR DE COMPLEJOS DE COORDINACIÓN DE QUITOSANO – Fe(III) EN CONDICIONES FISIOLÓGICAS SIMULADAS

Claudia Elena Echeverri Cuartas, Natalia Andrea Agudelo Pérez, Carmiña Gartner Vargas

SLDCL-68

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL Y ELECTRÓNICA DE COMPLEJOS DE ORO (III) CON LIGANDOS NHC DERIVADOS DE LA ACRIDINA COMO POTENCIALES AGENTES ANTICANCERÍGENOS

Dilan Ballesteros Peinado, Maria Ospina Castro, Renso Visbal Acevedo, Jhon Zapata Rivera

ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

SLFCL-113

HERRAMIENTAS BIOINFORMÁTICAS, UNA OPORTUNIDAD PARA LA ENSEÑANZA DE LA BIOQUÍMICA EN CONTEXTO

Rodrigo Rodríguez Cepeda

QUÍMICA DE MATERIALES, POLÍMEROS Y NANOTECNOLOGÍA

SLGCL-115

OBTENCIÓN DE FIBRAS BIOPOLIMÉRICAS CON ESTRUCTURA NÚCLEO/PARED Y ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA MEDIANTE ELECTROHILADO

Cristian Patiño Vidal, Eliezer Velásquez, María José Galotto, Carol López de Dicastillo



SLGCL-126

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UN AGENTE COAGULANTE A PARTIR DEL ALMIDÓN DE CÁSCARA DE PLÁTANO (*Musa paradisiaca*), PARA SU USO EN TRATAMIENTO DE AGUAS

Henry Adolfo Lambis Miranda, Jorgelina C. Pasqualino, Jorge R. Puello Silva, Camilo Cortes Perez, Leymer Perez

SLGCL-191

EFFECTO DE LA SULFONACIÓN EN LA SÍNTESIS DE MEMBRANAS DEINTERCAMBIO PROTÓNICAS A PARTIR DE ESTIRENO ESTER ACRÍLICO Y QUITOSANO CARGADAS CON V₂O₅

Dina Mendoza Beltrán, Alvaro Realpe Jiménez

SLGCL-229

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y MAGNÉTICAS DE LOS GRANATES Sm₃- xGdxFe₅O₁₂ (x = 0.0–1.0)

Angela Maria Morales Rivera, Julio Elio Rodríguez López, Julián Andrés Munevar Cagigas, Elisa Baggio Saitovitch, Luis Carlos Moreno Aldana, Carlos Arturo Parra Vargar

SLGCL-383

DEPOSICIÓN POR LÁSER PULSADO DE PELÍCULAS DELGADAS DE TiO₂ Y SU FUNCIONALIZACIÓN CON ÁCIDO FÓLICO

Linda Esperanza Bertel Garay, José Miguel García Martín, Rogelio Ospina, David A. Miranda

QUÍMICA DE PRODUCTOS NATURALES Y FARMACÉUTICOS

SLHCL-152

EVALUACIÓN DE CAPACIDAD ANTIOXIDANTE DE EXTRACTOS VEGETALES PRODUCIDOS A PARTIR DE RESIDUOS AGROINDUSTRIALES GENERADOS EN COLOMBIA.

Julian Mauricio Guerrero Rodriguez, Edier Felipe Gómez Gómez, Gina Yesenia Sampayo Velásquez, José Gabriel López Ortiz, Debora Alcida Nabarlantz

QUÍMICA AMBIENTAL Y AGRÍCOLA

SLICL-67

OBTENCIÓN DE BIOCARBONES A PARTIR DEL PROCESO DE CARBONIZACIÓN HIDROTHERMAL (HTC) DE LOS RESIDUOS AGROINDUSTRIALES DE PLÁTANO Y CAÑA DE AZÚCAR

Jenny Marcela Vélez Gómez, Lina Marcela Orozco Arboleda, Luz Ángela Veloza Castiblanco, Michael Renz

PETROQUÍMICA Y GEOQUÍMICA

SLLCL-5

INVESTIGACIÓN PARA LA APLICACIÓN DE UN NUEVO LUBRICANTE EN UNA EMPRESA DE PETRÓLEO.

Amparo Zulueta Torres, Beatriz Pérez Barcala, Walfrido Cue, Maykel Padrón



SLLCL-25

**OCURRENCIA DE MERCURIO EN CARBONES: CONTENIDO Y CORRELACIONES –
COMPORTAMIENTO DEL MERCURIO DESDE LA MINA Y EL CICLO DE
COMBUSTIÓN, NTE DE SANTANDER, COLOMBIA**

Sonia Lucía Guerra Lemoine, Manuel Hernando Romero Moren

SLLCL-55

**QUÍMICA MINERAL DE LOS GRANATES DE LA UNIDAD ORTONEIS DE BERLÍN,
MACIZO DE SANTANDER, COLOMBIA**

Carolina Jiménez Triana, Jimmy Alejandro Muñoz Rocha, Mary Luz Peña Urueña, Maykel Padrón

COMUNICACIONES PÓSTER

ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

SLFCL-7

**EMPLEO DE SOFTWARE DE SIMULACIÓN DE PRÁCTICAS DE LABORATORIO EN EL
DESARROLLO DE LAS CLASES PRÁCTICAS EN LA CÁTEDRA QUÍMICA ANALÍTICA I
DE LA FCQ - UNA**

Amapola Mónica Cabrera de Vera.

SLFCL-403

**IMPLEMENTACIÓN DE ESTRATEGIAS PEDAGÓGICAS PARA LA ENSEÑANZA DE
NOMENCLATURA ORGÁNICA MEDIADAS POR EL TRABAJO COLABORATIVO A
TRAVÉS DEL JUEGO.**

Danny Alejandro Arteaga Fuertes, Luis Alberto Lenis Velasquez, Marino Chavarro Cordoba.

SLFCL-405

QUÍMICA PLEGADA.

Alfonso Enrique Ramírez Sanabria.

SLFCL-408

**MEZCLANDO DIVERSIÓN Y QUÍMICA PARA DESPERTAR EL INTERÉS POR EL
APRENDIZAJE DE LAS CIENCIAS EN ESTUDIANTES DE GRADO 11 DE LA
INSTITUCIÓN EDUCATIVA COMERCIAL DEL NORTE (POPAYÁN-COLOMBIA).**

Andrea Carolina Cabanzo Olarte¹, Danny Alejandro Arteaga Fuertes, Paola Andrea Gomez Buitrago.

SLFCL-458

**IMPLEMENTACIÓN DE LA QUIMIOINFORMÁTICA EN LA ENSEÑANZA DE LA
QUÍMICA EN NIVEL MEDIO DEL PROGRAMA DE BACHILLERATO INTERNACIONAL
EN EL GIMNASIO VERMONT.**

Marcela Cruz, Sonia Beltrán, Alejandra Buesaquillo.

SLFCL-459

**EXPLORACIÓN DEL AMBIENTE DE APRENDIZAJE EN CASA DE LOS ESTUDIANTES
DE UN COLEGIO EN LA CIUDAD DE BARRANCABERMEJA, SANTANDER, COLOMBIA;
EN ÉPOCA DE PANDEMIA COVID-SARS 19.**

Edwin de la Cruz Montoya, Antonio Francisco Gomez Martinez.



SLFCL-468

IMPLEMENTACIÓN DE PODCASTS PARA PROMOVER LA INTERACCIÓN ENSEÑANZA - APRENDIZAJE DE QUÍMICA DURANTE LA PANDEMIA.

Aymer Alejandro Alvarado, Aida Liliana Barbosa López.

FISICOQUÍMICA

ILRCL-738

STUDIES OF ARSENIC ADSORPTION ONTO NZVI/RGO: EXPERIMENTAL AND THEORETICAL APPROACHES FOR SURFACE PHENOMENA.

C. V. Lima, J. Juan, R. Faccio, E. A. González, C. Pistonesi, M. F. Pistonesi, J. S. Rebouças.

SLBCL-5

FORMULACIÓN DE RECUBRIMIENTO COMESTIBLE A BASE DE PECTINA Y CHILE POBLANO (*Capsicum annuum* var. *Annuum*) PARA INCREMENTAR LA VIDA ÚTIL DE CHILE HABANERO (*Capsicum chinense*).

María del Carmen Vázquez-Briones, Moisés Mata-García, Dayra del Carmen Reyes-Hernández, Tania Edelin Pérez de la Cruz.

SLBCL-7

ADSORCIÓN Y ESTUDIO CALORÍMETRICO DE CO₂ EN MATERIALES ADSORBENTES PREPARADOS A PARTIR DE CUESCO DE PALMA.

Sergio Alberto Acevedo Corredor, Liliana Giraldo Gutiérrez, Juan Carlos Moreno Piraján.

SLBCL-77

DETERMINACIÓN EXPERIMENTAL DE LA ENERGÍA ESPECÍFICA EN UNA CONFIGURACIÓN DE BATERÍA ELÉCTRICA BASADA EN ELECTRODOS DE GRAFENO OXIDADO MULTICAPA, EMPLEANDO ALGUNOS ELECTROLITOS SÓLIDOS DE COMPLEJOS NITROSILADOS

Cristián González, L. Diana Castañeda Trujillo, Jhon Jairo Prías.

SLBCL-79

CARACTERIZACIÓN FISICOQUÍMICA Y HUMECTABILIDAD DE EMULSIONES DE *Beauveria bassiana* SOBRE LARVAS DE TERCER INSTAR DE *Diatraea saccharalis*, *Helicoverpa zea* Y *Chloridea virescens* CARACTERIZACIÓN, ÁNGULO CONTACTO, ENTOMOPATÓGENO.

Diana Rocío Vasquez Carreño, Martha Isabel Gómez Álvarez, Diana Marcela Aragón Novoa.

SLBCL-299

AB INITIO STUDY OF POLYSULFIDE REACTIVITY ON THE SURFACE OF GRAPHIC CATHODES WITH STRUCTURAL DEFECTS FOR LITHIUM-SULFUR BATTERIES.

Arnovis Enrique Yepes Payares.

SLBCL-399

FOTOSENSIBILIZADORES SUPRAMOLECULARES APLICADOS A TERAPIA FOTODINÁMICA.

José Robinson-Duggon, Nory Mariño-Ocampo, Denis Fuentealba.

SLBCL-467

PREPARACIÓN DE CATALIZADORES BASADOS EN ÓXIDOS DE NÍQUEL(II) Y CERIO(III) MÁSCOS PARA LA CONVERSIÓN CATALÍTICA DE HOLLÍN PROVENIENTE DE ARENAS DE FUNDICIÓN.

Nelson Gustavo Arcos Bartolo, Rómulo Cruz, Mario Hurtado-Cotillo, Rosario Lopez Cisneros



SLBCL-490

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CATALIZADORES MESOPOROSOS TIPO CaO/SiO₂

Jesús Sigifredo Valencia Ríos, Luis Carlos Moreno Aldana, Grey Cecilia Castellar Ortega.

SLBCL-499

SÍNTESIS DE CARBÓN ACTIVADO A PARTIR *Zea mays* L. (maíz morado) IMPREGNADO CON Np-Ag PARA EL DESARROLLO DE SUPERCAPACITORES

Huarote Emily, Cárdenas-Riojas Andy, Planes Gabriel A. Monje Ivonne E., Calderón Juan C¹. López Meza E, Baena-Moncada Angélica M.

SLBCL-507

ESTUDIO ESPECTROSCÓPICO Y CINÉTICO DE LA RELACIÓN ENTRE DERIVADO DE TETRAZINA E IONES CÚPRICOS. EVALUACIÓN COMO SENSOR COLORIMÉTRICO DE COBRE.

Guillermo E. Quintero, Carlos Rojas-Romo, Margarita E. Aliaga.

SLBCL-517

ESTUDIO ESPECTROSCÓPICO DE LA INTERACCIÓN 7-DIETILAMINOCUMARINA-BENZOTIAZOL Y CUCURBIT[7]JURILO. EFECTO DE LA PRESENCIA DE SULFITO.

Kevin Droguett Muñoz, Olimpo García Beltrán, Margarita Aliaga Miranda.

SLBCL-666

ESTUDIO DE LA CONDUCTIVIDAD TÉRMICA APLICADO A CADENAS SIMPLES DE POLIETILENO UTILIZANDO LA FUNCIÓN DE GREEN.

Álvaro García, Eider Iván Vivas, Javier Vergara, Ricardo Vivas-Reyes.

PETROQUÍMICA Y GEOQUÍMICA

ILLCL-510

EFFECT OF MONO AND DIVALENT IONS ON WETTABILITY ALTERATION DURING ADJUSTED BRINE COMPOSITION WATERFLOODING ON SANDSTONE ROCK.

Fabián L. Monares Bueno, Gustavo Maya, Eduardo Manrique, José Antonio Henao.

SLLCL-338

ACONDICIONAMIENTO DE DATOS GEOQUÍMICOS PARA MAPEO GEOQUÍMICO REGIONAL EN COLOMBIA

Jiménez, J.F., Pérez, A., Mendoza, O.G. 1, Mendoza, O., Prieto, G.

SLLCL-491

EFECTO DE FORMULACIONES SURFACTANTE/NANOPARTÍCULAS EN LA SEPARACIÓN DE CRUDOS PESADOS PRESENTES EN SUPERFICIES TIPO ARENISCA.

Michell A. Jiménez, Lizeth N. Melo, Leidy C. Márquez, Diego F. Pinto, Daniel Molina V, Emiliano Ariza, Adan Y. León.

PROCESOS, TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN

ILJCL-587

PRESSURIZED LIQUID EXTRACTION OF PHENOLIC COMPOUNDS FROM BRAZIL NUT (BERTHOLLETIA EXCELSA HBK) SKIN.

Wilson V. Vásquez, M. Pilar Cano and Tiziana Fornari.



SLJCL-715

CIENCIA + MEDIO AMBIENTE + ECONOMÍA = BIOECONOMÍA, LA FÓRMULA DEL PRESENTE PARA UN MEJOR FUTURO.

Yesmith Santos Panqueva, Bárbara De Las Mercedes Moreno Murillo, Carlos Eduardo Narváez Cuenca, Fabián Parada Alfonso, Francisco José Arias Aragonés.

SLJCL-54

RECUPERACIÓN DE COMPUESTOS BIOACTIVOS PRESENTES EN RESIDUOS VEGETALES GENERADOS EN PLAZAS DE MERCADO

William Alexander Diaz López, Vladimir Ernesto Vallejo-Castillo, Esteban Hernán Arteaga Cabrera, Kimberly Yarittza Vallejo Escobar, Gregory Ordoñez Gómez, Oswaldo Osorio Mora.

SLJCL-497

GENERACIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE FORMALDEHIDO IN SITU PARA LA SÍNTESIS DE NOPOL EN UN MICROREACTOR DE FLUJO CONTINUO.

Diana C. García, Jorge H. Sánchez, Juan D. Martínez, Edwin A. Alarcón, Aída Luz Villa.

SLJCL-498

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE AGREGADOS ENZIMÁTICOS ENTRECruzADOS (CLEAs) DE UNA NOVEDOSA PEROXIDASA DE *Panicum maximum* PARA LA DEGRADACIÓN DE ÍNDIGO CARMÍN.

Angie V. Pérez N., Diana P. Vargas-Delgadillo, John J. Castillo, Oveimar Barbosa.

SLJCL-523

OBTENCIÓN DE BIOCATALIZADORES EN FASE SOLIDA DE GLUCOSIDASA DE ASPERGILLUS NIGER Y SU APLICACIÓN EN LA SÍNTESIS DE GLICOSIDOS DE CARVACROL.

Jenny Alejandra Avila Ospina, Luis Oveimar Barbosa, Diana Paola Vargas.

SLJCL-531

REMOCIÓN DE FENOL EN SOLUCIONES ACUOSAS USANDO CARBÓN ACTIVADO PREPARADO A PARTIR DE CUESCO DE PALMA AFRICANA.

Cristian H. Ospina Téllez, Diana P. Vargas- Delgadillo, Luis Oveimar Barbosa.

SLJCL-547

OBTENCIÓN DE DERIVADOS DE B-GALACTOSIDASA (B-GAL) DE KLUYVEROMYCES LACTIS Y ESCHERICHIA COLI A TRAVÉS DE ESTRATEGIAS DE INMOVILIZACIÓN Y MODIFICACIÓN QUIMICO-ESTRUCTURAL.

Leon Pardo Diego A., Barbosa Oveimar Luis O., Vargas Delgadillo Diana P.

SLJCL-550

INMOVILIZACIÓN DE PEROXIDASA DE PALMA REAL (*Roystonea regia*) SOBRE CARBÓN ACTIVADO Y SU APLICACIÓN EN LA DEGRADACIÓN ENZIMÁTICA DE FENOL EN SOLUCIONES ACUOSAS.

Cristian H. Ospina Téllez, Diana P. Vargas- Delgadillo y Luis Oveimar Barbosa.

SLJCL-552

EFEECTO DE LAS CONDICIONES DE EXTRACCIÓN EN LA OBTENCIÓN DE PECTINA A PARTIR DE RESIDUOS AGROINDUSTRIALES DE CAFÉ (*COFFEA ARÁBICA*)

Pérez Mora, W. Mojica, J.



SLJCL-732

UTILIZACIÓN DE BIOMASA RESIDUAL DE LA PAPA DEL DEPARTAMENTO DE BOYACÁ PARA LA GENERACIÓN DE HIDROCHAR POR CONVERSIÓN HIDROTHERMAL Y SU APLICACIÓN EN SUELO EROSIONADO.

Juliana Maritza Zarate Jimenez¹; María del Pilar Triviño Restrepo; Luis Fernando Lozano Gómez; Yeimy Fernanda Hernández Lasso.

SLJCL-746

SUBPRODUCTOS HORTOFRUTÍCOLAS PARA LA BIOECONOMÍA, APROVECHAMIENTO DE BIOMASAS CON TÉCNICAS DE EXTRACCIÓN SOSTENIBLES

Lili Johanna Rodríguez Gallo, Bárbara De Las Mercedes Moreno Murillo, Carlos Eduardo Narvárez Cuenca, Fabián Parada Alfonso, Francisco José Arias Aragonés, Yesmith Santos Panqueva, Nury Gineth Infante.

SLJCL-614

OPTIMIZACIÓN DE LA PRODUCCIÓN DE NANOCELULOSA BACTERIANA Y SU POSTERIOR ESCALADO USANDO MÉTODOS CONVENCIONALES.

Carlos Molina-Ramírez, Piedad Gañán, Robin Zuluaga, Juan Álvarez-Caballero.

SLJCL-735

EVALUACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE POLIESTIRENO COMO COLECTOR DE CARBÓN EN LA FLOTACIÓN DE UN MINERAL CARBONOSO

Javier Ernesto Vilasó Cadre, Delia M. Ávila Márquez, Alien Blanco Flores, Iván Alejandro Reyes Domínguez, Helen Paola Helen Toledo Jaldin.

QUÍMICA AMBIENTAL Y AGRÍCOLA

SLICL-267

RESIDUOS DE TETRACICLINAS INDUCEN CARBONILACIÓN IN VITRO EN PROTEÍNAS MUSCULARES DE PECHUGA DE POLLO

Márquez Lázaro Johana, Méndez Cuadro Darío, Rodríguez Cavallo Erika.

SLICL-395

RETENCIÓN DE METALES PESADOS EN RESIDUOS LIGNOCELULÓSICOS AGROINDUSTRIALES DE FIQUE (*Furcraea* sp.).

Jaime Andrés Parra Reyes, Edier Humberto Pérez.

SLICL-400

EFFECTO DE LA ADICIÓN DE LOMBRICOMPOST SOBRE LA DEGRADACIÓN DE CLORPIRIFOS EN MUESTRAS DE SUELO BAJO CONDICIONES CONTROLADAS. SOLARTE ORDÓÑEZ MARICELA.

SLICL-409

CONTAMINACIÓN POR MICROPLÁSTICOS EN DIFERENTES MATRICES DE LA BAHÍA DE ASUNCIÓN, PARAGUAY.

Diana Diez-Pérez-Núñez, Inés Arenas, Erenia Maidana, Luz Rodríguez, Christian Trauth, Fátima Yubero.

SLICL-441

OBTENCIÓN DE UN PRESERVANTE PARA EL LÁTEX NATURAL DEL ÁRBOL *Hevea brasiliensis* QUE CONSERVE SUS PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS.

Gustavo Barrios Atencia, Gilmar Santafé Patiño.



SLICL-447

TRANSFORMACIÓN DE TERPENOS EMPLEANDO BIOCARBÓN ACTIVADO CÍTRICO ÁCIDO.

Jaime-Andrés Becerra, Michell Danniela Vásquez, Aída-Luz Villa.

SLICL-487

OPTIMIZACIÓN DE LAS CONDICIONES PARA LA PREPARACIÓN DE CARBÓN ACTIVADO A PARTIR DE CÁSCARA DE CACAO PARA LA REMOCIÓN DE SALES.

Daniel Molina V., Adan-Yovani León, Juan-Ricardo Rincón.

SLICL-530

LA PRESIÓN ANTRÓPICA SOBRE EL AGUA SUBTERRÁNEA: UN ESTUDIO DE CASO EN MÉXICO.

Amado Enrique Navarro Frómata, David Navarrete Rosas.

SLICL-531

REMOCIÓN DE FENOL EN SOLUCIONES ACUOSAS USANDO CARBÓN ACTIVADO PREPARADO A PARTIR DE CUESCO DE PALMA AFRICANA.

Cristian H. Ospina Téllez, Diana P. Vargas-Delgadillo, Luis Oveimar Barbosa.

SLICL-532

CALIDAD HÍDRICA DE LOS HUMEDALES DE LA CUENCA DEL RÍO TEBICUARY, PARAGUAY

Derlysa Colmán, Alba Giménez, Lilian García, Saori Nakagoe, Rebeca González, Rosa Degen, Diana Diez-Pérez-Núñez

SLICL-533

NIVELES DE MERCURIO TOTAL, PARÁMETROS HEMATOLÓGICOS Y BIOQUÍMICOS EN HABITANTES DEL CONSEJO COMUNITARIO AIRES DE GARRAPATERO (SANTANDER DE QUILICHAO, CAUCA).

Karina Caballero-Gallardo, Javier Galvis-Ballesteros, Jenny Palomares-Bolaños, Maria Alcalá-Orozco1, Jesús Olivero-Verbel,

SLICL-536

APROVECHAMIENTO DE LA CÁSCARA DE SOJA PARA LA GENERACIÓN DE PRODUCTOS DE INTERÉS INDUSTRIAL

Beatriz Pava-Gómez, Ariel Sarotti, Rolando Spanevello y Alejandra Suárez.

SLICL-595

MUESTREO PASIVO DE CONTAMINANTES EMERGENTES UTILIZANDO LÁMINAS DE CORCHO MINIATURIZADAS COMO FASE SORBENTE

Alejandra Molina-Balmaceda, Inmaculada Cerrato, Daniel Arismendi, Inés Ahumada, Pablo Richter.

SLICL-613

EVALUACIÓN DE MÉTODOS DE EXTRACCIÓN PARA POLIHIDROXIBUTIRATO PRODUCIDO POR *Bacillus megaterium* B2.

Diana C. Uribe Ribero, Marianny Y. Combariza Montañez, Mabel J. Quintero Silva.

SLICL-661

ESTUDIO DE LA ADSORCIÓN DE MERCURIO SOBRE CARBONES ACTIVADOS FUNCIONALIZADOS

Diana P. Vargas-Delgadillo, Oscar D. Caicedo y Luis Oveimar Barbosa.



SLICL-672

DETERMINACIÓN DE LOS PARÁMETROS DE ESTRÉS OXIDATIVO EN LARVAS DE PECES MEDAKA (*oryzias latipes*) EXPUESTAS A TOXINAS DEL GRUPO ÁCIDO OKADAICO.

Carlos García, Diego Figueroa, Iskra A. Signore, Héctor Contreras, Miguel L. Concha.

QUÍMICA ANALÍTICA

ILACL-452

EXPERIMENTAL ENDPOINT CALCULATION FROM THE THEORETICAL COULOMETRIC TITRATION CURVE FOR POTASSIUM HYDROGEN PHTHALATE CERTIFICATION.

J.L Smith, J. A Ágreda, A. Sandoval, H. Torres.

ILACL-447

CADMIUM QUANTIFICATION BY SQUARE WAVE ANODIC STRIPPING VOLTAMMETRY USING BISMUTH FILM ELECTRODE: “IN SITU” INTERNAL STANDARD CALIBRATION AND SINGLE-POINT STANDARD ADDITION.

María Camila Gonzalez-Basto, Andrea del Pilar Sandoval-Rojas, Jesús Alberto Ágreda Bastidas, Carlos Andrés España-Sánchez.

SLACL-97

DIAFILTRACIÓN ANALÍTICA: UNA NUEVA APROXIMACIÓN ANALÍTICA DEL MÉTODO DE LAVADO EN PROCESOS DE RETENCIÓN EN FASE LÍQUIDA ASISTIDA POR POLÍMEROS.

Arturo Espinosa-Duque, Mayra A. Mora, Manuel Palencia

SLACL-101

ANÁLISIS RESIDUAL DE PLAGUICIDAS ORGANOCORADOS Y ORGANOFOSFORADOS EN AGUACATE HASS (*Persea americana Mill. cv.*)

Juan Pablo Betancourt-Arango, Cesar Augusto Ossa-Jaramillo, Gonzalo Taborda Ocampo.

SLACL-106

DETERMINATION OF SILICON IN WHEAT LEAVES WITH ATR-FTIR AND CHEMOMETRICS

Felipe Beltran, Yohana Cabrera, Andres Cabrera.

SLACL-116

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE ÓXIDO DE ZINC (ZnO) DOPADO CON Ag CON POTENCIAL ACTIVIDAD EN FOTOCATÁLISIS.

Briyitte Salazar, William Vallejo.

SLACL-391

DISCRIMINACION DE PAPELES DE UN DOCUMENTO ANTIGUO PERUANO MEDIANTE ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES, XRF PORTÁTIL Y FTIR.

Celina Luízar Obregón, Marco A. Zamalloa Jara, Flor L. Rojas Arizapana, Yuri J. Chura Huayllani, Janet F. Gonzales Bellido, Mariela Alvarez Cabeza, Jorge Olivera Olivera.



SLACL-439

**CONTAMINACIÓN POR MERCURIO EN PECES DE LOS RÍOS CAUCA Y QUINAMAYÓ:
DETERMINACIÓN DEL RIESGO PARA LA SALUD DE LAS COMUNIDADES
AFRODESCENDIENTES DEL DEPARTAMENTO DEL CAUCA (COLOMBIA)**

Karina Caballero-Gallardo, Angela Calderon-Ocoro, V, Neda Alvarez-Ortega, Jenny Palomares-Bolaños, Maria Alcalá-Orozco, Jesús Olivero-Verbel,.

SLACL-458

**ANÁLISIS DE DROGAS PSICOACTIVAS Y SUS METABOLITOS EN AGUAS
RESIDUALES DE HOSPITAL EXTRAÍDOS CON DISCO ROTATORIO Y ANÁLISIS
CUALITATIVO CG-MS Y CUANTITATIVO LC-MS**

Fiscal-Ladino, J.; Posada-Lotero M.; Taborda-Ocampo, G.; Rosero-Moreano, M.

SLACL-466

**CARACTERIZACIÓN DE PIGMENTOS LIPOFÍLICOS EN *Chlorella vulgaris* UTILIZANDO
ESPECTROMETRÍA DE MASAS MALDI TOF.**

Stefanny Y. Claro; Luis M. Díaz-Sánchez; Cristian Blanco-Tirado; Marianny Y. Combariza.

SLACL-505

**EFFECTOS DE LA DISPERSIÓN DE LA MUESTRA Y DE LOS MODELOS ÓPTICOS DE MIE
Y FRAUNHOFER EN LA DISTRIBUCIÓN DEL TAMAÑO DE PARTÍCULA EN ARCILLAS
DETERMINADA POR DIFRACCIÓN LÁSER.**

Madelen Pérez Cano, Daniel Ricardo Durán Riveros

SLACL-514

**CUANTIFICACIÓN DE AMORFOS POR EL MÉTODO DE RIETVELD USANDO LiF Y
RUTILO COMO ALTERNATIVAS DE ESTÁNDARES INTERNOS EN LA
CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES GEOLÓGICOS POR DIFRACCIÓN DE RAYOS X
(DRX).**

Madelen Pérez Cano, Gina Fernanda Almeida Monsalve, Daniel Ricardo Durán Riveros

SLACL-517

**APLICACIÓN DEL MÉTODO CIEMAT DE EXTRACCIONES SECUENCIALES SOBRE
MUESTRAS GEOLÓGICAS ENRIQUECIDAS CON COMPUESTOS DE MERCURIO.**

Gutiérrez Carranza Luis Alejandro, Romero Zamudio Ingrid Kelly, Valenzuela Garzón Luz Angela, Gómez Christian Fernando, Becerra Lorena.

SLACL-528

**CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA DE ELECTRODOS DE CARBONO PARA
BATERÍAS DE FLUJO REDOX DE VANADIO.**

Jose M. Machado-Loaiza, Santiago Navales-Parra, Manuela Jaramillo, Catalina Orozco-Silva, Lucas Blandón-Naranjo, Diana C. Orozco-Gallo.

SLACL-558

**EVALUACIÓN DEL DESEMPEÑO DE UN ELECTROLIZADOR DE BAJO COSTO PARA
LA PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO A PARTIR AGUA DE MAR.**

Daniel Ignacio Rojas Valderrama, Ana Londoño Soto, Elizabeth Miranda Montoya, Manuela Rios Villa, Catalina Orozco Silva, Lucas Blandón-Naranjo, Diana Constanza Orozco Gallo



SLACL-586

COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE CANNABIDIOL SOBRE UN ULTRAMICROELECTRODO DE ORO.

Manuela Jaramillo Vanegas, José Manuel Machado Loaiza, Catalina Orozco Silva, Diana Constanza Orozco Gallo, Gastón D. Pierini, Sebastian N. Robledo, Lucas Blandón Naranjo.

SLACL-606

DEGRADACIÓN DE LA AMOXICILINA MEDIANTE PROCESOS TIPO FENTON CATALIZADOS CON ARCILLAS DELAMINADAS.

Crispin A. Celis Zambrano, Diana Lorena Lugo Castañeda, Alejandro Pérez Flórez, Alejandro Pérez Flórez, Alejandro Pérez Flórez.

SLACL-612

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE ELECTRODOS BASADOS EN CARBÓN A PARTIR DE TELAS DE ALGODÓN MODIFICADAS CON POLIPIRROL PARA SU APLICACIÓN EN DISPOSITIVOS DE ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA

Arias Ofelia, López, Elvis O, Calderón Juan C, Planes Gabriel A, Baena-Moncada Angélica M.

SLACL-644

DEGRADACIÓN DE COLORANTES EN AGUAS RESIDUALES PROVENIENTES DE LA INDUSTRIA TEXTIL A PARTIR DE LA REACCIÓN FENTON Y ANÁLISIS PRELIMINARES PARA EVALUAR PROCESOS ELECTROQUÍMICOS.

Mallerliny Quintero Rodríguez, Jaiver Osorio Grisales, Henry Reyes Pineda, Ricardo Palma, Ricardo Torres

SLACL-651

DETERMINACIÓN DE GLICOMACROPÉPTIDO-C (GMP_c) EN MUESTRAS DE LECHE MEDIANTE CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA DE ALTA EFICIENCIA (HPLC).

Viviana Morales Sánchez, Juan Velasco, Jhon Fiscal-Ladino, Gonzalo Taborda Ocampo, Milton Rosero-Moreano

SLACL-654

DETERMINACIÓN DE Pb, Zn, Mg, Cd, As, Ni, Cr EN JABONES POR ICP-OES: EVALUACIÓN DE LOS MÉTODOS DE PREPARACIÓN DE MUESTRA

Briyitte Sofia Salazar Torres, Ana Silveira Paim.

SLACL-675

PREPARACIÓN Y MODIFICACIÓN DE ELECTRODOS SERIGRAFIADOS PARA EL DESARROLLO DE SENSORES DE BAJO COSTO.

Sebastian Carlosama R, Nefer Miranda L, Paubla Gallego, Sandra Navarro G.

SLACL-679

DETERMINACIÓN DE BIOMARCADORES EN EXTRACTO ACTIVO DE Nectandra sp MEDIANTE UHPLC-DAD- ESI-HRMS

Juanita Pulido Teuta, Mónica Constanza Ávila Murillo, Carlos Eduardo Narváez Cuenca

SLACL-689

SEPARACIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE PÉPTIDOS DE UNA MEZCLA COMPLEJA: DISEÑO, DESARROLLO Y VALIDACIÓN DE UN MÉTODO ANALÍTICO POR RP-HPLC UTILIZANDO UNA COLUMNA MONOLÍTICA

Nicolas Mateo Gonzalez Lopez, Kevin Andrey Huertas Ortiz, Diego Sebastian Insuasty Cepeda, Jorge Ariel Martínez Ramírez, Zuly Jenny Rivera Monroy, Javier Eduardo García Castañeda.



SLACL-693

CARACTERIZACIÓN DEL PIGMENTO BIXINA AISLADO A PARTIR DE SEMILLAS DE *Bixa orellana* L.

Juan E. León-Jaimes, Luis M. Díaz-Sánchez, Cristian Blanco-Tirado, Marianny Y. Combariza.

SLACL-696

DESARROLLO Y VALIDACIÓN DE UN MÉTODO ANALÍTICO PARA LA DETERMINACIÓN DE CANNABINOIDES EN MATERIAL VEGETAL, EXTRACTOS Y AISLADOS DE CANNABIS POR HPLC

Daniel Mora, Carlos A. Escarraga, Claudia Parrado.

SLACL-750

DESARROLLO DE MATERIALES DE REFERENCIA “IN HOUSE”: UN DESAFÍO FORENSE

Natalie Álvarez-Alarcón, Dennis Mauricio Ocampo-Chaguendo, Manuel Hernando Nova Fuentes, Liz Wendy Cuadros-Veloza, Diego Alberto Sánchez-Robayo, William Fernando Garzón-Méndez, S.E. Melo Martínez, Fabián Parada-Alfonso.

SLRCL-749

AVANCES Y RETOS EN QUÍMICA FORENSE: DROGAS DE ABUSO EN AMÉRICA LATINA

William Fernando Garzón-Méndez, Diego Alberto Sánchez-Robayo, Manuel Hernando Nova Fuentes, Dennis Mauricio Ocampo-Chaguendo, Liz Wendy Cuadros-Veloza, Natalie Álvarez-Alarcón, Jorge Eliecer Camargo-Mendoza, Sandra Esperanza Melo-Martínez, Fabián Parada-Alfonso.

QUÍMICA DE ALIMENTOS

ILICL-676

DETERMINATION OF POLYBROMINATED DIPHENYL ETHER (PBDES) IN SHRIMP AND OILS OF ANIMAL ORIGIN DISTRIBUTED IN THE CITY OF MEDELLIN, COLOMBIA.

Jovan Mateus Castañeda Vargas.

SLKCL-38

POTENCIAL ANTIPLAQUETARIO DE EXTRACTOS OBTENIDOS DE HOJAS Y FRUTOS DE *Phaseolus vulgaris* L

Lyanne Rodríguez, Diego Méndez, Basilio Carrasco, Eduardo Fuentes, Iván Palomo.

ILKCL-424

QuEChERS EXTRACTION AND UHPLC/ESI Q-ORBITRAP-MS ANALYSIS OF PESTICIDE RESIDUES IN TROPICAL FRUITS.

Fausto Prada, Andrés González, Elizeth Matajira, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko

ILKCL-484

PHENOLICS COMPOSITION, ANTIOXIDANT AND INHIBITORY ACTIVITY ON METABOLIC SYNDROME-ASSOCIATED ENZYME OF PEUMO (*Cryptocarya alba* Mol., *Lauraceae*) FRUITS, A PRE-HISPANIC FOOD IN CENTER-SOUTH OF CHILE.

Javier Antileo-Laurie, Cristina Theoduloz, Felipe Jiménez-Aspee, Marlene Fischer, Verónica Olate-Olave, Guillermo Schmeda-Hirschmann.



SLKCL-99

EXTRACCIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE ANTOCIANINAS A PARTIR DE EXTRACTOS DE *Oenocarpus mapora* OBTENIDOS MEDIANTE EXTRACCIÓN CON LÍQUIDO PRESURIZADO

Julián Mora Varela, Harlen Torres Castañeda, Hugo Martínez Correa.

SLKCL-100

EVALUACIÓN FITOQUÍMICA Y CAPACIDAD ANTIOXIDANTE DE RESIDUOS DE AGUACATE HASS (*PERSEA AMERICANA* MILL.) CULTIVADO EN COLOMBIA

Juan Felipe Grisales Mejía, Hugo Martínez Correa, Harlen Torres Castañeda.

SLKCL-102

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA Y ACTIVIDAD ANTIPLAQUETARIA DE EXTRACTOS OBTENIDOS DE CLONES DE *Aristolotelia chilensis*.

Lyanne Rodríguez, Andrés Trostchansky, Hermine Vogel, Eduardo Fuentes, Iván Palomo.

SLKCL-504

ANÁLISIS METABÓLICO DE CACAOS ESPECIALES EN MUESTRAS PROVENIENTES DE MACEO (ANTIOQUIA) Y MANAURE (CESAR) ASOCIADO CON PROPIEDADES ORGANOLÉPTICAS Y FÍSICO-QUÍMICAS.

Paula Victoria Bacca Villota, William Fernando Hidalgo Bucheli.

SLKCL-512

CLARIFICACIÓN DEL JUGO DE MARAÑÓN (*Anacardum occidentale* L.) UTILIZANDO CARBÓN ACTIVADO OBTENIDO DE LA CÁSCARA DEL FRUTO, Y DETERMINACIÓN DE TANINOS

Carrillo, Á. Jason X.; Arrazola, P. Guillermo S.; Alvis, B. Armando.

SLKCL-547

DETERMINACIÓN DE ÁCIDO ANACÁRDICO MEDIANTE HPLC Y CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA-BROMATOLÓGICAS EN LA CÁSCARA DE LA SEMILLA DEL MARAÑÓN (*Anacardium occidentale* L)

Arrazola, P. Guillermo S., Lara Maria Jose, Alvis B. Armando.

SLKCL-590

PRODUCCIÓN DE CICLODEXTRINAS A PARTIR DE ALMIDÓN DE YUCA Y MUCÍLAGO DE CACAO.

María Fernanda Mercado Villamizar, Julio Roberto Pinzón Joya.

SLKCL-627

ALTERACIONES METABÓLICAS E ÍNDICES ATEROGÉNICOS EN POBLACIÓN COLOMBIANA ENTRE 40 Y 70 AÑOS DE EDAD

Martha Nancy Calderón Ozuna, Ginneth Lorena Riaño Ayala, Claudia Lorena Cruz Hernandez, Haiver Antonio Rodríguez Navarro, Julieth Daniela Buell Acosta, Luz Helena Aranzalez Ramirez.

SLKCL-645

DETERMINACIÓN DE LOS COMPONENTES QUÍMICOS PRINCIPALES DE LA BIOMASA LIGNOCELULÓSICA DERIVADA DE LA CÁSCARA DE CACAO DE *THEOBROMA CACAO* L. VAR. CARMELO.

Holber Zuleta-Prada, Edna Elena Suárez Patlán.



SLKCL-649

POTENCIAL APROVECHAMIENTO DE GUANÁBANA DE MONTE (*Annona montana Macfad*), BAJO LA ÓPTICA DE LOS ODS.

Marly Bustamante Correa, Fabián Parada Alfonso, Oscar Eduardo Suarez Moreno, Mary del Carmen Lares Amaiz.

SLKCL-745

POTENCIAL APROVECHAMIENTO DE LA CASCARILLA DE CACAO (*Theobroma cacao L.*) EMPLEANDO AGUA SUBCRÍTICA.

Juan Sebastián Ortiz Ramírez, Natalia Casas Mesa, Fabián Parada Alfonso, Liliam Alexandra Palomeque Forero.

QUÍMICA DE MATERIALES, POLÍMEROS Y NANOTECNOLOGÍA

ILGCL-463

SYNTHESIS AND PHYSICOCHEMICAL CHARACTERIZATION OF CHITOSAN/HEPARIN-CROSSLINKED POLYURETHANES FOR BIOMEDICAL APPLICATION.

Yomaira Lisnedy Uscategui Maldonado, Luis Eduardo Díaz Barrera, Manuel Fernando Valero Valdivieso, Ericsson Coy-Barrera

ILGCL-496

CONJUGATION WITH BIOMOLECULES OF poly(ethylene glycol)-block-poly(ϵ -caprolactone) BASED AS NANOCARRIERS FOR CURCUMIN DELIVERY AND PERFORMANCE.

Vivian Angarita-Villamizar, Adiana Umaña-Perez, Cesar Sierra, Leon D Perez.

ILGCL-628

N-HETEROCYCLIC CARBENE BASED Ru/Ir NANOPARTICLES FOR THE DEUTERATION OF ORGANIC MOLECULES THROUGH C-H BOND ACTIVATION

Alejandra Zuluaga-Villamil, Gabriel Mencia, Pierre F. Fazzini, Bruno Chaudret, Edwin A. Baquero.

SLGCL-88

LÍQUIDOS IÓNICOS EN LA PREPARACIÓN DE MATERIALES BASADOS EN BIOPOLÍMEROS.

Santiago Urbano Narváez, Diana María Chito

SLGCL-99

DESARROLLO DE NANOTRANSPORTADORES METÁLICOS BASADOS EN Ag⁰ DE DERIVADOS DE ESTEROLES: SÍNTESIS Y EVALUACIÓN DE LA CAPACIDAD DE CARGA.

Jhoban Steban Meneses Rengifo

SLGCL-110

AMPHIPHILIC COPOLYMERS MODIFIED WITH CHOLESTEROL AND OLEIC ACID VIA ROP AND CLICK CHEMISTRY TO ENHANCE DRUG LOADING CAPACITY.

Angarita-Villamizar Vivian, Sierra Cesar, Pérez León.

SLGCL-246

SIMULACIÓN DE LOS PERFILES DE ELUCIÓN Y RETENCIÓN EN EXPERIMENTOS DE RETENCIÓN EN FASE LÍQUIDA ASISTIDA POR POLÍMEROS.

Arturo Espinosa-Duque, Mayra A. Mora, Manuel Palencia



SLGCL-399

NANOPARTÍCULAS DE PLATA BIOACTIVAS CON INTERFACES HEMOCOMPATIBLES: SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN.

Jhoban Steban Meneses Rengifo, Manuel Salvador Palencia Luna, Tulio Armando Lerma Henao, Hernán Alonso Valle Zapata

SLGCL-404

ESTUDIO DEL EFECTO DE LOS IONES DIVALENTES PRESENTES EN EL AGUA DE PREPARACIÓN SOBRE PROPIEDADES REOLÓGICAS DE SOLUCIONES POLIMÉRICAS HPAM CON DIFERENTES CONFIGURACIONES MOLECULARES EMPLEADAS EN RECOBRO MEJORADO DE PETRÓLEO

Villar, A., Barbosa, D. S., Pico, L. C., Rincon M. F. , Quintero, H. I., y Mercado, R. A.

SLGCL-444

PARÁMETRO DE FLORY-HUGGINS EN HIDROGELES DE PVA MEDIANTE DOS MÉTODOS: CONGELACIÓN-DESCOGEACIÓN Y RETICULACIÓN CON ÁCIDO CÍTRICO

Maria Inés Martínez Parra, Esteban Garzón Montes, Diana Lucía Pérez Jaramillo, Carmiña Gartner Vargas

SLGCL-481

MICROENCAPSULACIÓN DE PESTICIDAS SOPORTADOS EN ORGANOARCILLAS UTILIZANDO ALGINATO

Ángela María Cuéllar Felantana, Jaime Fernando Martínez Suárez, Lisette Ruiz Bravo.

SLGCL-536

ADSORCIÓN Y FOTODEGRADACIÓN DE AZUL DE METILENO SOBRE PELÍCULAS DELGADAS DE DIÓXIDO DE TITANIO IMPREGNADAS CON POLIOXOMETALATOS TIPO ANDERSON

Freider Gabriel Duran Manga.

SLGCL-547

AMINOFUNCIONALIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE SiO₂ PARA LA OBTENCIÓN DE MATERIALES HÍBRIDOS NpSiO₂@HPAM CON POTENCIAL APLICACIÓN EN EOR

Silvia Nathalia Escobar Galvis

SLGCL-589

DESINFECTANTES Y TEXTILES VIRUCIDAS COMO RESPUESTA AL COVID-19.

Cesar Augusto Sierra.

SLGCL-609

EMPAQUE POLIMÉRICO ANTIFÚNGICO POLIETILENO/ACEITE DE COCO HIDROLIZADO PARA EL CONTROL DE Colletotrichum

Lisette Ariza Corredor, Brayan Alonso Bohórquez Torres, Katheryn Michell Camargo Jiménez, Mónica Constanza Ávila Murillo, Cesar Augusto Sierra Ávila

SLGCL-620

SÍNTESIS ASISTIDA POR MICROONDAS DE NUEVAS MOLÉCULAS ELECTROACTIVAS BASADAS EN 2-(3-HEXIL-2-OXOIMIDAZOLIN-4-ILIDEN) MALONONITRILLO COMO NUEVO GRUPO ELECTROACEPTOR

Caicedo-Reina Mauricio, Robson R. Guimarães, Alejandro Ortiz, Koiti Araki, Braulio Insuasty.



SLGCL-648

PREPARACIÓN DE BIOPELÍCULAS DE ALMIDÓN DE PAPA/ARCILLA QUITOSANO CON POTENCIAL USO COMO RECUBRIMIENTOS DE LOS FRUTOS DE CACAO.

Laidy Tatiana Bayena Suárez, Sebastián Eduardo Ramos Jiménez, Yeyzon Javier Cruz Vera, Lina María Rodríguez Pineda, Mery Carolina Pazos Zarama.

SLGCL-670

PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y MAGNÉTICAS DE LAS ORTOFERRITAS Tr1-xBixFeO3 (Tr= Eu y Gd; 0 \geq x \leq 0.1) SINTETIZADAS POR COMBUSTIÓN

L. M. Ramírez Guzmán, J. A. Gómez Cuaspué, C. A. Parra Vargas

SLGCL-671

EVALUACIÓN DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y MAGNÉTICAS DE LOS SISTEMAS LaBa_{1-x}Sr_xCuFeO₅ Y YbBa_{1-x}Sr_xCuFeO₅ (x = 0.0, 0.25 Y 0.5)

I.M. Saavedra Gaona, J. Munevar, C.A. Parra Vargas

QUÍMICA DE PRODUCTOS NATURALES Y FARMACÉUTICOS

ILHCL-111

RENIN-INHIBITING DRUGS VS. RENIN-INHIBITING BIOACTIVE PEPTIDES: AN IN SILICO APPROACH TO PHARMACOKINETICS AND DRUG-LIKENESS COMPARISON

Jorge Andrés Barrero Casallas, Maria Alejandra Barrero Casallas, Claudia Marcela Cruz Gonzalez.

ILHCL-117

ANTIFUNGAL POLYSUBSTITUTED PIPERIDINE-TYPE ANALOGS: AN IN-SILICO AND IN-VITRO STUDY.

Willy Cely-veloza, Ericsson Coy-Barrera.

ILHCL-433

ESSENTIAL OIL FROM *Cordia curassavica* (JACQUIN) GROWN IN COLOMBIA: IN VITRO AND IN SILICO ANALYSIS REVEALED POTENTIAL AS PRIMARY SOURCE OF PHYTOMEDICINES FOR TREATMENT OF DENGUE

Sindi Alejandra Velandia, Elizabeth Quintero Rueda, Paola Rondón-Villarreal, Lina Silva Trujillo, Elena E Stashenko, Raquel E Ocazonez

ILHCL-434

SYNTHESIS OF PEPTIDOMIMETIC DERIVATIVES USING ISOCYANIDE BASE MULTICOMPONENT REACTIONS ON SOLID PHASE AND CHOLINERGIC INHIBITION ASSAYS

Luis Prent-Peñaloza, Julio Caballero, Margarita Gutierrez.

ILHCL-44

GEOMAGNETIC STRESS MANAGEMENT IN PHYTO-PATHOLOGICAL AREAS RECOGNIZED IN AGRO-INDUSTRIAL DIVERSIFIED AND SUSTAINABLE FARMS AS SOCIAL INNOVATION MECHANISM.

Barbara Moreno-Murillo, Víctor M Fajardo M, Andrés Ricardo Aponte, Humberto Mayorga W. Rafael Hernández M.



ILHCL-448

EXTRACT FROM LIPPIA ORIGANOIDES H.B.K GROWN IN COLOMBIA AS PRIMARY SOURCE OF PHYTOMEDICINES FOR TREATMENT OF DENGUE: IN VITRO BIOLOGICAL ACTIVITIES ACCORDING TO CHEMICAL COMPOSITION.

Elizabeth Quintero Rueda, Jessica Mejía Medina, Elena E Stashenko, Jairo Rene Martinez, Raquel E Ocazonez

ILHCL-490

COCOA POD HUSK EPICARP: A SOURCE OF NATURAL PIGMENTS

Jesús A. Oñate-Gutiérrez, Diana L. Urbina, Luis M. Díaz-Sánchez, Julio R. Pinzón, Marianny Y. Combariza, Cristian Blanco-Tirado.

ILHCL-508

DEVELOPMENT OF A SELF-EMULSIFYING DRUG DELIVERY SYSTEM (SEDDS) OF AN EXTRACT OF CALYCES FROM PHYSALIS PERUVIANA FOR ENHANCING MUCUS PERMEATING PROPERTIES AND ORAL BIOAVAILABILITY OF RUTIN

María I. Cardona, Gina P. Dominguez, Sandra M. Echeverry, Ivonne H. Valderrama, Diana M. Aragón

ILHCL-618

MACHINE LEARNING MODELS TO SELECT POTENTIAL INHIBITORS OF ACETYLCHOLINESTERASE ACTIVITY FROM SISTEMATX – A NATURAL PRODUCTS DATABASE.

Kenyi Herrera-Acevedo, Chonny Herrera-Acevedo, Camilo Perdomo-Madrigal, Ericsson Coy-Barrera, Luciana Scotti, Marcus Tullius Scotti

ILHCL-638

PHOTOPROTECTIVE COMPOUNDS IN SEAWEEDS OF COLOMBIAN PACIFIC COAST: TRENDS FOR COSMETIC PRODUCTS

Urrea-Victoria, V, Sepúlveda Sánchez, L, Ramos, Freddy A, Castellanos Hernández, L

ILHCL-639

BIOCHEMOMETRICS OF INVASIVE LEGUMES: IDENTIFICATION OF ANTIFUNGAL HETEROCYCLIC NATURALLY-OCCURRING COMPOUNDS

Ericsson Coy-Barrera, Willy Cely-Veloza.

ILHCL-641

PHEOPHYTIN J, NEW PIGMENT WITH UV PHOTOPROTECTIVE EFFECT FROM *Dictyota pinnatifida*

Sara P. Abril; Paola A. Rubiano; Freddy A. Ramos; Leonardo Castellanos.

ILHCL-647

EVALUATION OF ANTIBACTERIAL ACTIVITY AGAINST *Staphylococcus epidermidis* AND ANALYSIS OF PROMISING BROWN ALGAE EXTRACTS BY MOLECULAR NETWORKING.

Laguna D, Sepúlveda L, Aragon D.M., Castellanos L., Vinchira D, Ramos F, De la Roche-Zogby F, Puyana M, Gavio B

ILHCL-655

GREEN ULTRASOUND-ASSISTED EXTRACTION OF LICHEN SUBSTANCES FROM *HYPOTRACHYNA CIRRHATA*. ETHYL LACTATE, A BETTER EXTRACTING AGENT THAN METHANOL TOXIC ORGANIC SOLVENT?

Beatriz Sepulveda, Derin Benites, Laura Albornoz, Mario Simirgiotis, Olimpo García Beltrán, Nino Castro, Carlos Areche.



SLHCL-29

ACOPLAMIENTO MOLECULAR SOBRE LA PROTEÍNA dUTPasa de Trypanosoma cruzi PARA EL DESCUBRIMIENTO DE POTENCIALES INHIBIDORES EN EL TRATAMIENTO DE LA ENFERMEDAD DE CHAGAS

John Torres Lemus, Ángela Rojas, Fabian Lopez.

SLHCL-108

MICROENCAPSULACIÓN DEL EXTRACTO ETANÓLICO DE SEMILLAS DE MAMMEA AMERICANA PARA EL CONTROL LARVICIDA DE Aedes aegypti EN AGUAS ESTANCADAS.

Mayra A. Morales Callejas, Fredyc Díaz Castillo, Claudia M. Baena-Aristizabal.

SLHCL-200

EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y CITOTÓXICA EN EL EXTRACTO METANOLICO DE LA AMBROSIA ARBORESCENS MILLER (MARCCO).

Teresa Cano de Terrones, Meiby Esther Marquez Huacca, Hector Enrique Terrones Diaz, Carlos Alberto Areche Medina, José M. Padrón, José J. Fernández, Lina Quispe Quispe, Wilfor Henry Quisocala Cossio.

SLHCL-246

CAPACIDAD ANTIOXIDANTE Y COMPUESTOS BIOACTIVOS EN SIRACA ROJA (RUBUS URTICIFOLIUS POIR), SIRACA NEGRA (RUBUS SPARCIFLORUS J. F MACBR) Y PACRA (HESPEROMELES PALSENSIS C.SCHENEIDER).

Carlos Ligarda, David Choque, Betsy Ramos, Abelardo Yanahuilca, Elibet Moscoso.

SLHCL-394

DETERMINACIÓN DE CANNABIDIOL (CBD) Y TERPENOIDES, DE EXTRACTO ETANÓLICO DE Cannabis sativa DE TIPO NO PSICOACTIVO, Y SU POTENCIAL ANTIOXIDANTE Y NEUROPROTECTOR.

Sandra Marcela Muñoz Burbano, Jhan Carlos Delgado Rodríguez, Paola Arango Romero, Ricardo Benítez Benítez.

SLHCL-395

IMPACT ON THE EXTRACTION, ISOLATION AND ANTIOXIDANT ACTIVITY OF PHENOLIC COMPOUNDS FROM USNEA CORNUTA KÖRB. MEDIATED BY GREEN SOLVENTS AND MICROWAVE HEATING.

Grover Castañeta, Carlos Areche, Reinaldo Vargas, Olimpo García-Beltrán, Mario Simirgiotis, Beatriz Sepúlveda.

SLHCL-415

EFFECTO ANTI-BIOFILM DE ACEITES ESENCIALES DE PLANTAS MEDICINALES AROMÁTICAS SOBRE Salmonella enterica SEROVARIEDAD ENTERITIDIS ATCC 13076.

Guillín-Rincón Y, Cáceres M, Hidalgo W, Ortiz C.

SLHCL-416

DISEÑO RACIONAL Y SÍNTESIS DE DERIVADOS TIPO N_{aril}-2-(N_{disustituido})acetamida DISEÑO RACIONAL Y SÍNTESIS DE DERIVADOS TIPO.

Lorena Camargo-Ayala, Luis Prent-Peñaloza, Mauricio Bedoya, Margarita Gutiérrez, Wendy González.

SLHCL-419

CARACTERIZACIÓN BIOLÓGICA DE METABOLITOS SECUNDARIOS DE PLANTAS EN UN MODELO DE Leishmania (Viannia) braziliensis.

Laura Marcela García, Diana Paola Peña, Mary Elizabeth Salazar, Elena E. Stashenko, Jairo René Martínez, Patricia Escobar.



SLHCL-420

CARACTERIZACIÓN DEL ACOPLAMIENTO MOLECULAR DE FLAVONOIDES AISLADOS DE CHROMOLAENA TACOTANA CON LA PROTEÍNA XIAP.

Aguacía Pedroza M, Muñoz Cendales D, Méndez Callejas G, Celis Zambrano C.

SLHCL-432

POTENCIAL ACTIVIDAD ANTIHIPERGLUCÉMICA IN VITRO DE DERIVADOS DE BIXINA

Alexander P. González-Araúz, Enrique Murillo, Nivia Ríos-Carrera, Armando A. Durant-Archibold, Víctor Cantilo-Díaz, Eunice Molinar-Toribio.

SLHCL-433

EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE METABOLITOS SECUNDARIOS AISLADOS DE LA ESPECIE *Steiractinia aspera* Cuatrec, POR DIFERENTES TÉCNICAS EXTRACTIVAS.

L. Gamboa, C. Jara, J. Martínez, L. Espinoza, E. Stashenko.

SLHCL-443

DISEÑO RACIONAL Y SÍNTESIS DE ANÁLOGOS DE ISOBENZOFURANONA COMO POTENCIALES AGENTES ANTICONVULSIVANTES FRENTE A CANALES DE SODIO TIPO NAV1.2.

Diego Fernando León Vargas, Paola Andrea Cuervo Prado, Fabian Orozco López, Mario Francisco Guerrero Pabón.

SLHCL-447

ENCAPSULAMIENTO DEL PÉPTIDO BIOACTIVO Δ M4 EN LIPOSOMAS DE DMPC Y SU POTENCIAL USO EN EL TRATAMIENTO DEL CÁNCER DE PIEL

Estefanía Fandiño Devia, Vanessa Gallego, Luz Adriana Gutiérrez, Marcela Manrique Moreno.

SLHCL-468

DETERMINACIÓN DEL POTENCIAL ANTIFÚNGICO DE ALQUILBENCENOIDES PROVENIENTES DE *Piper ceanothifolium Kunth* FRENTE A FITOPATÓGENOS ASOCIADOS AL CULTIVO DE CACAO.

Yudy S. Mahecha-Jimenez, Juliet A. Prieto-Rodríguez, Cristobal Ladino-Vargas, Oscar J. Patiño-Ladino.

SLHCL-475

EVALUACION DE LA ACTIVIDAD ANALGÉSICA DE UN EXTRACTO DE CANNABIS CON ALTO CONTENIDO DE CANNABIDIOL, ENCAPSULADO EN MICELAS PEG-PCL. ESTUDIOS IN VIVO.

Yoreny Román Vargas, Julián David Porras Arguello, Dora María Benjumea Gutiérrez, León Darío Pérez Pérez, Lucas Hernán Blandón Naranjo

SLHCL-484

OPTIMIZACIÓN DE LA EXTRACCIÓN ASISTIDA CON ULTRASONIDO DE ANTIOXIDANTES DESDE HOJAS DE CHIA; EVALUACIÓN DE LA CAPACIDAD ANTIOXIDANTE DE 6 GENOTIPOS

Gabriela Maturana A., María Carolina Zúñiga López.



SLHCL-504

DISEÑO RACIONAL APLICADO A COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS TIPO ISOBENZOFURANONA CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTICONVULSIVANTE FRENTE A CANALES DE CALCIO TIPO T.

Maira Alejandra Santos Baron, Devi Koradhi Amaya Granados, Diego Fernando León Vargas, Paola Andrea Cuervo Prado, Fabián Orozco López.

SLHCL-510

POTENCIAL BIOACTIVO (ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y CONTENIDO FENÓLICO) DE EXTRACTOS DE TESTA DE SEMILLA DE *Erythrina edulis Micheli*, OBTENIDAS DE DOS LOCALIDADES DEL DEPARTAMENTO DEL TOLIMA.

Jorge Enrique Reyes Forero, Mateo Alejandro Quiñones Sanchez, Laura Judith González, Cristina Pérez Jaramillo, Walter Murillo Arango, Carlos Martín Guerra Almonacid.

SLHCL-511

MICROENCAPSULADOS DE ANTOCIANINAS EXTRAÍDAS DEL COROZO (*Bactris guineensis*) CONTENIDAS EN ALMIDONES ACETILADOS DE ACHIRA (*Canna edulis*) Y YUCA (*Manihot sp.*)

Ángela Obando-Mora, German E. Matiz-Melo, Yoshie A. Hata-Uribe

SLHCL-528

BIOPROSPECCIÓN E IDENTIFICACIÓN QUÍMICA DE LOS ÁCIDOS GRASOS DE LOS ORGANISMOS MARINOS *Bursatella leachii* y *Holothuria princeps*, RECOLECTADOS EN LA BAHÍA DE CISPATÁ, CÓRDOBA, CARIBE COLOMBIANO

Gilmar Santafé Patiño, Yeiner Quiroz Lobo, Jorge Quirós Rodríguez.

SLHCL-537

EVALUACIÓN ANTIMICROBIANA DE ACEITES ESENCIALES FRENTE A *Moniliophthora roreri* y *Phytophthora spp* AISLADOS DE *Theobroma cacao L.*

Andrea Jimenez-González, Diannefair Duarte, Oscar Darío Ramírez, Marcial Fuentes Estrada, Elena Stashenko, Olimpo García Beltrán.

SLHCL-539

COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LOS ACEITES ESENCIALES DE *Cúrcuma longa* (ZINGIBERACEAE) EXTRAÍDO POR HIDRODESTILACIÓN ASISTIDA POR MICROONDAS, CON Y SIN PRETRATAMIENTO DE ULTRASONIDO

Yeferson Ospina B., José Leonardo Cano B, Eunice Ríos V.

SLHCL-541

OPTIMIZACIÓN DE LA PRODUCCIÓN DE PÉPTIDOS ANTIMICROBIANOS EN FERMENTACIÓN SUMERGIDA POR LOTES DE *Brevibacillus sp.* PNM157

DA Cubides, FA Ramos, N Moreno-Sarmiento

SLHCL-157

APOSICIÓN MINERAL DE EXTRACTOS DE PLANTAS EN DIENTES CON AMELOGÉNESIS IMPERFECTA

Luis G. Sequeda-Castañeda, Sandra J. Gutiérrez-Prieto, Gabriela M. Penedo-Jaramillo, Andrea V.



SLHCL-543

EVALUACIÓN DEL POTENCIAL ANTIOXIDANTE E INHIBITORIO DE LA ENZIMA CONVERTIDORA DE ANGIOTENSINA (ECA) DE HIDROLIZADOS PROTÉICOS OBTENIDOS A PARTIR DE SEMILLA DE *Erythrina edulis Micheli* COLECTADO EN DEPARTAMENTO DEL TOLIMA.

Mateo Alejandro Quiñones Sanchez, Jorge Enrique Reyes Forero, Laura Judith González Enciso, Walter Murillo Arango, Carlos Martín Guerra Almonacid

SLHCL-544

CARACTERIZACIÓN PRELIMINAR MEDIANTE 1H-RMN Y 13C-RMN DE DOS NUEVOS COMPUESTOS AROMÁTICOS GLICOSILADOS, AISLADOS DE LA PLANTA NATIVA DEL NORTE DE CHILE: *Skytanthus acutus*.

Valeria Guzmán, Dioni Arrieche, Lautaro Taborga, César González, Héctor Carrasco

SLHCL-545

ESPECIES DEL GÉNERO Piper CON POTENCIAL PARA EL CONTROL DE HONGOS FITOPATÓGENOS EN CULTIVOS DEL CACAO.

Yudy S. Mahecha-Jimenez, Juliet A. Prieto-Rodríguez, Cristobal Ladino-Vargas, Jenny P. Moreno-Lopez, Oscar J. Patiño-Ladino.

SLHCL-546

TAMIZAJE FITOQUÍMICO Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA IN VITRO DEL EXTRACTO ETANÓLICO DE LAS HOJAS DE *Aloysia virgata* (R. & P.) Juss.

S. Haydee Chávez Orellana, Felipe Surco Laos, Rocío Bendezú Acevedo, Jorge García Ceccarelli, Neyma Aroni Huarcaya, Katty Herrera Gutiérrez, Marianella Salinas Fuentes, Manuel Valle Campos, Roberto Garayar Flores

SLHCL-547

EXTRACCIÓN DEL ACEITE ESENCIAL DE CARDAMOMO (*Elettaria cardamomum*) MEDIANTE HIDRODESTILACIÓN ASISTIDA POR MICROONDAS, UTILIZANDO ULTRASONIDO COMO PRETRATAMIENTO.

José Leonardo Cano B, Yeferson Ospina B, Eunice Ríos V.

SLHCL-548

***Hibiscus rosa-sinensis*: ESTUDIO DE LA RELACIÓN ENTRE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA, LA CAPACIDAD ANTIOXIDANTE Y EL COLOR**

Jesica J. Mejía-Medina, Jairo R. Martínez-Morales y Elena E. Stashenko.

SLHCL-549

EVALUACIÓN DE LA PRESENCIA DE CANNABINOIDES EN PRODUCTOS DE COSMÉTICA CANNÁBICA.

Paola Arango Romero, Ricardo Benítez Benítez, Jhan Carlos Delgado Rodríguez, Jaime Martín.

SLHCL-551

EXTRACCIÓN SÓLIDO-LÍQUIDO DE PIGMENTOS A BASE DE ANTOCIANINAS PRESENTES EN EL FRUTO EXÓTICO DE Açai (*Euterpe Oleracea*).

Vladimir Ernesto Vallejo-Castillo, Jesus Antonio Arevalo-Delgado, Maria Fernanda Rojas-Campiño.

SLHCL-574

ESTUDIOS DE DOCKING EN ALILFENOLES Y PRENILFENOLES

Manuel Diaz, Mauricio Soto, Lautaro Taborga, Susana Restrepo



SLHCL-589

ESTUDIO QUÍMICO Y ACCIÓN ANTIFÚNGICA DE METABOLITOS VOLÁTILES DE *Ocotea Puberula* DE LA SIERRA NEVADA DE SANTA MARTA.

Juan Manuel Alvarez Caballero, Junior Orozco Paniagua¹, Ericsson Coy-Barrera.

SLHCL-594

IMPLEMENTACIÓN DE UN MÉTODO DE MICROEXTRACCIÓN POR DMFS Y EFS-IC PARA LA EXTRACCIÓN DE ALCALOIDES DE *AGAPANTHUS PRAECOX WILLD*

Juan C. Ortiz, Fernando H. Blanco, Fabio A. Cabezas.

SLHCL-607

HÍBRIDOS CUMARINA-CHALCONA: ESTRATEGIA SINTÉTICA, CITOTOXICIDAD Y ACTIVIDAD LEISHMANICIDA IN VITRO.

Sebastian Valencia Cossio, Diego Durango, Jesús Gil, Sara Robledo, Winston Quiñones, José Eduardo Cuellar.

SLHCL-608

ESTUDIO FITOQUÍMICO Y EVALUACIÓN ALELOPÁTICA DE LOS EXTRACTOS DE *ULEX EUROPAEUS L.* (RETAMO ESPINOSO)

Jhon Fredy Castañeda Gómez, Ángela Patricia Ochoa Sánchez.

SLHCL-631

EVALUACIÓN IN SILICO E IN VITRO DE LA LICORINA Y SUS DERIVADOS POR SÍNTESIS QUÍMICA, 6-OXOLICORINA Y 2-ACETIL-LICORINA, COMO POTENCIALES INHIBIDORES DE LA REPLICACIÓN DEL ZIKV EN CÉLULAS VERO

Juliana Andrea Cabrera Perdomo, Juan Camilo Aquite, Nicole Diaz, Paola Andrea Caicedo, Alvaro Barrera-Ocampo, Maria Francisca Villegas, Juan Cruz.

SLHCL-634

DESARROLLO SISTEMÁTICO DE COMPUESTOS TIPO ALCALOIDE DERIVADOS DEL PRODUCTO NATURAL LICORINA CON ACTIVIDAD FRENTE A ZIKA.

Juan Camilo Aquite Londoño, María Francisca Villegas-Torres, Álvaro Barrera Ocampo, Paola A. Caicedo B.

SLHCL-642

ACTIVIDAD ANTIINFLAMATORIA Y CITOTÓXICA DE ALCALOIDES QUINOLÍNICOS Y EXTRACTO ETANÓLICO DE HOJAS DE *Esenbeckia alata* KUNT (RUTACEAE)

Juan Manuel Alvarez Caballero, Luis Enrique Cuca Suárez, Ericsson Coy-Barrera.

SLHCL-662

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA POR GC/MS DEL ACEITE ESENCIAL DE *Lantana boyacana Moldenke*, RECOLETADA EN SANTANDER-COLOMBIA

Héctor Duván Uribe V., Cristian A. Oliveros, Diego C. Durán, Robert T. González, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLHCL-681

MICROPROPAGACIÓN E IDENTIFICACIÓN DE ALCALOIDES BIOACTIVOS EN ESPECIES DE *Amaryllidaceae*

Trujillo-Chacón, LM, Osorio, E, Leiva-Cuenca YH, Castro-Restrepo, D.



SLHCL-733

ESTUDIO PARA POTENCIALIZAR LA ACCIÓN MULTIDIANA FRENTE A LIPASA PANCREÁTICA Y α -GLUCOSIDASA DE LAS XANTONAS PROVENIENTES DE *Garcinia mangostana*.

Juan C. Cardozo-Muñoz, Juliet A. Prieto-Rodríguez, Fabian H. López-Vallejo, Luis E. Cuca-Suárez, Oscar J. Patiño-Ladino.

SLHCL-737

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA Y ACTIVIDADES BIOLÓGICAS DEL EXTRACTO DE LA FLOR DE *Ipomoea horsfalliae*.

Lady J. Sierra, Rafael E. González, Yuri Córdoba, Raquel E. Ocazonez, Elizabeth Quintero, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

QUÍMICA INORGÁNICA.

ILDCL-533

VANADIUM-DOPED SODIUM PHOSPHOMOLYBDATE SALTS AS CATALYSTS IN THE NEROL OXIDATION WITH HYDROGEN PEROXIDE

Castelo Bandane Vilanculo, Márcio José Da Silva, Sukarno Olavo Ferreira, Rene Chagas Da Silva, Nelson Contreras Coronel

ILDCL-578

IMPACTS OF Sn(II) DOPING ON THE KEGGIN PHOSPHOMOLYBDIC ACID CATALYZED ETHERIFICATION OF GLYCEROL WITH TERT-BUTYL ALCOHOL

Márcio José Da Silva, Diego Morais Chaves, Sukarno Olavo Ferreira, Rene Chagas Da Silva, Nelson Contreras Coronel.

SLDCL-97

OBTENCIÓN DEL TRIAZENO BENZOATO DE 2-(((4-OXO-3,4-DIHIDRO-1,2,3-BENZOTRIAZIN-3-IL)ETIL)TRIAZENIL)METILO A PARTIR DE LA REACCIÓN ENTRE ETILENDIAMINA Y LA SAL DE DIAZONIO PROVENIENTE DE 2- AMINO BENZOATO DE METILO. FORMACIÓN DE COMPLEJOS METÁLICOS CON MERCURIO (II)

Erika Martínez Ovalle, Gema Eunice Acosta, Diego González-Salas.

SLDCL-152

PREPARACIÓN DE UNA MOF DE Ti FUNCIONALIZADA CON UN COMPLEJO DE DIOXO MOLIBDENO PARA LA OXIDACIÓN SELECTIVA DE MONOTERPENOS CON LUZ UV-Vis y O₂.

Laura Milena Valdivieso Zárate, Gustavo Emilio Ramírez Caballero, Fernando Martínez Ortega.

SLDCL-452

RELACIÓN ENTRE LA ACIDEZ SUPERFICIAL Y ACTIVIDAD DE SÍLICE-ALÚMINAS AMORFAS SIN IMPREGNAR E IMPREGNADAS CON ÁCIDO FOSFÓRICO EN LA DESHIDRATACIÓN DE METANOL

Diego Rivera-Barrera, Alexander Guzmán M, Daniel Molina V, Juan Carlos Poveda.

SLDCL-623

SÍNTESIS DE COMPLEJOS DE Cu(II) DERIVADOS DE LIGANDOS TIPO PINCER NO-SIMÉTRICOS Y SU POTENCIAL ACTIVIDAD CATALÍTICA.

David Enrique Ezenarro Salcedo, Daniela Fonseca López, John Jady Hurtado Belalcázar.



SLDCL-486

REVISIÓN DEL MÉTODO DE LA DETERMINACIÓN DE pH EN PINTURAS AL AGUA TIPO EMULSIÓN EN COLOMBIA: ACTUALIZACIÓN METROLÓGICA.

Maria Fernanda Peralta Morales, Andrea del Pilar Sandoval Rojas, Ronald Orlando Cristancho Amaya, Miguel Alfonso Ramos Sánchez.

QUÍMICA ORGÁNICA

ILCCL-471

SYNTHESIS OF NEW HYBRID NITRIC OXIDE-RELEASING MOLECULES FROM PARACETAMOL PRESENT IN EXPIRED COMMERCIAL TABLETS.

Daniela Calderón Lamus, Carlos E. Puerto Galvis, Vladimir V. Kouznetsov.

ILCCL-496

EFFICIENT SYNTHESIS OF NOVEL N-PROPARGYL TETRAHYDROQUINOLINE DERIVATIVES THROUGH THE CATIONIC POVAROV REACTION AND STUDY OF ITS ANTIOXIDANT ACTIVITY AND POTENTIAL USE AS AChE and BChE INHIBITORS.

Meiby Fernández Rojas, Ricelia Gonzalez Serpa, Margarita Gutierrez Cabrera.

ILCCL-611

OPTICAL AND ELECTROCHEMICAL EFFECT OF TRIARYLAMINE INCLUSION TO ALKOXY BODIPY-BASED DERIVATES.

Juan Sebastian Rocha Orti, Alberto Insuasty, Alejandro Ortiz.

ILCCL-482

SYNTHESIS OF AN EQUIMOLECULAR MIXTURE OF TWO DIASTEREOISOMERS OF METHYL2-(3-(5,6-DIMETHOXY-1-OXO-2,3-DIHYDRO-1H-INDEN-2-L)PROPANAMIDE)-3-METHYLPENTANOATE FROM RAC 3-(5,6-DIMETHOXY-1-OXO-2,3-DIHYDRO-1H-INDEN-2-YL)PROPANOIC ACID.

Ender E. Guerrero, Ullrich Stahl, Elvia V. Cabrera, Jhonny G. Correa, Jonathan N. Herrera, Yonathan de J. Parra, Jesús Romero, Hegira Ramírez.

ILCCL-439

KINETIC STUDY OF THE CARBOXYLATION REACTION OF 7-METHOXY-1-TETRALONE.

Humberto Gonzalez, Ullrich Stahl, Elvia V. Cabrera, Jhonny G. Correa, Jonathan N. Herrera, Yonathan de J. Parra, Jesús Romero, Hegira Ramírez.

ILCCL-123

THE SYNTHESIS OF 4-ARYL-PHENALENONES REVISITED..

Catalina Hoyos, Marisol Cano, Julián Barrera, Felipe Otálvaro.

ILCCL-215

BIOLOGICAL EFFECTS OF DERIVATIVES OF 4-OXO-THIOCHROMAN OVER LEISHMANIA SP TRYPANOSOMA SP.

Ortiz, C., Vargas, E., Quiñonez, W., Echeverri López, L. F, Robledo, S, Upegui, Y.

SLCCL-422

SÍNTESIS DE COMPUESTOS DEL TIPO 2-HIDROXIPROPANAMIDA A PARTIR DE LA FUNCIONALIZACIÓN DE L-TRIPTÓFANO

Diego Quiroga, Judy Cifuentes



SLCCL-44

¿QUÉ TAN IMPORTANTE PUEDE SER EL GRUPO HIDRAZONA EN LAS PROPIEDADES FOTOFÍSICAS, FOTOQUÍMICAS Y ELECTROQUÍMICAS DE UN COMPUESTO SENCILLO?

Jorge Castaño Valencia, Manuel Chaur Valencia

SLCCL-684

OBTENCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE PÉPTIDOS UTILIZADOS EN DOPAJE COMO CANDIDATOS A PATRONES DE REFERENCIA IN HOUSE.

Juan Diego Zapata Velásquez, David Augusto Ramírez Celis, Zuly Jenny Rivera Monroy, Javier Eduardo García Castañeda, Jorge Ariel Martínez Ramírez..

SLCCL-279

ESTUDIO DE DOCKING, SÍNTESIS Y ACTIVIDAD ANTIFÚNGICA DE GERANILFENOLES HIDRATADOS FRENTE A *Botrytis cinerea*

Mauricio Soto Cañete, Lautaro Taborga, Luis Espinoza, Katy Diaz, Andrés Olea, Ana Estévez-Braun, Ángel Amesty

SLCCL-384

SÍNTESIS Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTITRIPANOSOMAL, ANTIPLASMODIAL Y HEMOLÍTICA IN VITRO DE ANÁLOGOS QUINOLINICOS

Roger Espinosa Sáez, Sara Robledo Restrepo, Camilo Guzmán Teran, Hiltony Villa Dangond.

SLCCL-409

OBTENCIÓN DE PIRAZOLOPIRIDINAS Y TETRAHIDROPIRAZOLOISOQUINOLINAS EMPLEANDO EL DiFAC, ESTRATEGIAS MULTICOMPONENTE E IRRADIACIÓN MICROONDAS

John Jair Lozano Oviedo, Paola Andrea Cuervo Prado, Fabian Orozco Lopez.

SLCCL-423

EFEECTO DE LA RADIACIÓN ULTRAVIOLETA EN COMPLEJOS METÁLICOS BASADOS EN UNA BIS(HIDRAZONA) PIRIDÍNICA.

Jolaine Galindo Betancourth, Manuel Chaur Valencia.

SLCCL-432

SÍNTESIS DE NUEVOS DERIVADOS PERTENECIENTES AL NÚCLEO ISOINDOLO[2,1-a]QUINOLIN-11(5H)-ONA DE INTERÉS BIOLÓGICO.

Omar León, Juan F. Quiroga, Angie Vannesa Sánchez Bejarano, Juan David Ávila Rincón, Leidy Johanna Días Huertas, Ricaurte Rodríguez.

SLCCL-437

VALORIZACIÓN DE CICLOHEXANONA HACIA CICLOHEXILAMINA MEDIANTE CATALIZADORES BASADOS EN IRIDIO.

Doris Ruiz, Marco Herrera.

SLCCL-445

SÍNTESIS DE N,N-AQUIL-BIS-(N-METILARIL)ACILAMIDAS, PRECURSORES PARA POTENCIALES MOLÉCULAS TENSOACTIVAS

Mary Gerly Arenas Vargas

SLCCL-446

SÍNTESIS DE UNA NUEVA SERIE MONOHIDROXILADA DE ANÁLOGOS DE BRASINOESTEROIDES CON FUNCIÓN BENZOILADA EN LA CADENA LATERAL

Maria Nuñez Gutierrez, Luis Espinoza Catalán, Cesar González, Paula Droguett,



SLCCL-454

SÍNTESIS DE NUEVAS CUMARINAS CONJUGADAS CON PIRAZOLINAS DE POTENCIAL USO PARA EL DISEÑO DE SONDAS FLUORESCENTES Y/O COLORIMÉTRICAS EN LA DETECCIÓN DE IONES DE INTERÉS AMBIENTAL.

Nestor Fabian Bravo Piñeros, Jaime Antonio Portilla Salinas, Alexis Tigreros Ortiz.

SLCCL-514

SÍNTESIS EFICIENTE DE DERIVADOS DE 1-ANILINO-3-OXO-1,3-DIHI-DRO-2-BENZOFURAN-1-CARBOXAMIDA

Jonnathan Cifuentes, Cristian Camilo Sanín Villamil, Angie Ximena Ruíz Ávila, Mónica Yadira Dotor Robayo, Ricaurte Rodríguez

SLCCL-524

SÍNTESIS REGIOSELECTIVA DE 7-DIALQUILAMINOMETIL-8- HIDROXIQUINOLIN-2(1H)-ONAS MEDIADA POR UNA REACCIÓN TIPO MANNICH

Angélica Salinas Torres, Hugo Rojas Sarmiento, Diana Becerra Córdoba, Juan Castillo Millá.

SLCCL-551

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE DERIVADOS DE CLOROFILA CON APLICACIÓN EN FOTOOXIDACIÓN BENCÍLICA

Bleidy J. Muñoz, Julio R. Pinzón.

SLCCL-598

RELACIÓN ESTRUCTURA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE LA BETANINA Y LA BETANIDINA FUNDADA EN TEORÍA DE FORMAS

Iliana María Ramírez Velásquez, Francisco José Caro Lopera, Alvaro Bedoya.

SLCCL-601

LA REACCIÓN DE FRIEDLÄNDER EN COMBINACIÓN CON LA CONDENSACIÓN TIPO KNOEVENAGEL COMO ESTRATEGIA DE SÍNTESIS DE 2,4-DI((E)-ESTIRIL)QUINOLINAS

Vera Diana, Ardila Diana, Lipez Kelly, Rodríguez Diego, Becerra Ruben, Palma Alirio.

SLCCL-615

REACCIÓN DE FORMACIÓN DE C-TETRAMETILCALIX[4]RESORCINARENO: ESTUDIO DE LA FORMACIÓN DE CONFÓRMEROS MEDIANTE RP-HPLC

Pineda-Castañeda Héctor Manuel, Rivera-Monroy Zuly Jenny, Maldonado-Villamil Mauricio

SLCCL-616

SÍNTESIS ONE-POT TRI-COMPONENTE DE 4-ESTIRILQUINAZOLINAS A PARTIR DE 1-(2-AMINOFENIL)-3-ARILPROP-2-EN-1-ONAS

Lipez Kelly, Rodríguez Diego, Ardila Diana, Vera Diana, Mantilla Juan Pablo, Palma Alirio.

SLCCL-627

DISEÑO DE INHIBIDORES DE LA ENZIMA FERULOIL ESTERASA C (6FAT) DE FUSARIUM OXYSPORUM DERIVADOS DE D-GLUCOSAMINA EMPLEANDO HERRAMIENTAS COMPUTACIONALES COMO DOCKING MOLECULAR Y CÁLCULOS DE TEORÍA FUNCIONAL DE LA DENSIDAD.

Diego Quiroga.



SLCCL-650

REACCIÓN TRICOMPONENTE ENTRE EL L-TIROSINATO DE ETILO, TIRAMINA Y FORMALDEHIDO

Laura Leal-Colorado, Rodolfo Quevedo.

SLCCL-658

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UNA SONDA HÍBRIDA DE FERROCENO PARA LA DETECCIÓN ÓPTICA Y ELECTROQUÍMICA DE CIANURO

Carlos Arturo Peña Bernal

SLCCL-679

SÍNTESIS DE NUEVAS (E)-4'-(2-ESTIRIL)-[2,2'-BIQUINOLIN]-4(1H)-ONAS VÍA LA CONDENSACIÓN DE CLAISEN-SCHMIDT EN COMBINACIÓN CON LA ADICIÓN NUCLEOFÍLICA CONJUGADA TIPO AZA MICHAEL

Rodríguez Diego, Lipez Kelly, Becerra Ruben, Álvarez Geraldine, Ardila Diana, Vera Diana, Palma Alirio.

SLCCL-682

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NUEVOS HÍBRIDOS MOLECULARES DEL TIPO BENZIMIDAZOL-QUINOLINA

Ardila Diana, Vera Diana, Lipez Kelly, Rodríguez Diego, Becerra Rubén, Muñoz Nicolás, Palma Alirio.

QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

ILECL-556

ELECTRONIC, STRUCTURAL, AND OPTICAL PROPERTIES OF Y_{2-x}RE_xWO₆ AND La_{1-x}RE_xCuOS (RE=Eu AND Sm) PHOSPHORS

D. Espinoza, S. Conejeros y J. Llanos

ILECL-597

QM/MM STUDY OF THE GUINEA PIG L-ASPARAGINASE ENZYME REACTION PATHWAY: RELEVANCE OF THE PROTONATION STATE OF LYS188.

L. Sánchez, F. E. Medina, and G. A. Jaña.

ILECL-603

COMPUTATIONAL STUDY OF THE GLUCOSYLATION MECHANISM OF RESVERATROL BY SUCROSE PHOSPHORYLASE OF THE ORGANISM BIFIDOBACTERIUM ADOLESCENTIS

C. Febres-Molina, G. A. Jaña.

ILECL-693

RATIONAL DESIGN OF NOVEL MATRICES FOR MALDI MS ASSAYS: AN IN SILICO PERSPECTIVE

Carlos A. Padilla, Luis M. Diaz-Sánchez, Marianny Y. Combariz, Cristian Blanco-Tiradoa, Aldo F. Combariza

SLECL-276

DISEÑO IN SILICO DE UN RECEPTOR PEPTÍDICO PARA EL RECONOCIMIENTO DE CALCITONINA ASOCIADA CON EL CARCINOMA MEDULAR DE TIROIDES.

Maria Paula Zamudio-Ramirez, James Guevara-Pulido.



SLECL-435

ANÁLISIS QUIMIOTOPOLÓGICO DE 25 HERBICIDAS REGULADOS POR EL INSTITUTO COLOMBIANO AGROPECUARIO.

Emilbus A. Uribe, Brayan Rodríguez Blanco, Laura Valentina Rojas Sánchez, Mario Barón Rodríguez.

SLECL-604

ESTUDIO TEÓRICO DE LA MICROSOLVATACIÓN DE GLIFOSATO ANIÓNICO Y CATIONICO.

Dumer Stiven Sacanamboy Papamija, Elkin Alberto Tílvez Marrugo.

SLECL-688

DETERMINACIÓN DE PROPIEDADES MECÁNICAS DEL SILICATO DE CALCIO HIDRATADO (C-S-H) POR DINÁMICA MOLECULAR.

Jose Beltrán, Andrés López, Leonardo Muñoz-Rugeles, Rafael Cabanzo, Enrique Mejía.

SLECL-690

EFFECTO DE LA POROSIDAD EN LAS PROPIEDADES MECÁNICAS DEL SILICATO DE CALCIO HIDRATADO (C-S-H).

Andrés López, Jose Beltrán, Leonardo Muñoz-Rugeles, Rafael Cabanzo, Enrique Mejía.

SLRCL-739

ESTUDIO DE LAS INTERACCIONES DE DERIVADOS DE TIPIFARNIB CON EL SITIO DE UNIÓN DE LA ENZIMA CYP51.

Laura Polania-Varón, Maicol Ahumedo-Monterrosa, Elkin A Tilvez.

SLRCL-740

SÍNTESIS DE ACETALES POR CATÁLISIS ÁCIDA PARA LA APLICACIÓN EN FRAGANCIAS COMO PROTECTOR DE GRUPOS CARBONILO Y ESTABILIZACIÓN SENSORIAL.

Jhared Eduardo Martínez Valdés, Juan David Camayo Quintana, Alejandra Gutierrez Cossío y Lizbeth Lorena López Parra.

SLRCL-741

FORMULACIÓN Y ANÁLISIS DE ESTABILIDAD Y ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA DE UN DESODORANTE NATURAL.

Daniel Quinayás Tello, Lizbeth Lorena López Parra.

SLRCL-943

ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LAS PROPIEDADES FARMACOLÓGICAS DE LIGANDOS 2N2O Y 4N TETRADENTADOS Y SU POTENCIAL APLICACIÓN EN LA ENFERMEDAD DE ALZHEIMER.

Nicolás Puentes-Díaz, Diego Chaparro Gutiérrez, Areli Flores-Gaspar y Jorge Alí-Torres.



34° CLAQ 2020
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA
CARTAGENA DE INDIAS - COLOMBIA



XVIII COLACRO



X COCOCRO

SPAE
II SIMPOSIO PANAMERICANO DE
ACEITES ESENCIALES



MAGISTRALES



MG01

NEXT GENERATION ANTIBIOTICS (2021)

Dra. Ada E. Yonath

After 2 decades of research against all odds, including pioneering advanced technology, and experiments in the outer space, we discovered how the basic life process, the translation of the genetic code to proteins, is performed by ribosomes in all living cells. We showed that ribosomes possess spectacular architecture, which allow their smooth performance in decoding the genetic code that is carried by mRNA and in providing a pocket-like internal region of elaborate architecture that positions the amino-acids in appropriate stereochemistry for peptide bond formation.

Owing to the vital role of the ribosomes, they are targeted by many antiatoms, that contain non biodegradable parts and act by paralyzing the ribosomes by binding their active sites, therefore do not distinguish between the pathogens and the microbiome. Hence, we extended our structural studies to ribosomes from genuine multi-resistant pathogens and identified peripheral structural elements that can account partially or fully for species specificity. Thus may lead to the design of species specific eco-friendly drugs, while preserving the microbiome.



MG02

**OBSERVING THE COLOURFUL, AROMATIC AND INTRIGUING BIODIVERSITY,
THROUGH THE CHEMICAL LENS**

Dra. Elena Stashenko



MG03

CARBON-BASED COMPOUNDS AND MATERIALS FOR ENHANCED SOLAR CELL

Dr. Luis Echegoyen



MG04

SISTEMAS ORGANIZADOS Y SUS APLICACIONES: TRANSPORTE DE FÁRMACOS Y LA SINTESIS DE NANOPARTICULAS CON DIFERENTES APLICACIONES

N.M. Correa 1,2*

- 1 Departamento de Química, Universidad Nacional de Río Cuarto, Agencia Postal 3, C.P. X5804BYA, Ruta Nacional 36, km 601, Río Cuarto, Córdoba, Argentina.
2 Instituto de Desarrollo Agroindustrial y de la Salud (IDAS), Universidad Nacional de Río Cuarto, Agencia Postal 3, C.P. X5804BYA, Río Cuarto, Córdoba, Argentina.

mcorrea@exa.unrc.edu.ar

Las soluciones designadas como soluciones organizadas o autoensambladas son un campo importante y promisorio en el progreso de varias ramas de la ciencia moderna y la tecnología. Dentro de este tipo de soluciones se pueden encontrar a las micelas inversas y las vesículas o liposomas. Estos sistemas autoensamblados presentan una interfaz que ofrecen un medio peculiar y único para que ocurran diferentes procesos. Es por este motivo, que es de fundamental importancia conocer las propiedades fisicoquímicas que otorgan a dicha interfaz sus diferentes funcionalidades. Desde hace ya varios años nuestro grupo de trabajo se encuentra abocado al desarrollo de métodos que optimicen la detección de interacciones moleculares entre diferentes moléculas pruebas y los distintos medios donde se encuentren. De esta manera pretendemos comprender los factores que determinan la solubilización o ubicación en diferentes sitios en los distintos medios, determinando así cuan “inteligente” es cada medio organizado para reconocer un soluto. ¹

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

REFERENCIAS

1. Correa, N. M., Silber, J. J., Riter, R. E., Levinger, N. E. Chem. Rev. Vol. 112, 4569-4602, 2012



MG 05

REOLOGÍA NO TEOLOGÍA
Dr. Octavio Manero





CHEMISTRY FOR A SUSTAINABLE WORLD.

Dr. Tom Welton president RSC

Sustainable Chemistry is both the implementation of sustainability in the production and use of chemicals (Green Chemistry) and the application of chemistry and chemical products to enable sustainable development. The UN Sustainable Development Goals provide a framework for the creation of a sustainable common future, in which all the world's needs are met without compromising the abilities of future generations to provide for their needs. The chemical sciences and chemical scientists have much to offer to all of the SDGs. In this talk I will explore how chemistry is currently contributing to achieving the SDGs, some of the challenges to still be faced and the research that is being conducted to overcome those challenges.

Tom Welton OBE FRSC FCGI
Professor of Sustainable Chemistry
Imperial College London

Tom Welton is currently President of the Royal Society of Chemistry and Professor of Sustainable Chemistry at Imperial College London. He is the author of over 150 research papers across the range of inorganic, organic and physical chemistry journals, mostly on the structures and chemistry of ionic liquids and solutes in these.

Prior to this he was Dean of the Faculty of Natural Sciences at Imperial College (2014-2019), and before that Head of the Department of Chemistry at Imperial College (2007-2014).

He is widely acknowledged to be a champion of diversity in science and was head of department when the Chemistry department at Imperial College won its first Athena SWAN Gold award. Together with Alison Roger of the University of Warwick, he founded the Irene Joliot-Curie conference series. He is a L'Oréal-UNESCO Male Champion for Women in Science, a member of the Equality, Diversity and Inclusion advisory boards of both UKRI and Elsevier. In recognition of these activities, he was awarded an OBE in the Queen's Birthday Honours 2017.



MG 07

LC-GC FUNDAMENTALS
Dr. Janusz Pawliszyn





MG 08

COMPREHENSIVE GAS CHROMATOGRAPHY FOR THE ANALYSIS OF HIGH COMPLEX SAMPLES. AN OVERVIEW OF DIFFERENT APPROACHES

Dr. Luigi Mondello



MG 09

EL FUTURO DE LA PROFESIÓN QUÍMICA
Dr. Javier García Presidente IUPAC



MG 10

PROTEIN CHEMISTRY IN VACCINE DEVELOPMENT

Dr. Daniel García presidente FLAQ

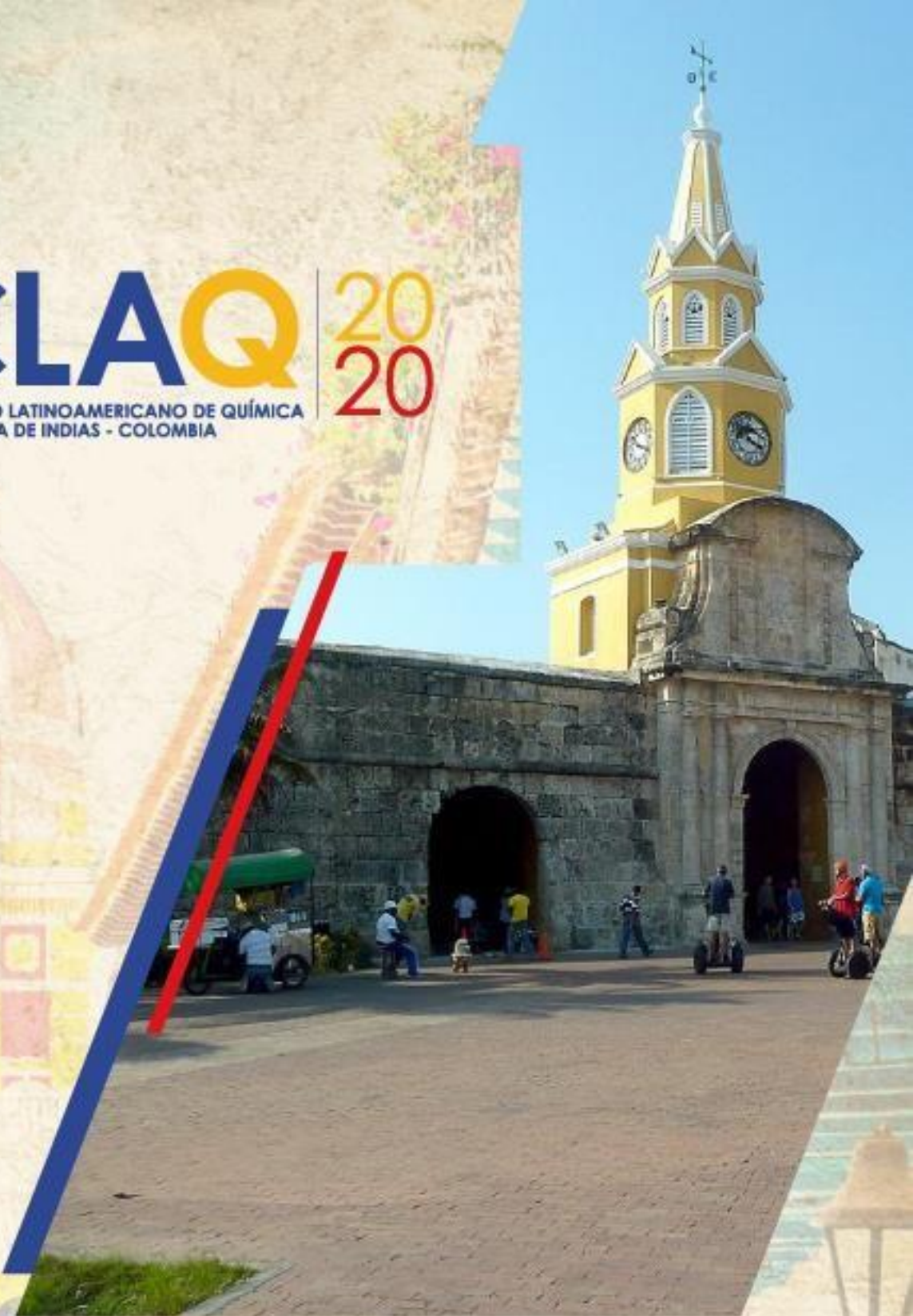


34^o

CLAQ

20
20

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA
CARTAGENA DE INDIAS - COLOMBIA



PLENARIAS CLAQ

DESIGN AND SYNTHESIS OF POTENT ADENYLATE CYCLASE INHIBITORS AND THEIR POTENTIAL THERAPEUTIC APPLICATIONS

Zlatko Janeba

Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, Czech Academy of Sciences,
Flemingovo nám. 2, 16610 Prague 6, Czech Republic

janeba@uochb.cas.cz

Adenylate cyclases (ACs) are important enzymes that have key regulatory roles in basically all cells. ACs catalyse the conversion of adenosine triphosphate (ATP) to 3',5'-cyclic adenosine monophosphate (cAMP) and pyrophosphate. cAMP is a second messenger important in various biological processes. Organic synthesis, compound isolation, docking, enzymatic assays, cell-based assays, cytotoxicity determination.

Novel potent inhibitors of adenylate cyclases (ACs) were designed, synthesized, and their biological properties were evaluated. The structure of the ACs inhibitors is based on acyclic nucleoside phosphonates (ANPs), a group of compounds with a broad spectrum of diverse biological activities [1]. Novel compounds derived from adefovir (PMEA) were found to inhibit bacterial adenylate cyclases, namely adenylate cyclase toxin (ACT) from *Bordetella pertussis* and edema factor (EF) from *Bacillus anthracis* [2,3]. Furthermore, some of the novel analogues were discovered to be potent and selective inhibitors of mammalian AC1, where no inhibition of AC2 and AC5 isoforms was observed [3]. There is a huge therapeutic potential for potent ACs inhibitors: 1.) inhibitors of bacterial ACs could be used as antitoxin therapy in treatment and/or prophylaxis of diseases like whooping cough (pertussis) and anthrax; 2.) the selective inhibitors of mammalian AC1 could be exploited for treatment of human neurological and/or inflammatory diseases.

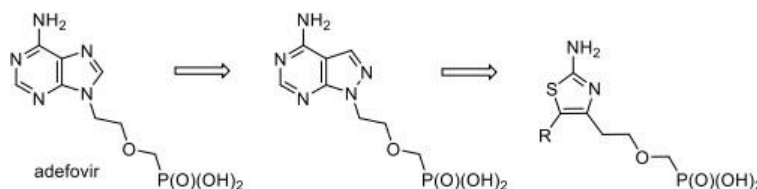


Figure 1. Examples of acyclic nucleoside phosphonates derived from adefovir as potent inhibitors of adenylate cyclases

References

1. De Clercq, E.; Holý, A. *Nat. Rev. Drug Discov.* 2005, 4, 928–940.
2. Břehová, P.; Šmídková, M.; Skácel, J.; Dračínský, M.; Mertlíková-Kaiserová, H.; Soto-Velasquez, M. P.; Watts, V. J.; Janeba, Z. *ChemMedChem* 2016, 11, 2534–2546.
3. Česnek, M.; Skácel, J.; Jansa, P.; Dračínský, M.; Šmídková, M.; Mertlíková-Kaiserová, H.; Soto-Velasquez, M.P.; Watts, V. J.; Janeba, Z. *ChemMedChem* 2018, 13, 1779–1796.

Acknowledgements

This work was supported by the subvention for development of research organization (Czech Academy of Sciences, Institute of Organic Chemistry and Biochemistry, no. RVO 61388963) and by the Ministry of Education, Youth and Sports (MŠMT in Czech) in the program INTER-EXCELLENCE (project LTAUSA18086).



PCQS02

VOACANGINE, BIOACTIVE METABOLITE FROM TABERNAEMONTANA CYMOSA: ITS CHEMISTRY AND BILOGICAL ACTIVITY.

Dr. Fredyc Díaz Castillo Q.F., M.Sc., Ph.D. Phytochemical and Pharmacological Research
Laboratory of the University of Cartagena (LIFFUC). Faculty of Pharmaceutical Sciences.
University of Cartagena

The Apocynaceae family comprises 366 genera, among which, the genera *Tabernaemontana*, *Tabernanthe* and *Voacanga*, are some of the best known. The genus *Tabernaemontana* in Colombia comprise 23 species, being *T. amplifolia* L. Allorge, the only endemic specie found in our country. *Tabernaemontana cymosa* Jacq. is a small tree with leaves ovate-lanceolate acute, whole or slightly wavy (6 in.), whose flowers have axillary tops, broad and beautiful mass of about 40 reddish-white flowers and fruits of two follicles, oblong, recurve, obtuse at the end, with a curved lateral ridge on each side, reddish in color (rusty spots). Seeds are partially wrapped in yellowish succulent funicles. From this plant species have been isolated several monoterpene indole alkaloids (MIAs), being voacangine (1) the most abundant one. MIAs are the most important and most extensive group studied of the indole alkaloids and they derive biogenetically from a single precursor built by condensation of the amino acid tryptophan with the monoterpene secologanin.²

Voacangine was first isolated from *Voacanga africana* by Janot and Goutarel (1955).³ Its structure was formulated by chemical methods by Taylor in 1957.⁴ The crystal and molecular structure of this indol alkaloid was established by Soriano-García et al in 1989 from a single crystal of the compound isolated from *Stemmadenia Donnell-Smithii* Rose ex Donn. Sm., a plant species belonging to the Apocynaceae family which is endemic from Mexico, also known as *Tabernaemontana Donnell-Smithii*. Voacangine has been studied for its several biological activities, such as antibacterial,⁶ antimycobacterial,⁷ antitumoral,⁸ antiviral,⁹ among others. A brief abstract of some results published for the biological activity and chemistry of Voacangine will be presented during the conference.

Special thanks to our funding institutions, Minciencias and the University of Cartagena (Project Code 110777757752, Contract No. 649-2018) and University of Cartagena (Projects 099-2018 y 111-2019)

References:

1. Morales, J.F. 2018-10-13. *Tabernaemontana*. En Bernal, R., S.R. Gradstein & M. Celis (eds.). 2015. Catálogo de plantas y líquenes de Colombia. Instituto de Ciencias Naturales, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá. <http://catalogoplantasdecolombia.unal.edu.co>.
2. M.V. Kisakürec, M. Hesse, in "Indole and Biogenetically Related alkaloids". Ed. by J.D. Phillipson, M.H. Zenk, Academic Press, London, 1982.
3. Janot, M. M., and Goutarel, R. (1955) CR Acad. Sci. Paris, 240, 1800-1801.
4. Taylor, W. I. (1957). J. Am. Chem. Soc., 79, 3298-3299.
5. Soriano-García, M., Rodríguez, A., Walls, F. et al. Crystal and molecular structure of voacangine: An alkaloid from *Stemmadenia Donnell-Smithii*. Journal of Crystallographic and Spectroscopic Research 19, 725–732 (1989). <https://doi.org/10.1007/BF01179845>.
6. Ding, C-F et al. (2018). Antibacterial Indole Alkaloids with Complex Heterocycles from *Voacanga africana*. Org. Lett. 20, 9, 2702–2706. Publication Date: April 20, 2018 <https://doi.org/10.1021/acs.orglett.8b00913>.
7. Rastogi et al. (1998). Antimycobacterial activity of chemically defined natural substances from the Caribbean flora in Guadeloupe. FEMS Immunology and Medical Microbiology 20, 267-273.
8. Kim, Y et al. (2012). A natural small molecule voacangine inhibits angiogenesis both in vitro and in vivo. Biochem Biophys Res Commun 6, 417(1):330-4. doi: 10.1016/j.bbrc.2011.11.109. Epub 2011 Dec 1.
9. Gómez-Calderón et al. (2017). Antiviral effect of compounds derived from the seeds of *Mammea americana* and *Tabernaemontana cymosa* on Dengue and Chikungunya virus infections. BMC Complementary and Alternative Medicine 17:57 DOI 10.1186/s12906-017-1562-1.



PCQS03

INTEGRATED BIOREFINERIES: AN ALTERNATIVE FUTURE FOR THE TRADITIONAL REFINING INDUSTRY.

Dr. Eduardo Falabella

efalabella@eq.ufrj.br

The concepts of biorefinery and integrated biorefinery are presented. The importance of residues conversion in integrated biorefineries is highlighted. Furthermore, the concept of co-processing as a way to introduce green carbon in the existing refining scheme is also emphasised. Different possibilities of inserting liquid biomass in different refinery units are featured. Pure vegetable oils as well as bio-oils generated via catalytic or non-catalytic pyrolysis of biomass are discussed as potential feedstocks for co-processing. Results regarding hydrotreating units in which pure vegetable oils or even waste cooking oils undergo co-processing are depicted. Eventually, results concerning the co-processing of bio-oil in the FCC unit, in the delayed coke unit and in the deasphalting unit are described, indicating that this seems to be an excellent opportunity to insert green carbons in fuels.

MAGNETO INDUCED CATALYSIS WITH ORGANOMETALLIC NANOPARTICLES.

Bruno Chaudret

Laboratoire de Physique et Chimie des Nano-Objets
Institut National des Sciences Appliquées, 135 avenue de Rangueil
31077 Toulouse (France) –

chaudret@insa-toulouse.fr

Magnetic nanoparticles display both interesting core physical properties and interesting surface chemical properties. The composition of the particles allows to modulate their magnetic properties in terms of saturation magnetization, magnetic anisotropy and Curie temperature and hence heating power. Thus magnetic nanoparticles heat when submitted to an alternating magnetic field. Magnetic heating is instantaneous and in principle the best way to transform electrical energy into heat. For this purpose we have developed in Toulouse a new generation of iron based nanoparticles of unprecedented heating power. Iron carbide particles are prepared by carbidization of preformed monodisperse Fe(0) nanoparticles under a CO/H₂ atmosphere at 150°C. They consist essentially of crystalline Fe_{2.2}C, display a SAR (heating power) of up to 3.3 kW/g and are able to hydrogenate CO₂ into methane in a flow reactor after addition of a catalytic Ru or Ni layer and excitation by an alternating magnetic field. Iron nickel nanoparticles have been synthesized from iron amide and nickel amidinate precursors and found very active for CO₂ hydrogenation. Iron cobalt nanoparticles display a much higher Curie temperature and can be used for high temperature catalysis such as propane or methane dry reforming and propane dehydrogenation. In addition, submitting nanoparticles of iron carbide or iron nickel to magnetic heating in solution leads to local over-heating and to perform under a low H₂ pressure difficult reactions such as hydrodeoxygenation of biomass derived platform molecules. The lecture will present the synthesis of the particles, their magnetic properties, their surface modification to deposit a catalytic layer and their catalytic properties for CO₂ hydrogenation in a flow reactor and high temperature catalysis. Further developments of the technique for electrochemical reactions will also be described.

Recent publications:

- * Complex Nano-objects Displaying Both Magnetic and Catalytic Properties: A Proof of Concept for Magnetically Induced Heterogeneous Catalysis A. Meffre, et al. NanoLetters 2015, 15, 3241-3248
- * Magnetically Induced Continuous CO₂ Hydrogenation Using Composite Iron Carbide Nanoparticles of Exceptionally High Heating Power A. Bordet et al. Angew.Chem.Int. Ed. 2016, 55,15894 –15898
- * Organometallic Ruthenium Nanoparticles: Synthesis, Surface Chemistry, and Insights into Ligand Coordination. Martinez-Prieto, L.M.; Chaudret, B. Accounts of Chemical Research 2018, 51, 376
- * Improved water electrolysis using magnetic heating of FeC-Ni core-shell nanoparticles C. 91echnio et al. Nature Energy 2018, 3, 476-483
- * Chemical Ordering in Bimetallic FeCo Nanoparticles : from a direct chemical synthesis to applications as efficient high frequency magnetic materials C. Garnero, et al. Nano Letters 2019, 19, 1379-1386
- * CO₂ Methanation over Ni/SiAlO_x Catalyst Using Magnetic Nanoparticles as a Magnetically-Induced Heating Source S.S. Kale, et al. Catalysis Science & Technology 2019, 9, 2601-2607
- * Water-dispersible and biocompatible iron carbide nanoparticles with high specific absorption rate A. Bordet, et al. ACS Nano, 2019, 13, 2870-2878
- * To Heat or not to Heat: a Study of the Performances of Iron Carbide Nanoparticles in Magnetic Heating J.M. Asensio, et al. Nanoscale, 2019, 11, 5402-5411
- * Hydrodeoxygenation using Magnetic Induction: High-Temperature Heterogeneous Catalysis in Solution J.M. Asensio, et al. Angew.Chem. Int.Ed. 2019, 58, 11306-11310
- * Engineering Iron-Nickel Nanoparticles for Magnetically-Induced CO₂ Methanation in Continuous Flow D. De Masi, et al. Angew.Chem. Int.Ed. 2020, DOI:10.1002/anie.201913865



PERSPECTIVES AND CHALLENGES FOR A BIOECONOMY BASED ON NATURAL PRODUCTS FROM BRAZILIAN HUGE BIODIVERSITY

Vanderlan da Silva Bolzani

Institute of Chemistry, São Paulo State University, Araraquara, SP, Brazil, 14800-900

Keywords: Natural Products, Brazilian Biodiversity, New Trends, Bioproducts, NuBBEDB

The plant chemical diversity is fantastic, and natural product molecular structures is reflected in a large variety of biochemical reaction pathways, which is responsible for several classes of biologically active secondary metabolites. The secondary metabolites from of the Earth's biodiversity is fundamental for the communication, regulation and defense of the species, in the most diverse ecosystems, being indispensable for the balance of biodiversity and the survival of the species in terrestrial and aquatic environments. Plant secondary metabolites also are important supplies for the production of drugs, foods, cosmetics, fragrances, colorants, and agrochemicals, which support a vigorous bioeconomy in several countries. Brazil having one of the highest biodiversity on earth, has enormous potential to generate new scientific and technological knowledge, and to foster an innovative and profitable local bioeconomy. Thus, the study of rapid screening and identification of natural products by means of modern and robust analytical methods is essential for more accurate investigation on the role of natural products of tropical and equatorial plant species. Our recent work on some species of Fabaceae, Malpighiaceae, Euphorbiaceae and Violaceae have shown the importance of natural products of low molecular weight (secondary metabolites) and high molecular weight (cyclotides) for better understanding of tropical plant species, and also as potential templates for medicinal chemistry studies aimed at lead molecules.1-4

Financial Support: CEPID-FAPESP, INCT BIONat CNPq-FAPESP

References

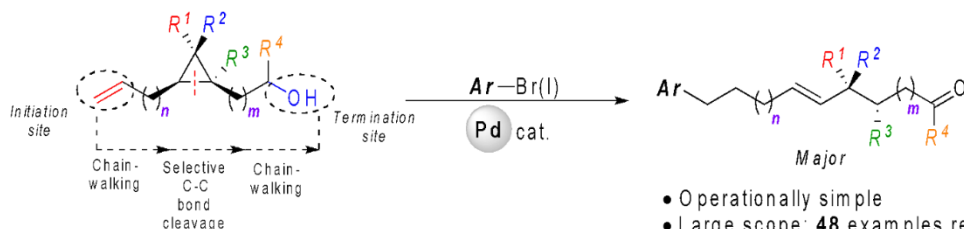
1. Ferreira, Q. M.M., Queiroz, E. F., Zeraik, M. L., Samad N. E., Marcourt. L., Cuendet, C., Castro-Gamboa, I., Hamburger, M., Wolfender, J., Bolzani, V. da S.. *J. Nat. Prod.* 2014, 77, 650–656.
2. Alan C. P., Valli, M., Dameto, C. A., Andricopulo, A.D., Freire, R.T., Castro, I. Bolzani. *V. da S. Scientific Reports*, 2017, 7, 7215.
3. Valli, M. Russo, H. M. Bolzani, V. da S. *An Acad Bras Cienc*, 2018, 90 (1 Suppl. 1), 763-778.
4. Ramalho, S. D., Pinto, M.E., Ferreira, F. Bolzani, V. da S. *Planta Medica*, 2017, 83, 1-13.

REMOTE FUNCTIONALIZATION (MERGING METAL-WALK WITH C-C BOND CLEAVAGE)

Ilan Marek

Schulich Faculty of Chemistry.
Technion-Israel Institute of Technology
Haifa 3200009 Israel
E-mail: chilanm@technion.ac.il

Combining functionalization at a distant position from a reactive site with the creation of several consecutive stereogenic centers, including the formation of a quaternary carbon stereocenter, in acyclic system represents a pinnacle in organic synthesis. Here we report the regioselective Heck arylation of terminal olefins as a distant trigger for the ring-opening of cyclopropanes. This Pd-catalyzed unfolding of strained cycle, driving force of the chain-walking process, remarkably proved its efficiency and versatility, as the reaction proceeded regardless of the molecular distance between the initiation (double bond) and termination (alcohol) sites. Moreover, employing stereodefined polysubstituted cyclopropane vaults allowed to access sophisticated stereo-enriched acyclic scaffolds in good yields. Conceptually, we demonstrated that merging catalytically a chain walking process with a selective C–C bond cleavage represents a powerful approach to construct linear skeleton possessing several stereogenic centers.



- Operationally simple
- Large scope: **48** examples reported
- High selectivities: $E/Z > 99:01$, $d.r. > 98:02$
- Remote functionalization: $n = 1-5$, $m = 0-2$
- Mechanistic insights

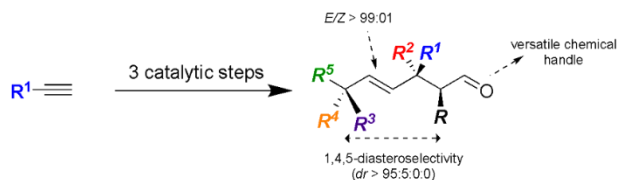
■ **Four adjacent stereogenic elements** in an acyclic series

- **High stereoselectivity** for an acyclic system (er up to **93:07**, $dr > 95:5:0:0$, $E/Z > 99:01$)

- Stereoselective construction of two sp^3 **all-carbon quaternary stereocenters** from sp carbons

- Diversity-oriented synthesis (> **36** examples)

- Highly modular, convergent and unified strategy





PCQS07

DISEÑO MOLECULAR DE CATALIZADORES PARA LA REDUCCIÓN DE LAS EMISIONES DE CO₂.

Dr. Javier García



PCQB01

KILOGRAM INSTEAD OF MILLIGRAM SAMPLES: NEW MULTI-ELEMENT ANALYSIS OPPORTUNITIES FOR GEO- AND OTHER APPLIED SCIENCES.

Dr. Peter Bode

Em.Assoc.Prof. Delft University of Technology, Nuclear Science and Technology NUQAM
Consultancy, Zuid-Beijerland, The Netherlands.

Large amounts of material, from tens of grams up to several kilograms, can be analysed directly for multi-element contents by nuclear analytical techniques such as neutron activation analysis (NAA), without any need for sample size reduction such as powdering, homogenization and/or dissolution. Even irregular shaped samples can be managed by this innovation. Moreover, additional opportunities of large sample analysis are on the horizon such as 3-dimensional element imaging. These innovations provide unprecedented opportunities complementary to those already offered by NAA for various applied fields including the geosciences. It eliminates the need for sub-sampling, sample processing by crushing, milling, sieving, powdering and homogenization, and/or dissolution as common in most analytical techniques; which all may affect the representativeness of the test results for the object of interest. Niches may therefore be found with, e.g., materials difficult or impossible to decompose (like refractory minerals), materials that are too precious to sub-sample or dissolve (like extra-terrestrial material) and measurement of elements that are inhomogeneously distributed, like Au. The concept and examples of large sample NAA in an array of applied fields, including the geosciences, will be presented. An overview will be given of the status and current capabilities of laboratories in Latin America for normal NAA and for this large sample approach.



PCQB02

COLOMBIAN RIVERS: BETWEEN THE ABANDONMENT AND THE CHEMICO-BIOLOGICAL DEATH.

Dr. Jesús Olivero Verbel. Ph.D.

Environmental and Computational Chemistry Group
Doctoral Program in Environmental Toxicology
School of Pharmaceutical Sciences
University of Cartagena

joliverov@unicartagena.edu.co

Colombia has many natural resources that are key to achieve sustainable development. However, main rivers are being severely affected and nothing seems to halt the damage. A pollution profile carried out using *Caenorhabditis elegans* as a sensor suggested Magdalena River, the most important in the country, is highly impacted by a number of pollutants, most received from Andean cities that uses it as a final destination for untreated sewage waters, and also from legal and illegal mining, refinery based operations and extensive monocultures. The importance of this river is not considered in terms of ecosystem services, rather it is seen as a waterway to transport petroleum, coal and some goods, and thus, major significant investments in its basin are thought in terms of dredging. The Atrato River, located in one of the world's biodiversity hotspots, is deeply intervened by gold mining, activity that has destroyed its natural channel and its biodiversity-rich rainforest, increasing pollution by many elements in sediments and local biota. Although the Colombian Amazon basin comprises several rivers, major ones, such as the Caqueta and Apaporis, display high mercury contamination that has reached indigenous populations. A critical stressor that deserves greater attention in these rivers is parasitism, as high prevalence of several parasites has been identified in many fish species. The challenges ahead are gigantic, and governmental, non- governmental and academic organizations should work together to guarantee a better future for Colombian Rivers and associated communities.

N-HETEROCYCLIC CARBENE-STABILIZED METALLIC NANOPARTICLES FOR CATALYTIC APPLICATIONS IN WATER.

Dr. Edwin Baquero¹

¹Estado Sólido y Catálisis Ambiental (ESCA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá. Carrera 30 No. 45-03, 111321, Bogotá, Colombia.

N-Heterocyclic Carbene Ligands (NHC) have gained great attention in the scientific community due to their unique stereoelectronic properties for stabilizing organometallic species. Consequently, organometallic complexes bonded to these ligands have shown to be excellent catalysts for several organic transformations in both organic and aqueous phase.^[1] Indeed, and thanks to these unique properties, one of the most recent applications of NHC ligands is the use as nanoparticles stabilizers.^[2] However, most of these examples as stabilizers have been carried out in organic solvents. In contrast, the use of water as a solvent, is of high relevance due to their unique reactivity, low toxicity, and low cost.

On the other hand, C(sp³)-H bond activation is a powerful tool for the direct functionalization of organic molecules. C-D bond formation using this strategy, through a Hydrogen Isotope Exchange (HIE) reactions, enable the access to deuterated labeled organic molecules in a simple manner. These molecules are widely used not only in pharmaceutical industries, but also for mechanistic studies in organic and organometallic chemistry.^[3] Although most of the catalytic HIE reactions studied have been carried out in homogeneous and heterogenous fashion, the use of metallic nanocatalysts for this reaction still remains a challenge in chemistry.

In this talk, I will show the most recent advances that we have developed in the synthesis of metallic nanoparticles stabilized with N-Heterocyclic Carbene ligands for catalytic applications in water. In summary, I will present the synthesis of water-soluble NHC Pt, Ru, Pt/Ru, Ir, and Ir/Ru nanoparticles and their catalytic application in hydrogenation and HIE reactions of different substrates in water.^[4-7] Special emphasis to mechanistic studies that we have developed using these systems will be presented.

[1] M. N. Hopkinson, C. Richter, M. Schedler and F. Glorius, *Nature*, **2014**, 510, 485.

[2] a) A. V. Zhukhovitskiy, M. J. MacLeod and J. A. Johnson, *Chem. Rev.*, **2015**, 115, 11503; b) Y.-Y. An, J.-G. Yu and Y.-F. Han, *Chin. J. Chem.*, 2019, 37, 76.

[3] J. Atzrodt, V. Derdau, T. Fey, J. Zimmermann, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2007**, 46, 7744.

[4] E. A. Baquero, S. Tricard, J. C. Flores, E. de Jesús, and B. Chaudret, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2014**, 53, 13220.

[5] L. M. Martínez-Prieto, E. A. Baquero, G. Pieters, J. C. Flores, E. de Jesús, C. Nayral, F. Delpech, P. W. N. M. van Leeuwen, G. Lippens and B. Chaudret, *Chem. Commun.*, **2017**, 53, 5850.

[6] D. Bouzouita, G. Lippens, E. A. Baquero, P. F. Fazzini, G. Pieters, Y. Coppel, P. Lecante, S. Tricard, L. M. Martínez-Prieto, and B. Chaudret, *Nanoscale*, 2019, 11, 16544.

[7] A. M. Ruiz-Varilla, E. A. Baquero, B. Chaudret, E. de Jesús, C. Gonzalez-Arellano, J. C. Flores, *Cat. Sci. Tech.*, **2020**, 10, 2874.

Key words: Platinum; Ruthenium; Iridium, NHC, Nanoparticles; HIE Reactions



PCQB04

MECHANISMS OF REMOVAL OF HEAVY METALS AND ARSENIC FROM WATER BY TiO₂-HETEROGENEOUS PHOTOCATALYSIS

Marta I. Litter

Instituto de Investigación e Ingeniería Ambiental, IIIA CONICET-UNSAM, Argentina

•**Corresponding author:** E-mail: marta.litter@gmail.com; Tel.: 5491130132815

Abstract. Presence of heavy metals and metalloids in water represents nowadays one of the most important environmental problems. These species have infinite lifetimes, and chemical or biological treatments present severe restrictions or are economically prohibitive. Chromium, mercury, uranium, arsenic or lead are in the list of priority pollutants of most environmental agencies, with more and more exigent limits of discharge or concentration in drinking water. From the beginning of the development of heterogeneous photocatalysis, transformation and deposition of metals was visualized as one of the potential applications of the process. Three types of mechanisms can be considered for these processes, all of them taking place through successive monoelectronic electron transfer steps: (a) direct reduction by photogenerated electrons; (b) indirect reduction by intermediates generated from electron donors (reducing radicals); (c) oxidative removal by holes or hydroxyl radicals. This presentation is an overview of recent work performed in our laboratory with the cases of chromium and arsenic treated in profundity.

Keywords: TiO₂-photocatalysis; metal ions, chromium, arsenic



PCQB05

FRUTAS Y TUBÉRCULOS: ESTUDIO DE SU BIODIVERSIDAD, APROVECHAMIENTO DE RESIDUOS, DISEÑO DE ALIMENTOS Y ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA DE ALIMENTOS.

Dr. Carlos Narvaez

Carlos-Eduardo Narváez-Cuenca a* ; Andrea del Pilar Sánchez-Camargo b ; Diego Ballesteros-Vivas c ; Blanca Laura Ortiz ae ; Cecilia Anzola ae ; Luz Patricia Restrepo ae ; Fabián Parada-Alfonso a ; Liliam Palomeque-Forero a ; Luis Ignacio Rodríguez-Varela da Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Grupo de Investigación en Química de Alimentos-GiQA, Bogotá, Colombia. b Universidad de los Andes, Departamento de Ingeniería Química y de Alimentos. c Pontificia Universidad Javeriana, Departamento de Nutrición y Bioquímica. d Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química, GiQA, Bogotá, Colombia. e Profesoras pensionadas, activas en el grupo de investigación.

*cenarvaezc@unal.edu.co, líder del grupo de investigación en Química de Alimentos

El grupo de investigación en Química de Alimentos-GIQA (COL0004549) actualmente trabaja en cuatro líneas de investigación: (i) biodiversidad de frutas y tubérculos, (ii) valorización de subproductos agroindustriales, (iii) diseño de alimentos y (iv) enseñanza en química de alimentos. Desde su creación oficial en 2002 ante el actual Ministerio de Ciencia y Tecnología, antiguo COLCIENCIAS, el GIQA ha publicado cerca de 160 artículos científicos y participado en la formación de más de 130 estudiantes en sus trabajos de grado de pregrado en Química, Farmacia e Ingeniería Química, y en tesis de posgrado (especialización, maestría y doctorado) en Ciencias-Química, Ciencia y Tecnología de Alimentos y Ciencias Agronómicas. Hacen parte de este grupo los coautores del presente trabajo 1 . Dentro de las líneas de investigación mencionadas cabe señalar: (i) respecto a la primera línea, el GIQA participó en el estudio sobre la diversidad genética de más de 100 genotipos de papa criolla (*Solanum tuberosum* Grupo Phureja), apartando al desarrollo de tres nuevos cultivares de este tipo de papa (Criolla Sua Pa, Criolla Ocarina y Criolla Dorada), estos nuevos cultivares tienen mayor rendimiento, mayor resistencia a enfermedades y mayor contenido nutricional y en bioactivos que el cultivar de papa amarilla más comercializada (Criolla Colombia). Actualmente estos nuevos cultivares están incorporados en los cultivos y cadenas de comercialización en Colombia; (ii) con relación a la segunda línea, el equipo de trabajo ha realizado diferentes estudios frente a la obtención de extractos mediante técnicas verdes de extracción, la identificación de compuestos bioactivos y el estudio del potencial uso de dichos extractos en la industria alimentaria y farmacéutica. Se ha prestado especial interés a la obtención de extractos de residuos de la industria frutícola mediante el empleo de CO₂ supercrítico y fluidos presurizados, por ejemplo, se obtuvieron extractos de residuos de mango de azúcar ricos en carotenoides, con capacidad de inhibir rancidez oxidativa en aceites comestibles; (iii) en cuanto a la tercera línea, el GIQA ha evaluado el efecto de características estructurales de pectinas sobre la digestión de lípidos, en este tipo de estudios se ha concluido que las pectinas controlan el metabolismo de los lípidos al afectar la estabilidad de las emulsiones en el tracto gastrointestinal, inhibir la actividad de lipasa y limitar la difusión de lípidos; (iv) respecto a la última línea, el grupo contribuye a la formación de estudiantes en la Maestría en Enseñanza de las Ciencias a través de proyectos educativos que buscan el aprendizaje de las ciencias de estudiantes de educación básica y secundaria. En la actualidad el GIQA continúa aportando al estudio de frutas y tubérculos colombianos, con el propósito de contribuir en su caracterización (bio) química, así como en la diversificación de sus usos, queriendo estimular el desarrollo rural sostenible, la apropiación social del conocimiento y el impacto del avance científico en la sociedad. Para lo anterior el Grupo participa en los proyectos “Valorización de subproductos del proceso de beneficio del cacao del Departamento de Nariño mediante la aplicación de tecnologías emergentes” (código Hermes 50466), financiado por la Universidad Nacional de Colombia, y “Aprovechamiento de la biodiversidad en agraz y papa para el desarrollo de cultivos promisorios en el departamento de Santander” (código Hermes 45744), con financiación del Sistema Nacional de Regalías. El GIQA se encuentra enfocado en enmarcar sus trabajos dentro de la Agenda 2030 para el Desarrollo Sostenible, reforzando el cumplimiento de los Objetivos de Desarrollo Sostenible-ODS y los preceptos de la química verde.

Agradecimientos: A la Universidad Nacional de Colombia por la financiación del proyecto “Biorrefinerías II: Estudio del potencial antioxidante y del contenido de fibra en biomásas no convencionales, con miras a explorar su aplicación en las industrias panificadora y aceitera, bajo la óptica del desarrollo sostenible” (código Hermes 47233).

SAMPLING IS THE CHEMIST'S RESPONSIBILITY.

Rodolfo J Romañach, Ph.D.
Professor of Chemistry,
University of Puerto Rico, Mayagüez,

The analytical chemist is often focused on analyzing a sample in the laboratory, with methods that are thoroughly validated. The chemist is focused on laboratory analyses, and is often unfamiliar with manufacturing facility and processes. Many chemists believe that their job is to analyze samples and provide results; sampling is not their responsibility. However, the results obtained in every analytical method depend on how the sample was obtained. Thus, Quality Control should start with representative sampling.

This conference will describe the application of the Theory of Sampling to pharmaceutical manufacturing. The Theory of Sampling is defined as the complement of Governing Principles and Best Practices (Sampling Unit Operations, SUO) needed to overcome the effects of material heterogeneity to provide sampling representativeness when followed. 1, 2 These principles and best practices were developed by Pierre Gy for the mining industry many years ago, and are now part of an international effort to develop a world sampling community. 3-6

This conference will propose two paradigm shifts: 1. Chemists are responsible for sampling, and 2. Chemists do not have to wait for a sample to be brought to the lab. Recent studies with new interfaces for real time analysis of pharmaceutical materials will be presented, moving the analytical laboratory into the pharmaceutical manufacturing area. 7-9

References:

1. Esbensen, K. H.; Romañach, R. J.; Román-Ospino, A. D., Chapter 4 - Theory of Sampling (TOS): A Necessary and Sufficient Guarantee for Reliable Multivariate Data Analysis in Pharmaceutical Manufacturing In *Multivariate Analysis in the Pharmaceutical Industry*, Ferreira, A. P.; Menezes, J. C.; Toba, M., Eds. Academic Press: London, United Kingdom, **2018**; pp 53-91.
2. Danish-Standards-Foundation, DS 3077(2013). In *Representative Sampling – Horizontal Standard*, Danish Standards Foundation: **2013**; pp 1- 42.
3. Gy, P., *Sampling for Analytical Purposes*. 1st ed.; Wiley: New York **1998**.
4. Gy, P., Sampling of discrete materials - a new introduction to the theory of sampling - I. Qualitative approach. *Chemometrics Intellig. Lab. Syst.* **2004**, 74 (1), 7-24.
5. Esbensen, K. H., *Introduction to the Theory and Practice of Sampling*. IMP Open: Chichester, West Sussex PO18 0HY, UK, **2020**.
6. IPGSA The International Pierre Gy Sampling Association. <https://intsamp.org/>.
7. Alvarado-Hernández, B. B.; Sierra-Vega, N. O.; Martínez-Cartagena, P.; Hormaza, M.; Méndez, R.; Romañach, R. J., A sampling system for flowing powders based on the theory of sampling. *Int. J. Pharm.* **2020**, 574, 118874.
8. Sierra-Vega, N. O.; Román-Ospino, A.; Scicolone, J.; Muzzio, F. J.; Romañach, R. J.; Méndez, R., Assessment of blend uniformity in a continuous tablet manufacturing process. *Int. J. Pharm.* **2019**, 560, 322-333.
9. Esbensen, K. H.; Román-Ospino, A. D.; Sanchez, A.; Romañach, R. J., Adequacy and verifiability of pharmaceutical mixtures and dose units by variographic analysis (Theory of Sampling) – A call for a regulatory paradigm shift. *Int. J. Pharm.* **2016**, 499 (1–2), 156-174.



PCQB07

**APLICACIÓN DE TECNOLOGÍAS ÓMICAS A LA AUTENTICIDAD DE ALIMENTOS:
DE LA ELECTROFORESIS A LA PROTEÓMICA DE PRÓXIMA GENERACIÓN.**

Dr. Ignacio Ortea



INDUSTRIAL WASTE-DERIVED NANOMATERIALS FOR ENERGY, HEALTH AND ENVIRONMENTAL APPLICATIONS.

Edgar Mosquera, PhD

Grupo de Transiciones de Fase y Materiales Funcionales, Departamento de Física, Universidad del Valle, Santiago de Cali, Colombia. Centro de Excelencia en Nuevos Materiales, Universidad del Valle, Santiago de Cali, Colombia

During the last decades, developing countries has seen the need to advance their financial growth by increased industrial activity due to the increase in their population. Such industries are the fundamental cause of energy consumption, health problems and water contamination. Energy generation from conventional fossil fuels has been identified as the main culprit of environmental quality degradation and environmental pollution problem. Recently, nanomaterials have attracted great attention due to the excellent physical and chemical properties at nanoscale level. Therefore, it is estimated that the world will need to increase its energy supply and potable water by 2050. However, the energy crisis and pollution (air and water) has emerged as one of the main concerns around the world, and in order to address these issues, nanotechnology plays an essential role in revolutionizing the device applications for energy efficiency (conversion and storage), and environmental remediation, as well as green engineering of environmental friendly materials. The design and synthesis of metal oxide and carbon nanomaterials are one of the key steps to achieve the conversion of high efficiency energy and storage, and photoremediation on an industrial scale. This review summarizes the synthesis and characterization of nanomaterials of metal oxides and carbon and their study in applications for energy, health and environmental.



DESAFÍOS DE UNA EDUCACIÓN QUÍMICA CENTRADA EN EL APRENDIZAJE.

Dra. Diana Farías

Grupo de Investigación en Enseñanza de la Química

Departamento de Química

Universidad Nacional de Colombia

Keywords: Aprendizaje centrado en estudiante, Educación química

En este trabajo se plantean algunos desafíos que debe asumir la enseñanza de las ciencias en general, y la educación química en particular, en un escenario global que busca la transición desde modelos tradicionales basados en la "transmisión" de conceptos, a uno en el que el estudiante es el centro.

Es un documento que, desde la perspectiva crítica, parte de una revisión documental comparativa de referentes contemporáneos en educación, programas asignatura de cursos de química, contenidos de libros de texto, estándares nacionales de ciencias y preguntas de pruebas estandarizadas, para mostrar los desafíos para la enseñanza de la química hoy. La enseñanza de las ciencias en general y la de la química en particular se debe transformar. Los estudiantes y maestros tienen que asumir un rol constante de aprendices autónomos que permita entender la química como enseñable en un escenario cambiante en el que se busca que el aprendizaje sea el centro. Ese aprendizaje debe ser además situado, significativo, pertinente para la vida y el contexto de los estudiantes y de los maestros. Los currículos actuales, las herramientas de aula, las evaluaciones estandarizadas que condicionan diferentes prácticas de aula distan enormemente de una enseñanza de la química centrada en el aprendizaje de los estudiantes y maestros, por lo que se debe transformar si queremos formar verdaderamente ciudadanos que desde la ciencia puedan entender el mundo en el que viven.

Referencias

Bauman, Z. Los retos de la educación en la modernidad líquida; Gedisa: Barcelona, 2008. Ozola, S. Student-Centred Learning: a Dream or Reality; Distributed by ERIC Clearinghouse, 2012. Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá



PCQB10

**IMPLEMENTACIÓN DE LA SOSTENIBILIDAD EN LAS ETAPAS TEMPRANAS DEL
DISEÑO DE PRODUCTOS Y PROCESOS QUÍMICOS.**

Dr. Paulo César Narváez Rincón



PCQA01

**AVANCES SIGNIFICATIVOS EN EL ESTUDIO DE LOS CONTAMINANTES
ORGÁNICOS PERSISTENTES EN COLOMBIA.**

Dr. Esteban Abad



CHLOROSULFONIUM SALTS AND α -CHLOROSULFIDES, VERSATILE PRECURSORS OF HETEROCYCLES.

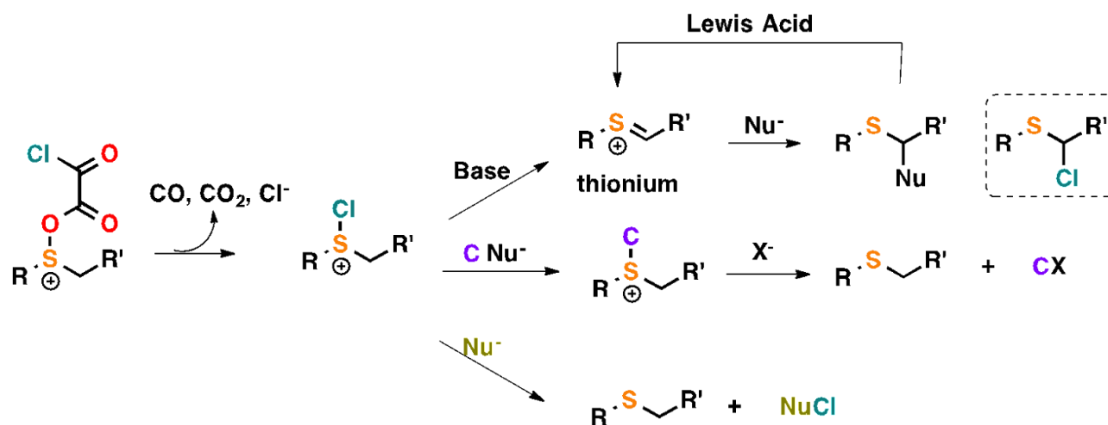
Diego Gamba-Sanchez

Laboratory of Organic Synthesis, Bio and Organocatalysis, Chemistry Department, Universidad de los Andes, Cra 1 No. 18A-12; Q:305, Bogotá 111711, Colombia

The reaction of sulfoxides with electrophiles is known to produce sulfonium salts. Very interesting intermediates in a huge number of new reactions. When the electrophile is oxalyl chloride the reaction generates a chlorosulfonium salt which has at least three possible reaction pathways. First, the spontaneous formation of a thionium ion which can be trapped with a variety of nucleophilic species, including aromatics. Second, the reaction with a carbon nucleophile will generate a carbon sulfonium salt, which is used as source of electrophilic carbon atoms, in other words this is a carbon umpolung reaction, and finally a good nucleophile may be used as a chlorine scavenger, thus making the chlorosulfonium an alternative source of electrophilic chlorine.

We have studied the behavior of chlorosulfoniums and succeeded in their application in new methodologies to obtain simple molecules, but also, we have shown the huge functional group tolerance of these compounds and their potential as intermediates.

The versatility of chlorosulfoniums and α -chlorosulfides is disclosed using examples of applications in synthesis of heterocycles.





PCQA03

ESTUDIOS SOBRE LA SOLVATACIÓN DE RESORCIN [4]ARENOS EN SOLUCIÓN.

Dr. Edgar Vargas

Los resorcin[4]arenos son moléculas con interesantes propiedades estructurales que los convierte en solutos de interés para el estudio de la solvatación de macrociclos en solución acuosa y no acuosa. En la literatura se han descrito una cantidad importante de aplicaciones de estos compuestos, sin embargo, su comportamiento en solución no ha sido abordado suficientemente. En esta contribución se muestra información sobre estudios fisicoquímicos de resorcin[4]arenos iónicos y no iónicos en solventes acuosos y no acuosos. La información sobre la solvatación ha sido obtenida a partir de propiedades termodinámicas, acústicas y de transporte de series homologas, donde se varia sistemáticamente las cadenas hidrocarbonadas. Adicionalmente se presentan estudios sobre interacción de los resorcin[4]arenos con biomoléculas, aspecto muy importante en química supramolecular.



PCQA04

EDUCACIÓN QUÍMICA Y SOCIEDAD EN TIEMPOS DE INCERTIDUMBRE.

Dr. Mario Quintanilla



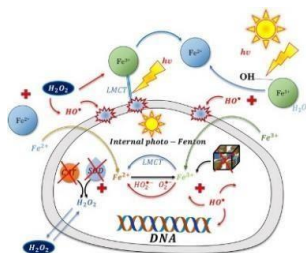
PCQA05

HACIA LA ECONOMÍA DEL HIDRÓGENO.

Dr. Andrés Mantilla Zárate

IRON CONTAINING SALTS, FE-OXIDES AND FE-COMPLEXES DRAMATICALLY ENHANCE SOLAR WATER DISINFECTION.

C. Pulgarin, Group of Advanced Oxidation Processes, EPFL, Station 6, Lausanne, Switzerland. Honorary member of the Colombian Academy of Exact Physical and Natural Sciences



Around 7-8 million of people in the world get microbiologically safe drinking water by exposing bottles containing contaminated water to solar irradiation. In solar disinfection (SODIS), naturally present, or added iron species enhance the disinfecting process by i) the action of dissolved iron (from salts), ii) the presence of iron particles (semiconductor action of iron oxides) and iii) the complexed iron by natural ligands. This enhancement is observed for bacteria, virus, yeasts and other aquatic contaminating organisms. However, this talk especially stress the homogeneous and heterogeneous action modes of iron species on bacteria. Finally, perspectives for the use of these processes on other fields, as self-disinfecting surfaces design, is also discussed.

Introduction. Iron is the 4th most common element amongst the ones contained in Earth's crust. Its importance in nature was further verified in the Fenton reaction more than 120 years ago, as well as the Haber-Weiss reactions, implicated in biological processes [1]. As such, its use as a catalyst in disinfection processes, withholds many complications, still not fully comprehended. This work aims towards the elucidation of the various mechanistic action modes of iron during bacterial disinfection, driven by the presence of solar light, and to critically present the effects of the rich photocatalytic facets of the same element, namely iron salts, iron oxides, and complexed iron.

Results and Discussion. Among the existing works, the first distinction made deals with the water matrix acting as solvents of the disinfection process, namely distilled water (MQ) or natural waters. In pure water sources, iron salts addition in the bulk are documented to either penetrate the cell via transport mechanisms and proteins, or bind with the external surface of the bacterial cell wall [2]. The lifetime of this process is limited to minutes, before the transformation of cationic iron to insoluble forms due to the operational near neutral pH [3]. The presence of iron oxides on the other hand, is characterized by their potential action as semiconductors, since many iron oxides such as hematite, maghemite or wüstite present potent band gaps (2.0 to 2.4 eV) [4]. In order to overcome the most common problems of iron precipitation in near-neutral pH, natural (citrate and others) and synthetic (EDDS) chelating agents have been used [5-7]. In natural waters, natural organic matter (NOM) has a double role in photo-Fenton disinfection: 1) detrimental as scavenger of reactive oxygen species (ROS) which are the main actors of the bacteria and virus inactivation; 2) beneficial by its participation in complexing iron, thus maintaining it in solution and feeding an efficient homogeneous photocatalytic cycle [2] and by generating ROS (i.e. H₂O₂) via the reaction of 3O₂ from air with photosensitized NOM. Towards iron oxides, it worth to consider its double action as heterogeneous photo-Fenton catalyst that take advantage of H₂O₂ generated by photo-excited NOM and as a semiconductor in a similar way that TiO₂ but with a lower oxidative power of generated holes (h⁺). When H₂O₂ is added to enhance heterogeneous photo-Fenton action mode, even iron oxides with small band gap and fast recombination rates (e.g. magnetite) effectively lead to bacterial inactivation [4]. If a step-wise construction of the solar-assisted photo-Fenton is attempted, iron and H₂O₂ appear in various stages, even without its addition in the bulk [8,9]. Indeed, when solar light is provided in the solution, inactivation of ROS regulating enzymes takes place into the bacterial cell, leading to accumulation of H₂O₂ [10]. Considering that the Fe/S clusters and other iron-bearing proteins of the cell are destroyed by UVA part of solar light, liberating central Fe, an internal photo-Fenton is taking place, leading to bacterial inactivation [8]. Adding Fe in the solution will only aggravate the situation; Fe²⁺ transported into the cell further imbalances the internal ROS generation, Fe³⁺ binds to the cell wall, facilitating a ligand-to-metal charge transfer (LMCT)



and reduces Fe³⁺ to Fe²⁺ while damaging the cell wall [11]. Fe²⁺,³⁺ conversion to iron oxides, their presence or voluntary addition will induce semiconductor action mode, with direct oxidative damage from the holes (h⁺) and generation of and IO₂ by the electrons reacting with O₂, or HO• by photo-induced electron transfer between HO⁻ adsorbed on iron oxides particles and linked to constitutional Fe⁺³ as (Fe-OH)⁺². If H₂O₂ (generated by photo excited NOM or voluntary added) is present [4] heterogeneous photo-Fenton events take place; plus, enhanced photo-dissolution of iron into the bulk may lead also to important homogeneous photo-Fenton process contribution on the overall oxidative [4,12]. Last but not least, the presence of chelating agents in the bulk as NOM or added natural acids as citric [2,13] will prolong the aforementioned events in duration and facilitate their evolution up to alkaline pH values. The photo-activity of the complexes and their role as sacrificial electron donors facilitates direct damage and generation of oxidized ligands, which in turn can contribute to the generation of further ROS [8]. The oxidative action of the photo-Fenton process has been verified against bacteria, viruses and yeasts, indicating that the array of applications is not limited to bacterial inactivation, but a variety of microorganisms is susceptible to its mode of action [2, 12, 14]

Conclusions. In conclusion, it is made clear that the possible positive implications of iron chemistry in the solar disinfection processes state the topic as a priority in investigation, competing with well-established processes, such as TiO₂ photo-catalysis, and challenges its further use towards chemical contaminants.

Acknowledgments. The authors wish to acknowledge the WATERSPOUTT project, which has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under grant agreement No 688928.

References

- [1] J.A. Imlay, Annual Reviews in Microbiology 57 (2003) 395-418.
- [2] D. Spuhler, J.A. Rengifo-Herrera, C. Pulgarin, Applied catalysis. B, Environmental 96 (2010) 126-141.
- [3] B. Morgan, O. Lahav, Chemosphere 68 (2007) 2080-2084.
- [4] C. Ruales-Lonfat, J.F. Barona, A. Sienkiewicz, M. Bensimon, J. Vélez-Colmenares, N. Benítez, C. Pulgarín, Applied Catalysis B: Environmental 166–167 (2015) 497-508.
- [5] M. Cho, Y. Lee, H. Chung, J. Yoon, Applied and environmental microbiology 70 (2004) 1129-1134.
- [6] S. Papoutsakis, F. Brites-Nobrega, C. Pulgarin, S. Malato, Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry 303 (2015) 1-7.
- [7] C. Ruales-Lonfat, J.F. Barona, A. Sienkiewicz, J. Vélez, L.N. Benítez, C. Pulgarín, Applied Catalysis B: Environmental 180 (2016) 379-390.
- [8] S. Giannakis, M.I. Polo López, D. Spuhler, J.A. Sánchez Pérez, P. Fernández Ibáñez, C. Pulgarin, Applied Catalysis B: Environmental 199 (2016) 199-223.
- [9] S. Giannakis, M.I. Polo López, D. Spuhler, J.A. Sánchez Pérez, P. Fernández Ibáñez, C. Pulgarin, Applied Catalysis B: Environmental 198 (2016) 431-446.
- [10] M. Castro-Alfárez, M.I. Polo-López, P. Fernández-Ibáñez, Scientific Reports 6 (2016) 38145.
- [11] C. Ruales-Lonfat, N. Benítez, A. Sienkiewicz, C. Pulgarín, Applied Catalysis B: Environmental 160 (2014) 286-297.
- [12] S. Giannakis, S. Liu, A. Carratalà, S. Rtimi, M. Bensimon, C. Pulgarin, Applied Catalysis B: Environmental 204 (2017) 156-166.
- [13] P. Villegas-Guzman, S. Giannakis, R.A. Torres-Palma, C. Pulgarin, Applied Catalysis B: Environmental 205 (2017) 219-227.
- [14] S. Giannakis, C. Ruales-Lonfat, S. Rtimi, S. Thabet, P. Cotton, C. Pulgarin, Applied Catalysis B: Environmental 185 (2016) 150-162.
- [15] Feng, L.; Peillel-Delphe, C.; Lu, C.; Wang, D.; Giannakis, S.; Pulgarin, C; Water Research 182 (2020),



PCQA07

COMPUTATIONAL DESIGN OF COPPER LIGANDS FOR ALZHEIMER'S DISEASE.

Dr. Jorge Ali Torres

Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

jialit@unal.edu.co**Abstract:**

Redox active metal cations, such as Cu²⁺, have been related to induce amyloid plaques formation and oxidative stress, which are two of the key events in the development of Alzheimer's disease (AD) and others metal promoted neurodegenerative diseases. In this talk, I will present our recent investigation on the design and computational evaluation for the selection of multifunctional ligands with suitable metal chelating, pharmacokinetics, and redox properties. The filtering process is based on quantum chemical calculations and the use of in silico tools. Quantum chemical calculations were performed by using the M06-2X density functional. Then, a virtual screening technique (VS) was used for similar structure search. Protocol application allowed the assessment of chelating, drug likeness, and redox properties of copper ligands. Those molecules showing the best features were selected as molecular scaffolds for a VS procedure in order to obtain related compounds. After applying this process, we present a list of candidates with suitable properties to prevent the redox reactions mediated by copper(II) ion.

Keywords: Alzheimer, copper, ligands, SRP.**References.**

D. Chaparro, A. Flores-Gaspar, J. Alí-Torres, Journal of Alzheimer's Disease, vol. 82, no. s1, pp. S179-S193, 2021 División de Investigación Sede Bogotá - DIB UNAL



Charlas Técnicas

CT01

MICROPLASTICS – COMPREHENSIVE ANALYTICAL WORKFLOWS FOR IMPROVING THE UNDERSTANDING OF THEIR OCCURRENCE.

Dra. Ruth Marfil-Vega

Microplastics' occurrence is a major contributor to aquatic pollution and threat to marine ecosystems because these contaminants persist in the environment for hundreds of years. Estimates calculated in 2019 suggest that mass of microplastics in aquatic habitat will surpass that of fish by 2050. This prediction has dramatically changed with the impact of the COVID-19 pandemic as the use of single-use plastic products have increased since early 2020. This highlights the need for better understanding of the occurrence, fate and effects of microplastics within the context of the overall life cycle of plastic-based waste. In this presentation, we will provide an overview of the latest developments in the United States for the standardization of methods for the analysis of microplastics. Additionally, we will present a comprehensive analytical monitoring strategy for characterizing the life cycle of plastics, from the macro- to the micro- sizes, and their traces components.

Microplásticos son uno de los mayores contribuyentes a la contaminación acuática y presentan una amenaza para la salud de los ecosistemas marinos porque persisten en el medio ambiente durante siglos. Estimaciones en el 2019 predijeron que la cantidad de microplásticos en ecosistemas acuáticos superará la cantidad de peces en el 2050. Pero esta predicción cambió drásticamente con el impacto de la pandemia global de COVID-19, ya que el uso de plásticos de un solo uso aumento desde principios del año 2020. Por estas razones es necesario un mejor conocimiento de la presencia, el transporte y los efectos de los microplásticos dentro del ciclo de vida de los plásticos. En esta presentación compartiremos los últimos avances en los Estados Unidos para estandarizar los métodos de análisis de microplásticos. También presentaremos un protocolo analítico para caracterizar el ciclo de vida de los plásticos, desde los macroplásticos a los microplásticos, y sus componentes traza.



CT02

CONNECTING DATA: THE WAY TO CREATE NEW VALUE AND ACCELERATE YOUR DISCOVERY.

Zach Baum; Jacob Al-Saleem

In the increasingly connected world of scientific research, discoveries are being made by integrating data between disciplines and modeling their relationships. However, challenges of applying artificial intelligence to chemical problems still exist, ranging from data representation to model selection. This series of talks demonstrates the ways in which researchers have overcome these challenges to derive useful insights for chemical applications. By providing an overview of artificial intelligence in chemistry and presenting a study highlighting knowledge graphs applied to drug repurposing, we aim to inspire scientists to seek connections within their data and to the wider research landscape.

Conectando los datos: cómo crear nuevo conocimiento científico y acelerar los descubrimientos

En el mundo cada vez más conectado de la investigación científica, los descubrimientos se realizan integrando datos entre disciplinas y modelando sus relaciones. Sin embargo, la aplicación de la inteligencia artificial a los problemas químicos sigue planteando retos que van desde la representación de los datos hasta la selección de modelos. Estas dos charlas muestran las formas en que los investigadores han superado estos retos para obtener conocimientos útiles para las aplicaciones en el campo de la química. Al ofrecer una visión general de la inteligencia artificial en química y presentar un estudio que destaca los Gráficos de Conocimiento aplicados a la reutilización de fármacos, pretendemos inspirar a los científicos para que busquen conexiones dentro de sus datos y en el panorama de la investigación en general.



RETOS EN ANÁLISIS CROMATOGRÁFICOS DE BIOMOLÉCULAS.

Alicia Guadalupe Soto Ramos

Los retos actuales de análisis de biomoléculas han impactado en los flujos de trabajo de manera considerable durante la optimización de recursos, de tal forma que abren un nuevo panorama en el análisis por HPLC para resolver las siguientes necesidades:

- Mayor reto y complejidad de nuevas moléculas biológicas tamaño/forma que moléculas pequeñas
- Interacción superficial no específica
- Inestabilidad intrínseca durante pretratamiento de muestra y en solución
- pH/pI, T, fuerza iónica, constante dieléctrica, fenómenos de agregación
- Baja productividad, baja resolución y alta asimetría de pico
- Equipo de HPLC de 316L SS con problemas de corrosión a pH extremos
- Proceso cromatográfico de separación desnaturizante disolvente orgánico “RP”
- Actividad biológica y estado nativo en función (estructura terciaria y cuaternaria)
- Pasivación de HPLC para aplicaciones BIO

Por ello, la importancia en conocer las nuevas soluciones de Agilent sistemas BIO para resolver estas necesidades llevándole a un nuevo nivel de confianza. El sistema de suministro de disolventes de titanio resistente a la corrosión y la trayectoria de flujo de muestras sin interacción con metales garantizan la integridad total de las biomoléculas en todas sus aplicaciones. Además, la última tecnología le brinda la capacidad de aumentar su eficiencia, todos los días, en todos los sentidos.

Por último, no menos importante, el sistema no sólo se puede utilizar para bioanálisis. También es muy adecuado para hacer bioseparación de hasta 10 ml/min en combinación con el colector de fracción bioinerte. En esta plática revisaremos algunas notas de aplicación como ejemplo de esta solución.



34°

CLAQ

20
20

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA
CARTAGENA DE INDIAS - COLOMBIA



COMUNICACIONES ORALES CLAQ



ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

ILFCL-252

IMPROVING ALL PEOPLE'S LIVES THROUGH THE TRANSFORMING POWER OF CHEMISTRY OUTREACH

Raines, L. ¹Horwitz, D. ¹Galvan, P. ¹Garrison, L.^{1,2}
1. American Chemical Society, Education Division
2. American Chemical Society, Membership Division

KEYWORDS: outreach informal science education

INTRODUCTION

Although the reasons vary between nations, the need for non-scientists to have a better understanding and more positive relationship to chemistry is global. The vision of the American Chemical Society is to improve all people's lives through the transforming power of chemistry, and many volunteers do this through science outreach.

METHODS

Evidence suggests hands-on engagement improves student and adult attitudes towards chemistry, direct interaction with scientists can encourage students to see themselves as scientists, and that participation in informal education opportunities can help children who are not part of their dominant local culture or with lower socioeconomic status to succeed academically.

RESULTS AND CONCLUSIONS

Resources for all that capitalize on volunteer experiences and published research will be discussed. Programs to be addressed include the Chemistry Festival Program, Outreach Training Program, Chemists Celebrate Earth Week, and more. Future directions and calls for volunteers will conclude the presentation.

FINANCIAL SUPPORT

The American Chemical Society and other donors sponsor these programs as part of a commitment to encourage excellence in education.

REFERENCES

National Research Council. 2009. Learning Science in Informal Environments: People, Places, and Pursuits. Washington, DC: The National Academies Press. <https://doi.org/10.17226/12190>.

3M, 2019. 2019 State of Science Index. https://www.3m.com/3M/en_US/state-of-science-index-survey/2019-summary/



CUESTIONES SOCIO-CIENTÍFICAS: POSIBILIDADES PARA ENSEÑAR CIENCIAS EN LA ESCUELA PRIMARIA

Jorge Cardoso Messeder, Ana Rita Goncalves Ribeiro de Mello, Caio Vitor Ferreira, Marcelo Augusto dos Santos

Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro

jorge.messeder@ifrj.edu.br

PALABRAS CLAVES: Cuestiones Sociocientíficas; enseñanza fundamental

INTRODUCCIÓN

El protagonismo infantil de las narrativas a las prácticas acerca de cuestiones que involucran las relaciones CTS (Ciencia-Tecnología-Sociedad) es el objeto de análisis del estudio que viene siendo realizado. Las prácticas reflexivas exigen el ejercicio del saber y del poder hablar, expresar sentimientos, convenciones o incertidumbres vivenciadas.

MÉTODOS

La intervención, de carácter investigativo, fue desarrollada por dos becarios del curso de Licenciatura en Química de un Instituto Federal, fomentado por el Programa Institucional de Becas de Iniciación Científica (PIBIC) en conjunto con la profesora regente de la clase y participante del proyecto.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Las actividades fueron importantes para un aprendizaje más significativo, habiendo una aceptación, interacción y motivación entre los iguales debido a la intervención insólita. Se hace necesario el fomento en más estudios enfocados en los primeros años de escolarización del niño, sea en la educación infantil o enseñanza fundamental, construyendo así una cultura científica en la enseñanza fundamental. Las actividades desarrolladas en esta experiencia en el aula refleja el objetivo central del enfoque CTS en la enseñanza que es la proposición para el cambio de pensamiento y posterior cambio de actitudes relacionadas a las elecciones que se hacen en la sociedad. Los resultados de la investigación, que está en continuidad, proporcionan un desarrollo pedagógico de estos futuros profesores, con la inserción de la práctica curricular en química en la enseñanza fundamental.

INSTITUCIONES FINANCIADORAS

Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq); Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Rio de Janeiro (IFRJ).

REFERENCIAS

FIRME, R. N.; TEIXEIRA, F. M. O discurso argumentativo de uma professora de Química na vivência de uma abordagem CTS em sua sala de aula. In: SANTOS, W. P.; AULER, D. CTS e educação científica: desafios, tendências e resultados de pesquisas. Brasília: Universidade de Brasília. 2011.

MALDANER, O. A. A formação inicial e continuada de professores de química. Ijuí: Unijuí. 2013.

OLIVEIRA, D. A. A. S., MESSEDER, J. C. Da narrativa literária à produção textual coletiva: remontando temas químicos no Ensino Fundamental. Revista Thema, 2017, 14(2), 1-14.



CASOS DE ESTUDIOS DE CRISTALOGRAFÍA A NIVEL PRE-DOCTORAL: UNA ACTUALIZACIÓN

Peter J. Rosado Flores, Luke Czerwonka .

Georgia College and State University

peter.rosadoflores@gcsu.edu

PALABRAS CLAVES: Cristalografía, subgraduados, pre-doctorales, educación

INTRODUCCIÓN:

Métodos costo efectivos para la enseñanza de la cristalografía a nivel pre-doctoral son necesarios. Los instrumentos de cristalografía pueden ser costosos. Por ende, el propósito del proyecto es actualizar el trabajo previamente publicado sobre la enseñanza de la cristalografía inorgánica a nivel pre-doctoral. Así se reportan aquí métodos más accesibles.

MÉTODOS:

Se crearon en este trabajo varios casos de estudio, los cuales se distribuyeron en clases de 10-20 estudiantes de química inorgánica avanzada. Luego de esto, se midió su nivel de entendimiento con un censo anónimo y un examen post-contenido.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

Los estudiantes fueron evaluados con una rúbrica de 4 pts. La rúbrica fue diseñada para evaluar conocimiento previo y conocimiento post-actividad/contenido. La mayoría de los estudiantes obtuvieron calificaciones mayores de 75% (de 100%). Esto fue de esperar reconociendo los resultados del censo pre-contenido (casi ninguno de los estudiantes poseía conocimiento previo de la cristalografía). Se esperó también que hubiese una ganancia en entendimiento, lo que se evidencia con esta cifra. Se concluye entonces que la enseñanza de la cristalografía no tiene que ser limitada a instrumentos, un poco de creatividad ayuda al caso.

REFERENCIAS

1. Campbell, M. G.; Powers, T. M.; Zheng, S.-L., Teaching with the Case Study Method To Promote Active Learning in a Small Molecule Crystallography Course for Chemistry Students. *Journal of Chemical Education* 2016, 93 (2), 270-274.
2. Szalay, P. S.; Zeller, M.; Hunter, A. D., The Incorporation of Single Crystal X-ray Diffraction into the Undergraduate Chemistry Curriculum Using Internet-Facilitated Remote Diffractometer Control. *Journal of Chemical Education* 2005, 82 (10), 1555.
3. Hoggard, P. E., Integrating Single Crystal X-Ray Diffraction in the Undergraduate Curriculum. *Journal of Chemical Education* 2002, 79 (4), 420.



EL APRENDIZAJE EFECTIVO DE BIOQUÍMICA EN CIENCIAS DE LA SALUD A TRAVÉS DE LA GAMIFICACIÓN CONCEPTUAL

Diana Alexandra Ospina Riaño

CIAF - CORPORACIÓN INSTITUTO DE ADMINISTRACIÓN Y FINANZAS - CIAF PEREIRA, RISARALDA

alexaospina04@hotmail.com

PALABRAS CLAVES: Rutas Bioquímicas, aprendizaje, gamificación.

INTRODUCCIÓN

La comprensión del conocimiento bioquímico en áreas de la salud es muy importante. Sin embargo, en los últimos años se ha convertido en la razón principal de deserción académica. Por eso, es necesario favorecer el aprendizaje significativo de contenidos que hasta el momento han sido presentados únicamente de forma teórica.

MÉTODOS

- Análisis cualitativo a través de:
 1. Observación directa.
 2. Investigación de grupos focales.
 3. Gamificación de contenidos.
- Análisis cuantitativo de pruebas de conocimiento y estándares de evaluación para materiales educativos.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

1. Los estudiantes lograron obtener resultados en sus evaluaciones muy superiores a los obtenidos previamente en periodos académicos anteriores a la ejecución del ejercicio de gamificación.
2. Se trabajaron de manera efectiva artículos científicos de revistas internacionales que previamente no habían sido comprendidos por los estudiantes.
3. Gracias a la metodología utilizada en este trabajo, el 98% del grupo consiguió la aprobación de la asignatura.
4. Se alcanzó asistencia total al 89% de las clases de Bioquímica durante un periodo académico favoreciendo la actitud dinámica y propositiva hacia la clase.
5. Se generaron productos, emprendimientos bioquímicos y evidencias de trabajo de primera calidad, editados y mejorados por los estudiantes (concurso de CINE Bioquímico y SHARK TANK Bioquímico).

REFERENCIAS

1. Andrew, A (1977) "How to buy productive focus group research" Advertising Age, 146-148.
2. Greenbaum T. The handbook for the focus group. USA: Sage Publications; 2001.
3. González R. Investigación cualitativa y subjetividad. Los procesos de construcción de la información. México: McGraw Hill; 2007. p. 1-20.
4. Hamui-Sutton A, Varela-Ruiz M., "La técnica de grupos focales", México D.F., México: Rev Investigación en educación médica, 2013, Vol. 2. Núm. 5. p. 55-60.



DIDÁCTICA E HISTORIA DE LA QUÍMICA: UN PUNTO DE ENCUENTRO DESDE UN ANÁLISIS ICONOGRÁFICO DE LA FILATELIA

Marlon Martínez-Reina, Ingrid Guzmán-Beltrán

Universidad Santiago de Cali

marlon.martinez01@usc.edu.co

PALABRAS CLAVE: Química, Didáctica, Filatelia, Iconografía

INTRODUCCIÓN

La enseñanza de la química y la historia y filosofía de la química son dos campos de investigación consolidados en la didáctica de las ciencias naturales. En este trabajo, se propone la filatelia como fuente histórica e iconográfica para la enseñanza de la historia de la química.

MÉTODOS

El Estudio realizado es de tipo cualitativo, una revisión documental, descriptiva-explicativa, que sigue una metodología heurística-hermenéutica. Desde el universo de estudio (sellos europeos; 1840-2020), se define un universo homogéneo y una unidad de análisis, que sea representativa, y que aporte información relevante para documentar la historia de la química.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La metodología aplicada proporciona una estructura consistente para la selección de sellos postales que, como fuente histórica han permitido documentar una parte sustancial de la historia de la química. Las imágenes y los mensajes de los sellos, en especial, la filatelia conmemorativa, han permitido registrar los trabajos de científicos, que como: Demócrito, Paracelso, Boyle, Lavoisier, Marie Curie, entre muchos otros, han marcado un punto de inflexión en la química y su historia. El estudio de las fuentes históricas que aporta la filatelia, en este caso los sellos postales europeos, representa una contribución adicional a la investigación que se viene desarrollando en la historia de la química. Es necesario continuar fortaleciendo el valor de los sellos postales, como fuente histórica, y que puedan actuar como sustento y/o complemento de otras fuentes y métodos, para robustecer procesos de investigación y difusión, asociados con la historia y la enseñanza de la química.

REFERENCIAS

- Chenier, P. C. Postage stamp displays teach chemistry, *J. Chem. Educ.* 1986, 63(6), 498-500.
Pinto, G. Antonio de Ulloa and the Discovery of Platinum: An Opportunity to Connect Science and History through a Postage Stamp. *J. Chem. Educ.* 2017, 94(7), 970-975.
Rappoport, Z. Chemistry on stamps (chemophilately). *Accounts of Chemical Research*, 1992, 25(1), 24-31.



ACTIVIDADES PARA EL APRENDIZAJE ACTIVO EN CLASES DE BIOQUÍMICA PARA ESTUDIANTES DE PREGRADO EN BIOLOGÍA

Geovanna Tafurt-García

Escuela de Pregrados, Sede de la Paz, Universidad Nacional de Colombia, km 9, vía La Paz, Cesar, Colombia.

gtafurg@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Bioquímica, Biología, Diseño Aprendizaje

INTRODUCCIÓN

A continuación, se describe la experiencia resultante en clases de bioquímica con estudiantes de Biología, ejecutadas durante el primer semestre de 2021, en el marco del “Laboratorio de Innovación Pedagógica”, de la Sede de La Paz, de la Universidad Nacional de Colombia, cuyo objetivo es propiciar una Comunidad de Aprendizaje.

MÉTODOS

Se contemplaron los siguientes ejes articuladores: (i). Biomoléculas; (ii). Metabolismo; (iii). Equilibrio y Energía; y (iv). Ácidos Nucleicos. La introducción a cada eje fue realizada por los estudiantes; para ello, utilizaron preguntas orientadoras sugeridas por el docente a cargo; a modo de retroalimentación, los docentes aclararon conceptos de fundamentación concernientes.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En conclusión, en relación con la práctica académica tradicional, durante este periodo, las y los estudiantes tuvieron un mayor porcentaje de participación en las actividades planteadas, así como un menor porcentaje de pérdida de la asignatura. Prácticas como: concursos, juegos y montaje de historietas/comics, permitieron motivar la creatividad y la capacidad de síntesis y pensamiento lógico, a través de la selección de temas clave y/o prioritarios, organizados de forma coherente y cohesiva (poniendo en práctica las competencias adquiridas durante el Año de Estudios Generales). La información encontrada en organismos biológicos diferentes al ser humano, les permitió establecer analogías, generalidades o particularidades. En adición, las y los estudiantes verificarán la importancia del aprendizaje logrado, aplicándolo en la solución de problemáticas regionales (biorremediación, biocombustibles o nutraceuticos); particularmente, en el entendimiento del modo de acción del organismo, y en los procesos o métodos asociados al montaje del proceso a escala de laboratorio.

INSTITUCIONES FINANCIADORAS

Universidad Nacional de Colombia, Sede de La Paz

REFERENCIAS

1. Angela C. M. Figueira, and Joao B. T. Rocha. A proposal for teaching undergraduate chemistry students carbohydrate biochemistry by problem-based learning activities. *Biochem Mol Biol Educ.* 2014, 42, 1, 81-87. doi: 10.1002/bmb.20745. Epub 2013 Nov 22.
2. Chapel D. Cowden, and Manuel F. Santiago. Interdisciplinary Explorations: Promoting Critical Thinking via Problem-Based Learning in an Advanced Biochemistry Class. *J. Chem. Educ.* 2016, 93, 3, 464-469. <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.5b00378>.
3. Richard F. Dods. A Problem-Based Learning Design for Teaching Biochemistry. *J. Chem. Educ.*, 1996, 73, 3, 225-228. <https://doi.org/10.1021/ed073p225>.



TENDENCIAS DE EDUCACIÓN EN CIENCIAS COMO CONSECUENCIA DEL COVID-19: INDICIOS A PARTIR DE UNA REVISIÓN DOCUMENTAL

Alexander Cárdenas Acero, Liliam Alexandra Palomeque Forero, Juliana Cañón Farieta, Julián David Ocampo Guzmán,
Daniel Esteban Jiménez Correa.

Universidad Nacional de Colombia

*alecardenasace@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Educación, COVID-19, Universidad, Ciencias

Introducción

El COVID-19 trajo consigo la necesidad de repensar el proceso de enseñanza- aprendizaje de la ciencia a nivel universitario desde la virtualidad [1]. Dicha transición implicó un cambio sustancial, que se pertinente conocer las tendencias en educación en ciencias, a este nivel, surgidas a raíz de la pandemia.

Métodos

El presente trabajo es una investigación descriptiva documental [2] centrada en la búsqueda, sistematización y análisis de 168 documentos electrónicos, publicados entre 2020 y 2021, relacionados con esta temática. Para ello, se revisaron ocho bases de datos utilizando la combinación de diversos criterios de búsqueda (i.e. “COVID-19”, “Science”, “Education”, “Higher-Education”).

Resultados y conclusiones

Se encontró que los artículos revisados responden a cinco categorías relacionadas con el tema planteado (Recursos Digitales, Evaluación, Perspectiva Institucional -en términos de estudiantes, profesores y universidades-, Estrategias Didácticas y Retos y Desafíos). El 38% de los documentos analizados responde a la cuarta categoría, en donde la discusión está centrada en el desarrollo de metodologías de aprendizaje activo y participativo durante la virtualidad. Cabe decir que, en cuanto a la Educación en Química (área de trabajo de los autores del presente trabajo), la base de datos de la American Chemical Society (ACS) representa un 30% de los artículos revisados. Se observa así una preocupación por la enseñanza de la química en términos de uso de plataformas digitales, implementación de software especializado para el trabajo experimental, renovación de las metodologías de evaluación y uso de recursos digitales para responder al proceso de enseñanza- aprendizaje a nivel universitario a causa de la virtualidad.

Referencias

- [1] Neuwirth, L. S. Reimagining higher education during and post-COVID-19: Challenges and opportunities. *J. Adul. Contin. Educ.* 2020, 0, 1-16.
- [2] Merino-Trujillo, A. Como escribir documentos científicos (Parte 3). Artículo de revisión. *Rev. Salud Tab.* 2011, 17, 36-40.
- [3] Institute of Education Sciences. ERIC (Education Resources Information Center). 1966. [Base de Datos]. URL: <https://eric.ed.gov/>



FISICOQUÍMICA

ILBCL-112

SYNTHESIS OF $ZnTiO_3/TiO_2$ NANOCOMPOSITE SUPPORTING IN ECUADORIAN CLAYS FOR THE ADSORPTION AND PHOTOCATALYTIC DEGRADATION OF METHYLENE BLUE

Ximena Jaramillo-Fierro¹, Silvia González¹, Hipatia Jaramillo¹, Francisc Medina².

¹ Universidad Técnica Particular de Loja

² Universitat Rovira i Virgili

PALABRAS CLAVES: $ZnTiO_3-TiO_2$; Photocatalysis; Adsorption; Methylene-blue

INTRODUCCIÓN

The presence of dyes in wastewater has a potentially dangerous impact. There are several effective technological processes to remove dyes from water, such as: photocatalysis and adsorption. This study reports the synthesis of $ZnTiO_3/TiO_2$ supported in Ecuadorian clays, for the adsorption and photocatalytic degradation of methylene blue in aqueous effluents.

MÉTODOS

$ZnTiO_3/TiO_2$ was synthesized by the sol-gel procedure. The photocatalytic adsorption and degradation of methylene blue were determined by decolorization of the dye by UV-Visible spectrophotometry. The synthesized composites were characterized by X-ray diffractometry (XRD), X-ray fluorescence (XRF), diffuse reflectance spectroscopy (DRS), and scanning electron microscopy (SEM) techniques.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

The photocatalytic materials were tested for the removal of methylene blue and as a result, it was obtained that $ZnTiO_3/TiO_2$ had a better activity than TiO_2-a . Twelve Ecuadorian clays were characterized, some of them with exploitation potential and utility in the preparation of new materials. The photocatalysts were impregnated into the clays and their photocatalytic activity and their adsorption capacity were evaluated. Clay12 impregnated with TiO_2-a showed the best photocatalytic activity. The X-ray fluorescence results showed that the Clay12 has TiO_2 and Fe_2O_3 in its composition, which could improve its activity. Clay6 had the best methylene blue adsorption capacity. The results of the X-ray diffraction allowed us to conclude that the presence of metahallosite phase improves the adsorption capacity. In addition, Clay6 has oxides with exchange cations that could improve its adsorption capacity. Thus, both clays can be used as inexpensive materials for the removal of cationic dyes from wastewater.

THE OLIGOMER APPROACH: AN EFFECTIVE STRATEGY TO ASSESS PHENYLENE VINYLENE SYSTEMS AS ORGANIC HETEROGENEOUS PHOTOCATALYSTS

Mauricio Acelas¹, Leon Perez¹ and César A. Sierra¹

¹. Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia

PALABRAS CLAVES : PhenyleneVinylene Photocatalysts OligomerApproach Contaminants

INTRODUCCIÓN

Organic dyes and emerging pollutants, make up much of the industrial wastewater in our world. Due to its toxicity and high impact on aquatic environments, its elimination or degradation has become one of the scientific community's main concerns. Here, we examine the photostability, and the photocatalytic performance of OPV systems. Furthermore, radical oxygen species and their role in the degradation mechanism are discussed as the basis for developing new heterogeneous materials based on photostable poly-PV. Organic dyes and emerging pollutants, among others, make up much of the industrial wastewater in our world today. Due to its toxicity and high impact on aquatic environments, its elimination or degradation has become one of the scientific community's main concerns. In this work, we examine the synthesis, optoelectronic properties, photostability, and the heterogeneous photocatalytic performance of OPV systems to treat aqueous systems. Furthermore, radical oxygen species and their role in the degradation mechanism are discussed as the basis for developing new heterogeneous materials based on photostable poly-PV.

MÉTODOS

Various strategies have been explored to address this problem, including physical processes such as low-cost natural material-based adsorption, biological, electrochemical, and advanced oxidation processes. Of all these treatment options, photocatalytic degradation has emerged as the choice method for the environmental remediation of organic pollutants due to low-cost scale-up at the industrial level. The photocatalysts were prepared by the wet impregnation method by dissolving 5 mg of the corresponding OPV. Then, silica gel was added, and the IC degradation reactions were performed on an LED-based panel type photoreactor equipped with a 3W LED array as irradiation source within the UVA and visible light.

Therefore, phenylenevinylenes (PV) are presented as possible heterogeneous organic photocatalysts for the degradation of pollutants in aqueous media, taking into account that they are electronically conjugated systems, which also serve as promising molecular models for heterogeneous photocatalysis. Consequently, the oligomer approach is presented as a valuable and agile tactic to carry out an extensive characterization -including optoelectronics-, predict reactivity and provide essential information to understand the photocatalytic degradation process in Oligo-phenylenevinylenes (OPVs), as a model. π -conjugated systems can be easily prepared by the Mizoroki-Heck reaction in a highly stereoselective manner. The structural and chemical diversity around the conjugated scaffold offers a wide range of controllable properties for photocatalytic and light-absorbing applications. Although, oligomers are challenging models for heterogeneous photocatalysis due to their photostability problems.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

In this work we examine the synthesis, optoelectronic properties, photostability and the heterogeneous photocatalytic performance of OPV systems for the treatment of aqueous systems. Furthermore, radical oxygen species and their role in the degradation mechanism are discussed as the basis for the future development of new heterogeneous materials based on photostable poly-PV.

FINANCIAL INSTITUTIONS

MInCiencias, DAAD-Alemania y la Universidad Nacional de Colombia.

REFERENCES

- Cárdenas, J. C.; Ochoa-Puentes, C.; Sierra, C. A. In *Conducting Polymers*; 2016; p Ch. <https://doi.org/10.5772/63394>.
Cárdenas, J. C.; Ochoa-Puentes, C.; Gutiérrez-Puebla, E.; Sierra, C. A. *Synth. Met.* 2016, 215, 194–199. <https://doi.org/10.1016/j.synthmet.2016.02.021>.
Estrada, S. E.; Ochoa-Puentes, C.; Sierra, C. A. *J. Mol. Struct.* 2017, 1133, 448–457. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2016.12.032>.
Estrada-Flórez, S. E.; Moncada, F. S.; Lanterna, A. E.; Sierra, C. A.; Scaiano, J. C. *J. Phys. Chem. A* 2019, 123 (30), 6496–6505. <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.9b04492>.
Acelas, M.; Sierra, A. F.; Sierra, C. A. *Synth. Commun.* 2020, 50, 1335–1352. <https://doi.org/10.1080/00397911.2020.1731828>.



EXPLORING THE ROLE OF CAROTENOIDS IN THE SUSCEPTIBILITY OF STAPHYLOCOCCUS AUREUS TO THE EXPOSURE OF COLD ATMOSPHERIC PLASMA AND REACTIVE OXYGEN AND NITROGEN SPECIES

Gerson-Dirceu López,^{1,2,3} Chiara Carazzone¹, Joseph Lorentz³, Chad Leidy²

gd.lopez@uniandes.edu.co

1. Laboratory of Advanced Analytical Techniques in Natural Products (LATNAP), Chemistry Department, Universidad de los Andes, Bogotá D.C., Colombia.
2. Laboratory of Biophysics, Physics Department, Universidad de los Andes, Bogotá D.C., Colombia
3. Membrane Biochemistry & Biophysics, Bijvoet Center for Biomolecular Research, Utrecht University, Utrecht, Netherlands

KEY-WORDS: Staphylococcus aureus, Cold atmospheric plasma, Staphyloxanthin, Changes by oxidation

INTRODUCTION:

Cold atmospheric plasma (CAP) is employed in the treatment of topical infections by delivering antibacterial species such as reactive oxygen and nitrogen species (RONS), electrons and positively charged vector while preserving host tissue. Hence, we investigate how Staphyloxanthin from *S. aureus* provides protection towards the CAP and RONS activity.

METHODS:

Strains were grown in LB media, centrifuged and resuspended in PBS solution and exposed to CAP treatment. Changes by oxidation of Staphyloxanthin (STX) with CAP were evaluated by LC-MS, Atomic Force Microscopy (AFM), Serial dilutions in agar plates, membrane permeation by measuring changes in potassium concentration by AAS.

RESULTS AND CONCLUSIONS:

The role of carotenoids in the survival of *S. aureus* exposed to CAP was determinate. The results indicated that *S. aureus* carotenoids protect cell membrane integrity during treatment with CAP. LC-MS and AFM analysis allowed to identify lipid oxidation products derived from carotenoids after treatment of *S. aureus* with RONS and CAP in the native and carotenoid biosynthesis route knockout strains. Also, differences in survival rates for *S. aureus* when exposed to CAP between the native and knockout strains determined that carotenoid production influences the bacteria protection. Whereas results of the membrane permeabilization by ASS present low levels of K release in strains with high levels of STX (native strains). In conclusion, high concentrations of STX in *S. aureus* may be related to resistance to treatment with CAP treatment and RONS.

REFERENCES

- [1] Von Woedtke, T.; Metelmann, H.R.; Weltmann, K.D. Clinical Plasma Medicine: State and Perspectives of in Vivo Application of Cold Atmospheric Plasma. *Contrib. to Plasma Phys.* 2014, 54, 104–117.
- [2] Yang, Y.; Wang, H.; Zhou, H.; Hu, Z.; Rao, Y.; Peng, H.; Hu, Q.; Zhang, R. Protective Effect of the Golden Staphyloxanthin Biosynthesis Pathway on *Staphylococcus aureus* under Cold Atmospheric Plasma Treatment. *Appl. Environ. Microbiol.* 2020, 86, (3), e01998-19.
- [3] López, G.-D.; Suesca, E.; Álvarez-Rivera, G.; Rosato, A.; Ibañez, E.; Cifuentes, A.; Leidy, C.; Carazzone, C. Carotenogenesis of *Staphylococcus aureus*: new insights and impact on membrane biophysical properties. *bioRxiv* 2020.07.19.210609. Ministerio de Ciencia Tecnología e Innovación (MinCiencias) by Grant 120480763040, RC 846-2018 and Doctoral Fellowship to Gerson-Dirceu Lopez (Call No 785 -2017). Also, Faculty of Science of Universidad de los Andes.

FINANCING INSTITUTIONS

Ministerio de Ciencia Tecnología e Innovación (MinCiencias) by Grant 120480763040, RC 846-2018 and Doctoral Fellowship to Gerson-Dirceu Lopez (Call No 785 -2017). Also, Faculty of Science of Universidad de los Andes.



EFFECTO DE LOS CAROTENOIDES EN EL COMPORTAMIENTO TERMOTRÓPICO DE MEMBRANAS REPRESENTATIVAS DE STAPHYLOCOCCUS AUREUS

Jessica Múnera-Jaramillo¹, Elizabeth Suesca², Gerson-Dirceu López², Małgorzata Jemioła Rzeminska^{3,4}, Kazimierz Strzałka^{3,4}, Chad Leidy², Marcela Manrique-Moreno¹.

¹Instituto de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia, Colombia
²Laboratorio de Biofísica, Departamento de Física, Universidad de los Andes, Colombia ³Faculty of Biochemistry, Biophysics and Biotechnology, Jagiellonian University, Polonia ⁴Malopolska Centre of Biotechnology, Jagiellonian University, Polonia

marcela.manrique@udea.edu.co

PALABRAS CLAVES: S.aureus, Carotenoides, DSC, FT-IR.

INTRODUCCIÓN:

El estudio de la membrana de *Staphylococcus aureus* constituye un tema de interés, debido a su potencial relación con los fenómenos de resistencia a antibióticos de uso clínico¹. El entendimiento de las propiedades biofísicas y termotrópicas de la membrana es fundamental para el diseño de nuevos fármacos contra infecciones bacterianas².

MÉTODOS:

Los carotenoides se extrajeron con MeOH:AcOEt:NaCl 1,7M (1:1:3)³, eliminando las proteínas con CHCl₃:MeOH (2:1). Se utilizaron liposomas constituidos de los principales lípidos de la bacteria en presencia de concentraciones variables de carotenoides. El estudio del efecto de los carotenoides en las membranas bacterianas se realizó por DSC y FT-IR.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

La caracterización del extracto carotenoide por LC-MS/MS evidenció la presencia de Staphyloxantin (STX) y 4,4'-Diaponeuroesporonic acid (4,4'-DNPA) como principales componentes. Primero se evaluó el efecto del extracto de carotenoides en los fosfolípidos individuales más abundantes de la membrana de *S. aureus* (fosfatidilglicerol y cardiolipina). Los resultados mostraron que concentraciones crecientes de los carotenoides en estos sistemas, desestabilizaron los liposomas, alterando la fluidez y la transición de fase de los lípidos individuales. Posteriormente, se prepararon liposomas constituidos de fosfatidilglicerol:cardiolipina (80:20), reflejando la composición de la membrana de la bacteria. La mezcla 80:20 presentó un comportamiento termotrópico diferente, y una menor susceptibilidad al efecto de los carotenoides, en comparación con los lípidos individuales.

INSTITUCIONES FINANCIADORAS:

Proyecto financiado por el Ministerio de Ciencia Tecnología e Innovación – MinCiencias (Cod. 120480763040, RC 846-2018).

REFERENCIAS

- [1] M.H. Talha, S.S. Khazaal, M.K. Al Hadraawy, S.K.S. Mostafavi, Screening of antibiotic resistance genes and virulence determinants of *Staphylococcus aureus* from skin infections, *Meta Gene* 24 (2020) 100682.
- [2] L. Hernández-Villa, M. Manrique-Moreno, C. Leidy, M. Jemioła-Rzeminska, C. Ortíz, K. Strzałka, Biophysical evaluation of cardiolipin content as a regulator of the membrane lytic effect of antimicrobial peptides, *Biophys. Chem.* 238 (2018) 8-15.
- [3] López, G.-D.; Suesca, E.; Álvarez-Rivera, G.; Rosato, A.; Ibañez, E.; Cifuentes, A.; Leidy, C.; Carazzone, C. Carotenogenesis of *Staphylococcus aureus*: new insights and impact on membrane biophysical properties. *bioRxiv* 2020.07.19.210609, doi:<https://doi.org/10.1101/2020.07.19.210609>.



EVALUACIÓN DE LA HIDROFOBICIDAD SUPERFICIAL DE LA CUTÍCULA DE LARVAS DE TERCER INSTAR DE *Diatraea saccharalis*, *Helicoverpa zea* Y *Chloridea virescens*

Diana Rocio Vasquez Carreño¹, Martha Isabel Gomez Alvarez², Diana Marcela Aragón Novoa¹

1. Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Bogotá, Colombia

2. Corporación Colombiana de Investigación Agropecuaria (AGROSAVIA), Sede Central, Km 14 vía Mosquera- Bogotá, Cundinamarca, Colombia

drvasquezc@unal.edu.co

PALABRAS CLAVES: Ángulo, Trabajo, Energía superficial.

INTRODUCCIÓN:

Los insectos lepidópteros son uno de los grupos más importantes de plagas de cultivos en América del Norte y del Sur. Estos son responsables de importantes daños económicos en caña de azúcar, tabaco, algodón, tomate y maíz. Siendo en la etapa de preformulación de bioplaguicidas importante caracterizar la superficie epicuticular.

MÉTODOS:

El ángulo de contacto fue medido usando el método de gota sésil y 5 líquidos de prueba. Los componentes polar y dispersivo fueron obtenidos de la pendiente e intercepto con los ángulos de contacto de los diferentes líquidos. El trabajo de adhesión se calculó según la ecuación de Young-Dupré.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

D. saccharalis presentó valores de ángulo de contacto de 68.46°, 66.88°, 83.49°, 76.24° y 54.95° para agua, EG, glicerol, FDE y DMS. Mientras que para las otras dos especies valores altos; para *H. zea*, 102.45°, 77.84°, 98.78°, 88.78° y 74.32°. En el caso de *C. virescens*, 96.13°, 83.75°, 104.41°, 75.60° y 60.05°. La mayor adhesión lo presentaron el agua y FDE, mientras que los líquidos DMS y el EG presentaron un mayor esparcimiento sobre la superficie de los 3 insectos. Siendo el glicerol el que menos esparcimiento presentó para *D. saccharalis* y el agua para *H. zea* y *C. virescens*.

La componente polar y dispersiva de la superficie larvaria fue de 34.52 y 2.90 mN/m para *D. saccharalis*; mientras que *H. zea* y *C. virescens* presentaron una mayor cantidad de componente dispersivo. En conclusión, *D. saccharalis* tiene características hidrofílicas mientras que *H. zea* y *C. virescens* tienen carácter hidrofóbico.

INSTITUCIONES FINANCIADORAS

Beca Doctorado Nacional 2015, Colciencias. Convocatoria conjunta de proyectos de investigación, desarrollo e innovación I+D+i del sector agropecuario, Agrosavia y Universidad Nacional de Colombia – 2020.

REFERENCIAS

- (1) Daquila, B. V., Scudeler, E. L., Dossi, F.C. A., Moreira, D. R., Pamphile, J. A., & Conte, H. Action of *Bacillus thuringiensis* (Bacillales: Bacillaceae) in the midgut of the sugarcane borer *Diatraea saccharalis* (Fabricius, 1794) (Lepidoptera: Crambidae). *Ecotoxicol. Environ. Saf.* 2019. 184, 109642.
- (2) Viteri, D.M; Sarmiento, L; Linares, A.M; Cabrera, I. Efficacy of biological control agents, synthetic insecticides, and their combinations to control tobacco budworm [*Heliothis virescens* (Lepidoptera: Noctuidae)] in pigeon pea. *Crop Prot.* 2019, 122, 175–179.
- (3) Baldan, A. Adhesion phenomena in bonded joints. *Inter. J Adhes Adhes.* 2012, 38, 95–116.



CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA DE CARBONES ACTIVADOS PREPARADOS A PARTIR DE CUESCO DE PALMA AFRICANA EN EL PROCESO DE ADSORCIÓN DE CO₂

Sergio Alberto Acevedo Corredor¹, Liliana Giraldo Gutiérrez², Juan Carlos Moreno- Pirajan².

1. Universidad Nacional de Colombia, 2. Universidad de los Andes

saacevedoc@unal.edu.co

PALABRAS CLAVES : Carbón activado, Adsorción CO₂

INTRODUCCIÓN

El acelerado crecimiento industrial ha generado en los últimos años graves problemas ambientales que son una amenaza para la sostenibilidad del planeta. Como una alternativa de solución, surgen los materiales porosos (CAs) que se utilizan en el campo de la adsorción a partir de residuos lignocelulósicos .

MÉTODOS

Impregnación y carbonización, isotermas adsorción N₂, Caracterización Química, determinación FTIR, determinación pHPZC, isotermas Adsorción CO₂ ; estas son las técnicas usadas con las que se caracterizaron las propiedades fisicoquímicas los materiales carbonosos preparados en esta investigación a partir de residuos lignocelulósicos Cuesco de Palma Africana con la finalidad de capturar CO₂.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se obtuvieron carbones activados por activación química del Cuesco de Palma Africana presentando diferentes características texturales áreas superficiales BET entre 120-1400 m² g⁻¹, y volúmenes de poros estrechos (V_n) que oscilan entre 0,34-0,53 cm³ g⁻¹; se establece que la capacidad de adsorción de CO₂ en los carbones activados se relaciona con la presencia de microporosidad estrecha y con el área superficial de la red porosa formada. La formación de mesoporosidad favorece la difusión del gas hacia los microporos para la adsorción de CO₂ . Estos materiales serían de utilidad para procesos postcombustión en la captura de este contaminante atmosférico. se observa que los sólidos presentan una capacidad de adsorción entre 173 y 218 mg g⁻¹ de acuerdo con estos valores, dichos carbones activados poseen una proporción elevada de microporos efectivos para la adsorción de CO₂ que explica las cantidades de este gas adsorbidas.

INSTITUCIONES FINANCIADORAS

Fondo Nacional de Financiamiento para la Ciencia, Tecnología e Innovación "FRANCISCO JOSÉ DE CALDAS", a través de la convocatoria 848 Programa de Estancias Posdoctorales 2019 del Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación (Minciencias - Colombia).

Referencias

- [1]. Meihong, W.; Atuman, J.; Colin, R.; Dag, E.; Nuhu, M. Process intensification for post-combustion CO₂ capture with chemical absorption: A critical review, *Applied Energy*, 2015. 158 275–291.
- [2]. Jarosław, S.; Mohammed, O.; Cruz, O.; Srensek-Nazzal, J. Preparation of low-cost activated carbons from amazonian nutshells for CO₂ storage, *Biomass and Bioenergy*, 2020, 144 105925
- [3]. Thommes, M.; Kaneko, K.; Neimark, A. V.; Olivier, J. P.; Rodriguez-Reinoso, F.; Rouquerol, J.; Sing, K. S. W. Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report). *Pure Appl. Chem*, 2015, 87, 9-19



ESTUDIO TERMODINÁMICO DE LA SOLUBILIDAD DE LA SULFAMETAZINA EN MEZCLAS COSOLVENTES ETILENGLICOL+AGUA A DIFERENTES TEMPERATURAS.

Daniel Ricardo Delgado¹, Claudia Patricia Ortiz².

1. Universidad Cooperativa de Colombia, 2. Corporación Universitaria Minuto de Dios (UNIMINUTO)

danielr.delgado@campusucc.edu.co

PALABRAS CLAVES: Sulfametazina, Solubilidad, Solvatación preferencia

INTRODUCCIÓN

La sulfametazina, es un antimicrobiano, utilizado en terapia humana y animal por su amplio espectro bacteriano. Su uso masivo, la ha convertido en un contaminante emergente, lo que ha llevado a desarrollar estudios que permitan un desarrollo de procesos industriales eficientes además de información para el tratamiento de este contaminante.

MÉTODOS

Preparación de mezclas de disolventes: Las mezclas de solventes {EG (1) + agua (2)} fueron preparadas por masa en cantidades de 20,00 g, utilizando una balanza analítica. Determinación de solubilidad: Se implementó el método de agitación de frasco de Higuchi Connors. La determinación de solubilidad se realizó mediante espectrofotometría UV/vis

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se determinó la solubilidad de SMT en mezclas EG+W a 9 temperaturas. De acuerdo a los resultados, el proceso es dependiente de la polaridad del solvente. De acuerdo a las funciones termodinámicas de la solución de la SMT, la energía de Gibbs es positiva en todos los casos, disminuyendo de agua al EG puro, debido al efecto codisolvente positivo de EG sobre la solubilidad de SMT. En cuanto a la entalpía estándar de solución, es positiva en todos los casos indicando un proceso endotérmico.

La SMT es solvatada preferentemente por agua desde agua hasta $x_1=0.20$, esto se debe posiblemente a la estructuración del agua alrededor de los grupos no polares de la SMT, desde $x_1=0,20$ a EG, se presenta una solvatación de la SMT por el EG.

CONCLUSIONES: La solubilidad de SMT es un proceso endotérmico, fuertemente influenciado por la polaridad del sistema codisolvente.

REFERENCIAS

1. L.H. Sophian, D.L. Piper, G.H. Schneller. The Sulfapyrimidines: sulfadiazine, sulfamerazine, sulfamethazine. Literary Licens. (2012)
2. J.H. Blanco-Márquez, D.I. Caviedes Rubio, C.P. Ortiz, N.E. Cerquera, F. Martínez, D.R Delgado Thermodynamic analysis and preferential solvation of sulfamethazine in acetonitrile + water cosolvent mixtures. Fluid Phase Equilib, 505 (2020), Article 112361
3. A. Barton. CRC handbook of solubility parameters and other cohesion parameters (2nd), CRC Press LLC, Boca Raton (FL) (1991)
4. Y. Marcus. On the preferential solvation of drugs and PAHs in binary solvent mixtures. J Mol Liq, 140 (2008), pp. 61-67



PETROQUÍMICA Y GEOQUÍMICA

SLLCL-51

CUANTIFICACIÓN ELEMENTAL EN MINERALES A PARTIR DEL TRATAMIENTO DE ESPECTROS EDS, UTILIZANDO EL MICROSCOPIO ELECTRÓNICO DE BARRIDO-SEM DEL SERVICIO GEOLÓGICO COLOMBIANO

David Andrei Contreras Fayad,^{1*} Carolina Jiménez Triana,¹ Mary Luz Peña Urueña.¹
¹Dirección de Asuntos Nucleares, Servicio Geológico Colombiano, Bogotá D.C., Colombia.

dcontrerasf@sgc.gov.co

PALABRAS CLAVE: Análisis cuantitativo, EDS-SEM, Química mineral, DTSA II

INTRODUCCIÓN

La cuantificación composicional en minerales usualmente se realiza por medio del EPMA, donde se determinan elementos mayores, menores y trazas para establecer condiciones termodinámicas de formación. SEM originalmente diseñado para adquisición de imágenes, que para análisis cuantitativos, comúnmente tiene un detector EDS acoplado que permite adquisición de análisis composicionales semicuantitativos.

MÉTODOS

Se utilizó un equipo JEOL JSM-IT300LV y un EDS Oxford Instruments 51-XXM 1181, las condiciones analíticas fueron: 20 Kv, P.C. 48, WD 10 mm, el procesamiento de los datos se realizó con el software libre DTSA-II, para simular y cuantificar las mediciones EDS, además de compararlos directamente con los espectros medidos.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se obtuvieron espectros EDS de 2 materiales de referencia (Wollastonita - CaSiO_3 y Ortoclasa - KAlSi_3O_8), los cuales poseen la composición necesaria para cuantificar una Jadeíta $\text{NaAlSi}_2\text{O}_6$, Inosilicato del grupo de los Piroxenos. Al realizar el tratamiento de los espectros adquiridos del mineral con los espectros de los materiales de referencia, los resultados obtenidos fueron los siguientes:

JADEITA									
Element	EDS			WDS	Element	EDS			WDS
	Line Type	k Ratio	Wt%	Wt%		Line Type	k Ratio	Wt%	Wt%
O			47.49	47.39	Si	K series	0.63670	27.88	27.40
Na	K series	0.17127	10.83	11.18	Ca	K series	0.01967	0.63	0.38
Al	K series	0.29751	13.16	13.65	Total:			100.00	100.00

Los análisis EDS - SEM han alcanzado un nivel de rendimiento que desafía al WDS de la microsonda electrónica-EPMA, sin embargo, para obtener resultados confiables y comparables con los resultados WDS, se deben tener en cuenta las siguientes condiciones analíticas: Los espectros de los materiales, tanto estándar como muestra mineral, se deben obtener con el mismo detector, posición del detector, distancia de trabajo, resolución y calibración del equipo, para minimizar cualquier error, además se debe garantizar que todos los materiales se encuentren pulidos adecuadamente, ya que cualquier error en la geometría puede alterar los resultados, finalmente, realizar la medición del k-ratio.

REFERENCIAS

- [1] Ritchie, N. W. M.; Newbury, D. E.; Davis, J. M. EDS Measurements of X-Ray Intensity at WDS Precision and Accuracy Using a Silicon Drift Detector. *Microsc. Microanal.* 2012, 18 (4), 892–904. <https://doi.org/10.1017/S1431927612001109>.
- [2] Newbury, D. E.; Ritchie, N. W. M. Performing Elemental Microanalysis with High Accuracy and High Precision by Scanning Electron Microscopy/Silicon Drift Detector Energy-Dispersive X-Ray Spectrometry (SEM/SDD-EDS). *J. Mater. Sci.* 2014, 50 (2), 493–518. <https://doi.org/10.1007/S10853-014-8685-2>.
- [3] Goldstein, J. I.; Newbury, D. E.; Michael, J. R.; Ritchie, N. W. M.; Scott, J. H. J.; Joy, D. C. *Microscopy and X-Ray Microanalysis*.



DETERMINACIÓN DE LA EDAD RELATIVA DE ROCAS CALCÁREAS POR MEDIO DE LAS RELACIONES ISOTÓPICAS DE $\Delta^{13}\text{C}$ Y $\Delta^{18}\text{O}$ EN CARBONATOS DE LA SERRANÍA DEL PERIJÁ

Andrea Rocha Abella,¹ Mary Luz Peña,¹ Alejandro Piraquive,¹ Maribel Moreno.¹

¹Dirección de Asuntos Nucleares, Servicio Geológico Colombiano, Carrera 50 # 26-20, Bogotá, Colombia
*aerocha@sgc.gov.co

PALABRAS CLAVE: Isotopía, carbonatos, paleotemperatura, datación

INTRODUCCIÓN

Este estudio analiza $\delta^{13}\text{C}$ y $\delta^{18}\text{O}$ en carbonatos de la Formación Palmarito (Serranía del Perijá) de edad Pérmica (ca. 270 Ma), conformada por una sucesión de rocas calcáreas que se sedimentaron en una plataforma poco profunda y presentan abundante fauna, caracterizada por asociaciones de fósiles definiendo una zona de aguas someras.

MÉTODOS

La caracterización de la relación isotópica de ^{13}C y ^{18}O en carbonatos, se realizó utilizando un Espectrómetro de Masas de Relaciones Isotópicas (IRMS) acoplado a un sistema de tratamiento GasBench II. Además, se trabajó con estándares de calcita con distintas relaciones isotópicas de ^{13}C y ^{18}O (IAEA-CO8, NBS-18, IAEA-603, NBS-19).

Resultados y conclusiones

Las relaciones isotópicas $\delta^{13}\text{C}$ y $\delta^{18}\text{O}$ se analizaron en un rango de trabajo de $\delta^{13}\text{C}$: -5,764‰ a 2,460‰ y $\delta^{18}\text{O}$: -23,200‰ a -2,370‰, cuya información es útil para reconstruir cambios climáticos y oceanográficos ocurridos durante el Pérmico y permiten estimar la concentración atmosférica de CO_2 a través del tiempo geológico mediante curvas de variación secular y el registro estratigráfico.

Las muestras analizadas evidencian variaciones en su firma isotópica entre $\delta^{13}\text{C}$: -1,955‰ a 2,397‰ y $\delta^{18}\text{O}$: -9,250‰ a -5,915‰. Estos resultados pueden correlacionarse a nivel regional con $\delta^{13}\text{C}$ y $\delta^{18}\text{O}$ en carbonatos obtenidas en los Andes de Mérida (Venezuela) la cual se encuentra a más de 300 Km del área de estudio, y permiten determinar que los carbonatos de la Formación Palmarito de la Serranía del Perijá fueron depositados durante un periodo interglaciar a finales del Kunguriano (ca. 275-270 Ma) en una fase relativamente cálida como lo revelan los valores empobrecidos de $\delta^{18}\text{O}$.

Referencias

- [1] Laya, J. C.; Tucker, M. E.; Gröcke, D. R.; Perez-huerta, A.; Perez-huerta, A. 2014
- [2] Silva, R. L.; Duarte, L. V.; Comas-rengifo, M. J.; Filho, J. G. M.; Azerêdo, A. C. Chem. Geol. 2011, 283 (3–4), 177–184.
- [3] Pastor-Chacón, A.; Reyes-Abril, J.; Caceres-Guevara, C.; Sarmiento, G.; Cramer, T. Geol. Colomb. -An Int. J. Geosci. 2013, 38 (0), 5–24.



Estudio del Circón natural Z-SGC-3 como potencial material de referencia natural para determinar edades U/Pb por LA-ICP-MS.

Jimmy Alejandro Muñoz, Carolina Jimenez, Alejandro Piraquive, Nicolás Villamizar, David Contreras, Mary Luz Peña.¹

¹Dirección Asuntos Nucleares, Servicio Geológico Colombiano, Bogotá D.C. Colombia.

* jamunoz@sgc.gov.co

Palabras Claves: Z-SGC-3, Material referencia, Datación-U/Pb.

Introducción

Los estándares naturales para Datación-U/Pb son escasos como el 91500, entre otros, y son utilizados para corregir fraccionamiento elemental y control analítico para LA-ICP-MS^{1,2}. Se caracterizó el circón natural Z-SGC-3 como potencial material de referencia en términos de homogeneidad, edades concordantes ²⁰⁶Pb/²³⁸U ²⁰⁷Pb/²³⁵U, incertidumbre analítica y concentraciones de Uranio y Plomo³.

Métodos

Z-SGC-3 proviene de Sri Lanka, peso 4 gramos, se realizó un montaje con resina epóxica con una parte de este. Fue analizado haciendo ablaciones de 35 µm en superficie con un láser-eximer y determinando las relaciones isotópicas ²⁰⁶Pb/²³⁸U y ²⁰⁷Pb/²³⁵U en un ICP-MS sector magnético.

Resultados y conclusiones

Las edades obtenidas para el circón Z-SGC-3 fueron las siguientes:

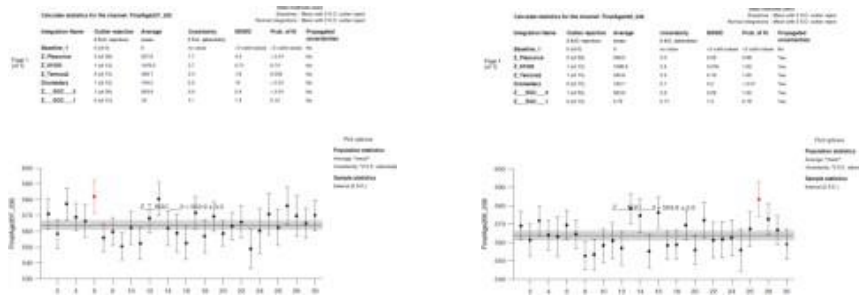


Imagen. Distribución de edades obtenidas

Los resultados fueron en promedio 563.8 ± 2.6 Ma. (²⁰⁶Pb/²³⁸U) y 563.9 ± 3.0 Ma ²⁰⁷Pb/²³⁵U (DER < al 2 %). Las intensidades para los Isotopos de ²³⁸U y ²³²Th fueron moderadas dentro de la extensión del circón, no superiores a los 4 millones de cps, las intensidades de ²⁰⁴Pb fueron menores al límite de detección del equipo indicando la ausencia de plomo común.

Los resultados obtenidos muestran una distribución homogénea de edades y relaciones isotópicas e incertidumbres < 0.5 %, las edades obtenidas manifiestan sistemas concordantes de U/Pb, la distribución de concentraciones son acordes a lo esperado para un material de referencia como lo son concentraciones no detectables de Pb común y concentraciones moderadas de U y Th³. Lo anterior indica que el Circón Z-SGC-3 es un excelente material de referencia.

Referencias

- [1] C. Paton, J. D. Woodhead, y et al., «Improved laser ablation U-Pb zircon geochronology through robust downhole fractionation correction,» *Geochimica et Cosmochimica Acta*, vol. 74, pp. 1 - 36, 2010.
- [2] J. Kosler y P. J. Sylvester, «Present trends and the future of zircon in geochronology: Laser ablation ICPMS,» *Mineral. Geochem.*, vol. 53, n° 11, pp. 243 - 275, 2003.
- [3] Nasdala, Lutz, Fernando Corfu, Blair Schoene y et al. 2018. “GZ7 and GZ8 – Two Zircon Reference Materials for SIMS U-Pb Geochronology.” *Geostandards and Geoanalytical Research* 42 (4): 431–57.



Índices de origen para HTP e HPA en ambientes acuáticos: caso de estudio en la quebrada la perdiz, Florencia - Caquetá.

Claudia-Yolanda Reyes,¹ Katerine Botero Nãñez,² Jairo Andr s Cer n Bola os.¹

¹Universidad de la Amazon a

²Universidad Fereral de Bah a

*cl.reyes@udla.edu.co

Palabras claves: Antropog nico, Biog nico, Petrog nico, Geoqu mica.

Introducci n

En las ciencias ambientales, es relevante dilucidar el origen de sustancias org nicas tipo hidrocarburos, dadas las implicaciones en los ecosistemas y personas. Para ello, se usan  ndices de origen como herramienta matem tica, que contiene informaci n de las caracter sticas y abundancias para sustancias provenientes de procesos biogeoqu micos o de productos petrog nicos.

M todo

Se realiz  extracci n L/L de sustancias solubles en DCM para muestras de agua, seguidamente se identific  y cuantific  con GC/FID (HPT) y GC/MS (HPA). Posteriormente, para elucidar su posible origen, las concentraciones relativas se usaron en diversos  ndices, como herramienta matem tica, complementada con m todos gr ficos e integrada mediante interpretaci n geoqu mica.

Resultados y conclusiones

El origen de los HTP e HPA para las estaciones PP-GP-TR-RC-CP-BP de la Quebrada la Perdiz, present  predominio antropog nico-petrog nico-pirol tico, con aportes biog nicos. En este sentido, PP es biog nico con aportes petrog nicos por la abundancia de fenantreno y alcanos pares de alto peso molecular; GP es antropog nico-petrog nico-pirol tico con aportes biog nicos debido al contenido de Fenantreno, Fluorantreno, Pireno, alcanos impares y nC25; TR es antropog nico-petrog nico-pirol tico por la presencia de fenantreno-Pireno y alcanos impares; RC es antropog nico, pirol tico-petrog nico debido a la abundancia de HPA de alto peso molecular y alcanos impares; CP y BC son antropog nicos-pirol ticos petrog nicos con aporte biog nico, asociado con abundancia de HPA de alto peso molecular, nC25 y alcanos \geq nC21. Finalmente, las concentraciones totales de HPA, fueron mayores que las permitidas por la OMS, en tanto que las de HTP estuvieron abajo de los admitidos por Minambiente.

Referencias

- [1] Veiga, I. G. Avalia o Da Origem Dos Hidrocareconetos Em Sedimentos Superficiais de Manguezais Da Regi o Norte Da Ba a de Tosdos Os Santos /Bahia. 2003, 224.
- [2] Adeniji, A. O.; Okoh, O. O.; Okoh, A. I. Levels of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons in the Water and Sediment of Buffalo River Estuary, South Africa and Their Health Risk Assessment. Arch. Environ. Contam. Toxicol. 2019, 76 (4), 657–669. <https://doi.org/10.1007/s00244-019-00617-w>.
- [3] Fagbote, O. Characterization and Sources of Aliphatic Hydrocarbons of the Sediments of River Oluwa at Agbabu Bitumen Deposit Area, Western Nigeria. J. Sci. Res. Reports 2013, 2 (1), 228–248. <https://doi.org/10.9734/jsrr/2013/3063>.



Síntesis y caracterización de biodiesel empleando catalizadores homogéneos y heterogéneos

Guillermo Manuel González Guerra,^{1*} Miriam Mayela Alcocer Anaya,¹ Sofia del Pilar Cap González,² Martín Alatorre Alatorre Ordaz,¹ Fernando Israel Gómez Castro,¹ Salvado Hernández Castro.¹

¹Universidad de Guanajuato

²Universidad de San Carlos Guatemala

*elvis_memo@hotmail.com

Palabras Claves: Biodiésel, catalizadores, propiedades fisicoquímicas.

Introducción

Hoy día, los biocombustibles, contribuyen en gran medida a reducir el uso de combustibles fósiles. Uno de los más conocidos, debido a su gran asequibilidad, es el biodiésel; que se ha demostrado que puede sustituir al diésel de origen fósil con disminución de las emisiones de CO₂, CO, SO₂ y HAP.

Métodos

Se reporta la síntesis de biodiésel a partir de aceite de soya comercial y de desecho. Con el fin de evaluar las condiciones de reacción que afectan los rendimientos, las propiedades fisicoquímicas y la calidad del biodiésel. Se compararon los productos de transesterificación con dos catalizadores homogéneos y uno heterogéneo.

Resultados y conclusiones

Las especificaciones fisicoquímicas del biodiésel se evaluaron conforme las normas de la American Society for Testing Materials, ASTM. Los resultados obtenidos incluyen un método reproducible para la síntesis de biodiésel a partir de aceite de soya nuevo y aceite usado. El análisis de las propiedades fisicoquímicas y las caracterizaciones estructurales determinan bajo cuales condiciones de reacción los productos de transesterificación cumplen con las normas internacionales ASTM correspondientes para un biodiésel de calidad. Las variables reportadas permiten, además identificar las variables que afectan directamente al rendimiento y a la calidad de los productos. Se encontró que tanto para los aceites nuevos como para los de desecho, el hidróxido de sodio permitió obtener los mayores rendimientos experimentales y las mayores tasas de conversión, cumpliendo también con todas las normas. Lo que representa una ventaja a futuro no sólo en los precios de los combustibles energéticos sino también en el impacto ambiental.

Referencias

- [1] Shan, R., Lu, L., Shi, Y., Yuan, H., Shi, J. Catalysts from renewable resources for biodiesel production, *Energy Convers. Manag.* 2018.178:277-289. <https://doi.org/10.1016/j.enconman.2018.10.032>
- [2] Sharma, Y. C., Singh, B., Korstad, J. High yield and conversion of biodiesel from a nonedible feedstock (Pongamia pinnata). *J. Agr. Food Chem.* 2009. 58:242-247. <https://doi.org/10.1021/jf903227e>
- [3] Shibusaki-Kitakawa, N., Honda, H., Kuribayashi, H., Toda, T., Fukumura, T., Yonemoto, T. Biodiesel production using anionic ion-exchange resin as heterogeneous catalyst. *Bioresour. Technol.* 2007. 98:416-421. <https://doi.org/10.1016/j.biortech.2005.12.010>



HIDROGEOQUÍMICA DEL As EN LAS FUENTES DE AGUA QUE ABASTECEN EL ACUEDUCTO DE SANTA ROSA DE CABAL – RISARALDA, COLOMBIA.

Olger Giovanni Mendoza Villabona,* Lina Maria Tabares, Maria Clara Zuluaga, Margy Paola Acevedo, Gloria Prieto Rincón.

Dirección de Recursos Minerales, Servicio Geológico Colombiano

*ogmendoza@sgc.gov.co

Palabras Claves: Arsénico, Hidrogeoquímica, Dispersión, Geoquímica

Introducción

Se identificó As en el agua de consumo abastecida por los ríos Campoalegrito y San Ramón. El estudio hidrogeoquímico de las aguas superficiales permite establecer el origen, dispersión y acumulación de As. También posibilita la identificación de ambientes naturales de óxido-reducción y estudiar la especiación de As en el sistema acuoso.

Métodos

Se colectaron 129 muestras entre ríos, agua termal y agua tratada. In-situ se midió pH, Eh, temperatura, conductividad, alcalinidad, potencial redox y Fe^{2+} soluble. En el laboratorio se analizaron aniones (cromatografía iónica) y cationes incluyendo As (ICP-MS). El análisis hidrogeoquímico y geoestadístico se realizó con el software ioGAS.

Resultados y conclusiones

La concentración de As varía entre 70 y 96 $\mu g/l$ previo al tratamiento de potabilización, superando la normatividad colombiana (50 $\mu g/l$). Se estableció un origen natural para el As en las aguas termales y la distribución iónica diferenció tres tipos de aguas. El primero lo conforman los manantiales termales ricos en As, distinguiendo dos sistemas diferentes; uno con aguas cloruradas-sódicas (termales de San Vicente) y otro con aguas mixtas clorurado-sódicas y carbonatadas-cálcicas (Termales de Santa Rosa). El segundo corresponde a aguas superficiales de origen profundo relacionado a su elevada carga iónica y el tercero corresponde a aguas superficiales de origen somero, dada su pobre salinidad¹. Los diagramas Eh-pH proponen al arsenito $H_2AsO_3^-$ como predominante en las aguas termales (ambiente reducido) y al arseniato $H_2AsO_4^-$ como predominante en las aguas de los ríos (ambiente oxidado)². Arsenito y arseniato pueden coexistir en la cuenca, dependiendo de las condiciones de pH y de redox³.

Referencias

- [1] Guo Q., Liu M., Li J. & Zhou Ch., (2017). Geochemical genesis of arsenic in the geothermal waters from the Rehai hydrothermal system, southwestern China. *Procedia – Earth and Planetary Science* 17 (2017) 49-52
- [2] Bissen, M., & Frimmel, F. H. (2003). Arsenic— a Review. Part II: Oxidation of Arsenic and its Removal in Water Treatment. *Acta Hydrochimica et Hydrobiologica*, 31(2), 97–107.
- [3] Bissen, M., Frimmel, F. H. & Ag, C. (2003). Arsenic – a Review . Part I: Occurrence, Toxicity, Speciation, Mobility. *Acta Hydrochim. Hydrobiol*, 31, 9–18.



METODOLOGÍA PARA LA CONCENTRACIÓN DE CIRCONES EN ROCAS GRANITOIDES

John Mauro Castaño,* Fredy Rodriguez, Carlos Garcia.

Servicio Geológico Colombiano

*jmcastano@sgc.gov.co

Palabras clave: Granitoides, Circones, Geocronología, Concentración

Introducción

El Laboratorio Químico de la sede Medellín de la Dirección de Laboratorios del Servicio Geológico Colombiano, está desarrollando investigaciones sobre la caracterización de diferentes parámetros que están implicados en el proceso de concentración de circones que se utilizan para Datación Radiométrica U-Pb LA-ICP-MS en Geocronología

Métodos

La metodología fue empleada para rocas Granitoides y las etapas de dicho proceso fueron: molienda (trituration, pulverización y tamizaje), concentración gravimétrica en Mesa Wilfley, concentración magnética en equipo Isodinámico Frantz, utilización de líquidos densos LST (Politungstonato de Litio), separación en vidrio de circones y elaboración de probeta.

Resultados y conclusiones

Se tomó 46 muestras de rocas granitoides y se encontró que la mejor granulometría en cuanto a trituration, pulverización y tamizaje fue a malla 200, los parámetros óptimos para la Mesa Wilfley y el Isodinámico Frantz LB-1 donde se obtuvo la mayor cantidad posible de circones fueron ángulos lateral y frontal de (7.5 ° , 2.1 °) para la Mesa Wilfley y para el Isodinámico Frantz ángulo lateral 20 °(0.4,0.8 A,1.2 A) y ángulo frontal 10 °. De igual forma se realizó los balances de masa para obtener los mejores rendimientos y se analizaron costos de operación.



Figura: Circones separados

Referencias

- [1] Castaño, J. M. Guía del Servicio Geológico Colombiano. Concentración de circones por medio magnético para datación.(Online)2020
- [2] Holman Wilfley Ltd. Operating & Maintenance Manual. Cornwall.2014
- [3] Lutgens, F.K.; Tarbuck, E.J. Ciencias de la Tierra Una introducción a la geología física; Pearson Prentice Hall: Madrid, 2005.
- [4] S. G. Frantz Company Inc. Assembly, installation, operation and maintenance instructions Frantz magnetic barrier laboratory separator model LB-1.2014



SLLCL-358

EVALUACIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE MERCURIO EN UNA INSTALACIÓN DE GENERACIÓN ELÉCTRICA A CARBÓN

Billy Rodríguez,* Sonia Guerra, Manuel Romero.

Servicio Geológico Colombiano

*brodriguez@sgc.gov.co

PALABRAS CLAVE : Mercurio, central térmica, carbón, emisiones

INTRODUCCIÓN

En el marco del proyecto de investigación “Ocurrencia de Mercurio en Carbones Colombianos”, el grupo de trabajo de Caracterización, Procesamiento e Investigación de Carbones y Materiales Energéticos de la Dirección de Laboratorios del Servicio Geológico Colombiano evaluó la concentración de mercurio en la cadena productiva de una instalación termoeléctrica.

MÉTODOS

Se realizaron muestreos en frentes de mina de los diferentes proveedores de la termoeléctrica, se tomaron muestras del carbón de alimentación de la caldera, cenizas volantes y cenizas de fondo, igualmente se tomaron muestras de gases en chimenea y se determinó la concentración de mercurio en el aire. El valor medio del contenido de mercurio en base seca en las muestras de carbón de frente de mina analizadas fue de 127 $\mu\text{g}/\text{kg}$, y el 89% de los carbones presentan valores inferiores a 300 $\mu\text{g}/\text{kg}$.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

De acuerdo con los resultados se identificó una correlación directa aceptablemente significativa entre el contenido de mercurio con: cenizas, azufre, azufre pirítico. En cuanto a las muestras de carbón en banda (antes de ingresar a la caldera), se encontró una concentración de mercurio promedio de 182 $\mu\text{g}/\text{kg}$. Se evidenció un efecto de concentración del mercurio en las cenizas volantes, obteniéndose un valor promedio de 555 $\mu\text{g}/\text{kg}$. Se encontró que para las cenizas de fondo el valor promedio fue de 16 $\mu\text{g}/\text{kg}$. El contenido de mercurio en los gases de chimenea tiene un valor promedio de 2,9 $\mu\text{g}/\text{Nm}^3$. Por último, para las mediciones de mercurio en el aire se identificó una concentración de 0,2 $\mu\text{g}/\text{Nm}^3$.

REFERENCIAS

- [1] Ochoa, R. (2011) Retención de mercurio en sistemas de desulfuración en fase húmeda. 1-9.
- [2] Fundación Labein. (2005). Guía técnica para la medición, estimación y cálculo de las emisiones al aire. 17- 26.
- [3] Batuecas, E. (2011). Análisis y evaluación de las emisiones de mercurio procedentes de las centrales térmicas españolas. 18-29.



PROCESOS TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN

ILJCL-271

FROM LIGNIN-DERIVED PHENOLICS TO SECONDARY AMINES VIA CATALYTIC TRANSFORMATION ON Rh/C AND Pd/C

Arteaga-Pérez L.E.^{1,2}, Manrique R.¹, Jiménez R.³, Ortega M.¹

¹Laboratory of Thermal and Catalytic Processes., Wood Eng. Department, University of Bío-Bío, Concepción, Chile;

²Unidad de Desarrollo Tecnológico, Universidad de Concepción, Coronel, Chile. ³ Laboratorio de Carbono y Catálisis, Universidad de Concepción, Concepción, Chile

KEYWORDS: Phenolics, reductive amination, catalysts

INTRODUCTION

The heterogeneously catalysed reductive amination of lignin-derived monomers has drawn attention as a method for replacing petro-based amines by ligno-based ones [1–3]. Nowadays, there is a lack of information on how the metal nanoclusters and the phenolics nature affects this process. Both questions are assessed here for Pd/C and Rh/C.

METHODS

The catalysts 10% Pd/C (Merck, Chile) and 5% Rh/C (AlfaAeser, Chile) were characterized by **TPR**, **XRD**, **NH₃-TPD**, **SEM-EDX** and **TEM** for chemical and textural properties. Reactions were carried out in a ReactiTherm™ block using reinforced glass autoclave reactors. Five different substituted phenolics (phenol, 2,4-methylphenol, o, p-cresol and 4-methoxyphenol) were studied.

RESULTS AND CONCLUSIONS

The **XRD** confirmed the presence zero-valence Pd and Rh with average particle sizes between 1.9 and 3.3 nm [4]. The **SEM-EDX** shown a uniform distribution of metal in the support while a similar density of acid sites was found for both catalysts. The phenol amination proceeds by 3 major reaction regardless the metal used: (1) phenol hydrogenation into a carbonyl compound via a metal hydride (HPdH), (2) condensation of the carbonyl with the amine to form an intermediary imine and (3) disproportionation of the imine into secondary amines. Both catalysts were active for phenol-to-secondary amines reaction, although Pd/C exhibited higher activity to imine disproportionation than Rh/C. Moreover, all the substituted phenolics were converted into their respective cyclohexylamines with the following activity order: Phenol>4-methoxyphenol>o-cresol>p-cresol>2,4-dimethylphenol. The nature and quantity of substituent affected their adsorption and hydrogenation, leading to a reduction in the reaction performance (measured as conversion and selectivity).

References

- [1] M. Pelckmans, T. Renders, S. Van De Vyver, B.F. Sels, Bio-based amines through sustainable heterogeneous catalysis, *Green Chem.* 19 (2017) 5303–5331.
- [2] D.J. Segobia, A.F. Trasarti, C.R. Apesteguía, Selective one-pot synthesis of asymmetric secondary amines via N-alkylation of nitriles with alcohols, *J. Catal.* 380 (2019) 178–185.
- [3] R.N. Salvatore, A.S. Nagle, W.J. Kyung, Cesium effect: High chemoselectivity in direct N-alkylation of amines, *J. Org. Chem.* 67 (2002) 674–683.
- [4] S. Graulis, D. Chateigner, R.T. Downs, A.F.T. Yokochi, M. Quirós, L. Lutterotti, E. Manakova, J. Butkus, P. Moeck, A. Le Bail, Crystallography Open Database - An open-access collection of crystal structures, *J. Appl. Crystallogr.* 42 (2009) 726–729.



SLJCL-42

ESTUDIO DE LA DETERMINACIÓN DE HIERRO EN VINOS EMPLEANDO SISTEMAS INTELIGENTES MEDIANTE EL USO DE SMARTPHONES

Rafael Alonso Salinas Téllez,* Ily Maza Mejía.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE INGENIERÍA

*rafito_u@icloud.com

PALABRAS CLAVES: Química-verde software colorimetría

INTRODUCCIÓN

Hoy en día existe una gran necesidad a nivel mundial de realizar determinaciones rápidas en campo y poder evitar la pérdida de información con el protocolo convencional del traslado de las muestras, la utilización de conservantes y los diferentes componentes utilizados en laboratorio hasta la determinación.

MÉTODOS

Además algunos métodos convencionales espectrofotométricos y cromatográficos son de difícil acceso y presentan ciertos inconvenientes en la determinación de diferentes muestras.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Este estudio presenta una alternativa en la determinación colorimétrica del hierro en vinos mediante la formación de un complejo de hierro tiocianato de color rojo intenso, se captura la imagen mediante un smartphone, se analiza con un sistema interno del mismo dispositivo (programa Photometrix PRO) además de un programa libre Image J desde un ordenador. Se evalúan algunos parámetros de calidad y se comparan con los métodos convencionales de espectrofotometría de absorción molecular UV-VIS. Con estos resultados se podrá realizar ensayos desde las mismas bodegas vinícolas y obtener resultados de manera sencilla y accesible.

REFERENCES

[1] Rezazadeh, M., Seidi, S., Lid, M. and Pedersen-Bjergaard, S.. The modern role of smartphones in analytical chemistry. Trends in Analytical Chemistry. 2019. 118. 548-555.



SLJCL-46

Optimización en la dosis de químicos empleados en la potabilización y su efectividad en la remoción de MATERIA ORGÁNICA NATURAL

Victor Acevedo.*
Universidad de Panamá

*v-acevedo21@hotmail.com

PALABRAS CLAVES: Potabilización, Coagulación, Floculación, Turbiedad

INTRODUCCIÓN

El agua es el recurso de mayor importancia para el desarrollo y subsistencia de todas las especies biológicas, es limitado y de gran valor, de allí que todos están llamados a cuidar las reservas, a no contaminarlas y en especial a no malgastarlas.

MÉTODOS

Consiste en determinar los valores iniciales de Sólidos Totales Suspendidos, Carbono Orgánico Total, Turbiedad, pH y Alcalinidad en las muestras de agua cruda. Esto se compara con los valores finales después de realizar la Prueba de Jarra, obteniendo el porcentaje de remoción de la Materia Orgánica Natural.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La jarra con 0,4 mg/L de Polihidroxiclورو de Aluminio (PAC) fue la que presenta el mayor porcentaje de remoción en los tres parámetros. Para TOC fue de 27%, para STS fue de 85% y para turbiedad fue de 91,8%. Además, es la que presenta un costo por día más bajo de solo \$ 111,29 por cada 49 millones de galones de agua potable.

El análisis estadístico ANOVA, demuestra que no hay diferencia significativa en el porcentaje de remoción de los tres parámetros considerados (STS, TOC y Turbiedad) entre las dosificaciones escogidas (PAC, FeCl₃, Alumbre+Polidadmac), ya que los resultados obtenidos están por arriba de 0,05 a un intervalo de confianza de 95%. Es decir que estadísticamente no hay diferencia significativa entre ellos y por lo tanto se puede utilizar cualquiera de las dosificaciones y se obtendrían valores similares respecto a los tres porcentajes de remoción.

REFERENCIAS

- [1] Alvarado, C.; Pérez, H.; Saba, C. "Evaluación del uso del Policloruro de Aluminio en conjunto con Sulfato de Aluminio en el proceso de coagulación de una planta de potabilización de agua en el estado de Carabobo". Ingeniería y Sociedad UC, 2015, 10(1), 35–46.
- [2] Matilainen, A.; Vepsäläinen, M.; & Sillanpää, M. "Natural organic matter removal by coagulation during drinking water treatment: A review". Advances in Colloid and Interface Science, 2010, 159(2), 189–197.
- [3] Särkkä, H.; Vepsäläinen, M.; & Sillanpää, M. "Natural organic matter (NOM) removal by electrochemical methods — A review". Journal of Electroanalytical Chemistry, 2015, 755, 100–108.



NANOSIZED APATITE COATINGS ON TITANIUM BY ACCELERATED BIOMIMETIC METHOD

Loreley Morejón-Alonso,¹ Mauricio A. Bussulo,¹ Eduardo González,² Abel Fumero,³ Jesús González,⁴

¹General and Inorganic Chemistry Department. Faculty of Chemistry, University of Havana, Cuba

²Department of Chemistry & Chemical Biology. Faculty of Science, McMaster University, Canada

³Mechanical Engineering Faculty, Technological University of Havana, Cuba

⁴Biomaterial Center, University of Havana, Cuba

*lmorej@fq.uh.cu

INTRODUCTION

Titanium (Ti) and its alloys have become the material of choice for long-term implant due to their distinctive properties. In order to stabilize bone-prosthesis interface, hydroxyapatite coatings are frequently applied. The biomimetic coating technology stands out due to its simplicity, low cost and versatility; however, it requires long deposition times and changes of solutions in order to avoid bacterial contamination. Thus, the aim of this work was to obtain nano-hydroxyapatite coatings on titanium substrates through an accelerated biomimetic method.

METHODS

Before coating, substrates were mechanical and chemical treated in alkaline solution. For biomimetic deposition, a seven times concentrated simulated body fluid solution (SBF_{x7}) was used instead of the traditional SBF solution. Different pH conditions and immersion times (1h to 4h) were used in order to evaluate their influence on chemical composition and adhesion strength of coatings. Phase composition was studied by X-ray diffraction and Infrared Spectroscopy (IR-FTIR), morphological characterization was determined by Scanning Electron Microscopy and adhesion strength was determined by Scratch Test assay.

RESULTS AND CONCLUSIONS

The results showed that the proposed method allows the deposition of calcium deficient hydroxyapatite (CDHA) coatings at 1h after immersion on the supersaturated calcium solution (SBF_{x7}). pH control during deposition allowed precipitation of nanocrystals of CDHA onto Ti substrates instead of dicalcium phosphate dihydrate which is obtained in normal conditions. Nevertheless, the morphology and composition of both coatings after thermal treatment were very similar with a thickness ranging from 12 to 15 μm . Adhesion strength values for both experiments were high and suitable for orthopedics applications: 355 ± 58 MPa without pH control and 248 ± 45 MPa with pH control. So, the methodology proposed could be an effective way to obtain nanosized hydroxyapatite coatings on titanium substrate intended for biomedical applications.



RESIDUOS DE BIOMASA PARA LA FABRICACIÓN DE ELECTROCATALIZADORES A BASE DE PUNTOS CUÁNTICOS DE CARBONO RECUBIERTOS CON NANOPARTÍCULAS DE PLATINO PARA REACCIONES MOR Y HER.

Santiago Urbano Narváez, Luisa D. Ramos Riascos, Cristian David Miranda Muñoz, Alfonso Enrique Ramírez Sanabria
Universidad del Cauca

santiagou@unicauca.edu.co

PALABRAS CLAVE: Biomateriales, impedancia, valorización de biomasa.

INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas se han incrementado los esfuerzos por reemplazar los combustibles fósiles por recursos energéticos renovables. Destacan las reacciones de producción de energía del tipo RedOx, como la oxidación de alcoholes, evolución-oxidación de hidrógeno y su optimización mediante catalizadores para celdas de combustibles con mayor eficiencia.

MÉTODOS

En las últimas décadas se han incrementado los esfuerzos por reemplazar los combustibles fósiles por recursos energéticos renovables. Destacan las reacciones de producción de energía del tipo RedOx, como la oxidación de alcoholes, evolución-oxidación de hidrógeno y su optimización mediante catalizadores para celdas de combustibles con mayor eficiencia.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los CQDs obtenidos del residuo de biomasa, se caracterizaron por FTIR, DRX y TEM. Seguimiento de recubrimiento con nanopartículas de Pt y fabricación de diferentes tipos de micro-electrocatalizadores. Se estudió la actividad catalítica y electroquímica empleando diferentes técnicas electroquímicas. El comportamiento de los electrocatalizadores fue evaluado sobre la reacción de oxidación de metanol (MOR) y la reacción de desprendimiento de hidrógeno (HER), comparándose con el uso de platino para estas reacciones. Se destaca la preparación de electrocatalizadores novedosos por vía térmica, mediante la optimización de los factores térmicos y electroquímicos de fabricación. Estableciendo la relación entre los parámetros: De síntesis de CQDs, decoración con nanopartículas, proceso de fabricación, caracterización-funcionalidad y actividad electrocatalítica

REFERENCIAS

1. Martín-Yerga, D.; Rama, E. C.; & Costa-García, A. Electrochemical Study and Applications of Selective Electrodeposition of Silver on Quantum Dots. *Anal. Chem.* 2016, 88 (7), 3739–3746.
2. Darabdhara, G.; Das, M. R.; Amin, M. A.; Mersal, G. A. M.; Mostafa, N. Y.; Abd El-Rehim, S. S.; Szunerits, S.; & Boukherroub, R. Au–Ni alloy nanoparticles supported on reduced graphene oxide as highly efficient electrocatalysts for hydrogen evolution and oxygen reduction reactions. *Int. J. Hydrogen Energy.* 2018, 43 (3), 1424–1438.



EXTRACCIÓN CON FLUIDOS COMPRIMIDOS EN LATINOAMÉRICA, REALIDAD O FANTASÍA

D. Ballesteros-Vivas¹, A.D.P. Sánchez-Camargo², J.P. Ortega-Barbosa¹, L.I. Rodríguez-Varela¹, F. Parada-Alfonso^{1*}
 Grupo de Investigación en Química de Alimentos-GIQA, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá Colombia.
²Grupo de Diseño de Productos y Procesos (GDPP), Universidad de los Andes, Bogotá-Colombia.

fparadaa@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Extracciones verdes, extracciones sostenibles.

INTRODUCCIÓN

Con el inicio del presente siglo el empleo de técnicas de extracción sostenibles ha aumentado. Dentro de éstas se destacan la extracción fluidos comprimidos (supercritical fluid extraction-SFE y pressurized liquid extraction-PLE). En este trabajo se hace una revisión crítica sobre los desarrollos en América Latina durante las últimas dos décadas.

MÉTODOS

Para SFE y PLE se presentará: (i) los aspectos fundamentales, enfatizando en los factores que afectan la extracción, (ii) equipamiento requerido, resaltando los adelantos alcanzados, (iii) aplicaciones, tanto a escala investigativa como industrial y, como conclusiones, (iv) el panorama que se vislumbra a futuro para dichas técnicas en la región.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

A nivel mundial, desde finales del siglo pasado, el número de investigaciones que emplean SFE, usando como disolvente dióxido de carbono puro o con co-solvente, y PLE ha incrementado considerablemente, esta última con mayor crecimiento; en el periodo 2000-2005 la relación de trabajos SFE-PLE era 2:1, y para el tercer lustro era casi paritaria, relación que se mantiene en los trabajos publicados durante 2021. En Latinoamérica, Brasil lidera las investigaciones en este campo. Iniciando el siglo, la región aportó el 2,0% de las publicaciones, y entre 2015-2020 dicho porcentaje superó el 6,0%; el crecimiento de la proporción de trabajos SFE:PLE fue ligeramente menor a la indicada anteriormente, sin embargo, en los trabajos publicados en lo corrido del 2021 la paridad se mantiene (ScienceDirect, marzo 2021).

REFERENCIAS

- (1) Parada, F. Extracción con Fluidos Supercríticos: Realidad o Fantasía. *Química e Industria* 2001, 22, 20-23.
- (2) Ballesteros-Vivas, D., Mendiola, J.A., Ibáñez, E. (2019) Extraction | Supercritical fluid extraction, In: *Encyclopedia of Analytical Science*, pp. 127-133.
- (3) Ballesteros-Vivas, D., Ortega-Barbosa, J.P., Sánchez-Camargo, A.D.P., Rodríguez-Varela, L.I., Parada-Alfonso, F. (2021) Pressurized Liquid Extraction of Bioactives, In: *Comprehensive Foodomics*, pp. 754-770.



ACETILACIÓN DE GLICEROL A ADITIVOS DE BIOCOMBUSTIBLE SOBRE CATALIZADOR DE GRAFENO SULFONADO

Luisa Ramos,* Alfonso Ramirez, Cristián Miranda.

Universidad del Cauca

*luisadramos@unicauca.edu.co

PALABRAS CLAVE: Acetilación de glicerol, grafeno sulfonado, valorización de glicerol, catálisis heterogénea.

INTRODUCCIÓN

En la actualidad se tiene especial interés tanto en procesos que permitan el aprovechamiento del glicerol (subproducto al obtener biodiesel), como en materiales que catalizan y optimizan dichos procesos. Se plantea la acetilación del glicerol como método de valorización y se propone el uso de grafeno sulfonado como catalizador.

MÉTODOS

Se realizó la síntesis del catalizador en tres pasos: se preparó el óxido de grafeno, a partir de grafito, usando una modificación del método de Hummers, posteriormente se redujo el óxido de grafeno obtenido y finalmente se funcionalizó mediante sulfonación.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

El óxido de grafeno reducido y sulfonado se caracterizó por FTIR, DRX y TEM. Se evaluó la actividad catalítica del material sobre la reacción de acetilación de glicerol, en términos de la conversión y la selectividad, prestando especial atención sobre la formación de triacetina (producto de interés). Adicionalmente, se estudió la reciclabilidad del material durante cinco ciclos de reacción. El catalizador sintetizado presentó un aumento considerable de la velocidad de reacción, obteniendo una conversión superior al 90% al término de 2 horas, en contraste a una conversión de alrededor de 50% sin el uso de un catalizador. Se destaca que el catalizador sintetizado mostró resultados comparables con el catalizador de referencia (Amberlyst 15) en términos de conversión y exhibió mejores resultados en cuanto a la selectividad del producto.

REFERENCIAS

[1] Miranda, C.; Ramírez, A.; Sachse, A.; Pouilloux, Y.; Urresta, J.; Pinard, L. Sulfonated Graphenes: Efficient Solid Acid Catalyst For The Glycerol Valorization. *Applied Catalysis A: General* 2019, 580, 167-177.



PRODUCCIÓN DE INMUNOGLOBULINAS AVIARES (IgYs) COMO HERRAMIENTA PARA LA DETECCIÓN DE ERITROPOYETINA EN COLOMBIA

Luisa María Caldas-Ortega,^{1*} Laura Estefanía Riascos-Orjuela,¹ María Helena Ramírez-Hernández,¹ Gonzalo Jair Díaz-Gonzales.²

¹Laboratorio de Investigaciones Básicas en Bioquímica (LIBBIQ), Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Carrera 45 # 26-85, Bogotá Colombia

²Laboratorio de Toxicología, Facultad de Medicina Veterinaria, Universidad Nacional de Colombia, Carrera 45 # 26-85, Bogotá Colombia

lmcaldaso@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Eritropoyetina, dopaje, anticuerpos

INTRODUCCIÓN

La eritropoyetina (EPO), proteína encargada de mediar la eritropoyesis favorece el aumento en la cantidad de glóbulos rojos, lo cual incrementa el suministro de oxígeno a los tejidos [1]. En consecuencia, EPO se considera un dopante, por ello se plantea el desarrollo de herramientas que faciliten su detección.

MÉTODOS

Se inmunizaron gallinas Lohmann Brown con eritropoyetina (EPREX y Eritromax) [2]. Los anticuerpos presentes en sangrías y en huevo se evaluaron por western-blot. IgYs de las yemas se purificaron por gradiente creciente de PEG(6000), se monitorearon por SDS-PAGE y se evaluaron mediante ensayos de ELISA y western-blot.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Durante la inoculación, se recolectaron 40 huevos y 5 sangrías incluyendo suero preinmune. Para evaluar la eficacia del esquema, se analizaron las sangrías mediante western-blot utilizando como antígeno la eritropoyetina Eritromax, que permitió la detección de bandas en el peso esperado. Estos resultados se observaron en todas las sangrías excepto la sangría preinmune, como estaba previsto. Posteriormente, se realizó la purificación de los anticuerpos contenidos en las yemas de huevo mediante precipitación con PEG(6000) y se estimó la concentración de IgYs totales mediante espectrofotometría a 280 nm. Estandarizadas las condiciones del ensayo, se llevó a cabo el ELISA para seleccionar las muestras con mayor cantidad de anti-EPO-IgY, con el fin de purificar dichos anticuerpos mediante precipitación con PEG(6000) y cromatografía de afinidad. Finalmente, se determinó la sensibilidad y especificidad de los anticuerpos purificados respecto al antígeno. Las IgYs generadas serán clave para el desarrollo de un sistema de reconocimiento de EPO.

REFERENCIAS

- [1] Jelkmann, W. Erythropoietin: novelties in antidoping research. *Curr. Opin. Endocr. Metab. Res.* 2013, 40 (5), 302-309.
- [2] Moreno-González, P. A.; Diaz, G. J.; & Ramírez-Hernández, M. H. Producción y purificación de anticuerpos aviares (IgYs) a partir de cuerpos de inclusión de una proteína recombinante central en el metabolismo del NAD⁺. *Revista colombiana de química*, 2013, 42(2), 12-20.
- [3] Pauly, D.; Chacana, P. A.; Calzado, E. G.; Brembs, B.; Schade R. IgY technology: Extraction of Chicken Antibodies from Egg Yolk by Polyethylene Glycol (PEG) Precipitation. *JOVE*. 2011, 51, e3084



EVALUACIÓN FUNCIONAL DE LOS TRANSPORTADORES NAD DE LEISHMANIA BRAZILIENSIS LbNDT2 Y LbNDT3, MEDIANTE ENSAYOS DE COMPLEMENTACIÓN DE LEVADURAS

Sharon Eliana Villamil-Silva,^{1*} María Helena Ramírez-Hernández.¹

¹Laboratorio de Investigaciones Básicas en Bioquímica (LIBBIQ), Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Carrera 45 # 26-85, Bogotá, Colombia.

*sevillamils@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Complementación, NAD⁺, parásito, transportador.

INTRODUCCIÓN

Simplificaciones a nivel metabólico que se evidencian en parásitos intracelulares (*L. braziliensis*), plantean un posible mecanismo de transporte que distribuya de manera adecuada el NAD a nivel intracelular [1]. Para corroborar la funcionalidad de las proteínas LbNDT2 y LbNDT3 se realizaron ensayos de complementación en cepa mutante de *S. cerevisiae*.

MÉTODOS

Construcción de plásmidos pGEM-T-LbNDT2 y 3. A partir gADN con primers diseñados. Subclonación en vector de expresión en levadura. Obtención de pYES2-LbNDT2 y 3 [2]. Generación de transformantes. Cepas INVSc y Δ ndt2 fueron modificadas por el método LiAc/ssADN/PEG3500.

Ensayos de complementación. Evaluación del crecimiento de Δ ndt2, medio fermentable y no fermentable.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Haciendo uso de la cepa mutante Δ ndt2 de *S. cerevisiae*, que carece del transportador de NAD mitocondrial NDT2p, se llevaron a cabo ensayos de complementación que permitieron la evaluación funcional de las proteínas LbNDT2 y 3 [3]. Inicialmente se clonaron en pGEM-T-easy, partiendo de gADN de *L. braziliensis* las secuencias de interés. Para realizar subclonación en el vector pYES2, tanto vector como insertos en pGEM-T fueron digeridos con BamHI y EcoRI; insertos liberados y purificados, fueron ligados en pYES; evaluados por PCR y digestión enzimática.

Cepas INVSc y Δ ndt2 transformadas mediante LiAc/ssADN/PEG3500 con los plásmidos construidos, se emplearon en los ensayos de complementación, donde se realizó seguimiento al crecimiento de diluciones seriadas en medio sólido (Sc(-U)) fermentable (Glucosa 2%) y no fermentable (Glicerol 2%). Finalmente, se encontró que tanto LbNDT2 como LbNDT3 fueron capaces de minimizar el defecto en el crecimiento de la mutante Δ ndt2, evidenciando su capacidad de transportar NAD.

REFERENCIAS

- [1] D. S. Morales, L. E. Contreras, C. C. Rubiano, y M. H. R. Hernandez, «Identification and sub-cellular localization of a NAD transporter in *Leishmania braziliensis* (LbNDT1)», *Heliyon*, vol. 6, n.o 7, p. e04331, 2020.
- [2] Invitrogen by Life Technologies, pYES2 Manual (Cat. no. V825–20), n.o 28-0053. 2008.
- [3] L. Palmieri et al., «Identification and Characterization of ADNT1, a Novel Mitochondrial Adenine Nucleotide Transporter from *Arabidopsis*», *Plant Physiol.*, vol. 148, n.o 4, pp. 1797-1808, 2008.



PRODUCCIÓN DE CIMENO POR PIRÓLISIS CATALÍTICA DE NEUMÁTICOS DESCARTADOS SOBRE PD SOPORTADO EN HALLOISITAS

Luis E. Arteaga-Pérez,^{1*} Paula Osorio-Vargas,² Cristian Campos,³ Cecilia Torres,⁴ Francisca Castillo-Puchi.¹

¹Laboratory of Thermal and Catalytic Processes (LPTC-UBB), Universidad del Bío-Bío, Chile

²Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas (CINDECA), UNLP-CCT La Plata, Buenos Aires, Argentina

³Departamento de Ciencias Químicas, Universidad de Concepción, Concepción, Chile.

⁴Departamento de Ciencias Químicas, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Andrés Bello, Sede Concepción, Talcahuano, Chile.

*luiseap@gmail.com

PALABRAS CLAVES: Pirólisis-catalítica, neumáticos, cimeno, limoneno

INTRODUCCIÓN

La pirólisis es el proceso con mayor potencial para transformar neumáticos descartados en compuestos químicos comercializables [1]. En el presente estudio se reportan las rutas de reacción, rendimientos y la cinética, que describen la producción de cimeno a partir de pirólisis catalítica de neumáticos, usando Pd soportado en halloisitas naturales.

MÉTODOS

Catalizadores de Pd/H se sintetizaron usando halloisitas modificadas. Se usó K_2PdCl_4 , NaOH y $NaBH_4$ para depositar las nanopartículas en forma elemental. Los catalizadores se caracterizaron por ATR, TGA, DRX, TEM y XPS. Se estudió la pirólisis catalítica entre 400 y 500 °C en un Micropirolizador-GCMS (CDS5200) a varios tiempos (2s-40s).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se comprobó por TEM que el Pd se deposita en la superficie interna en forma elemental (confirmado por XPS). Por DRX no se vio cambio aparente pues las nanopartículas son menor tamaño al que detecta la técnica y con ATR y TGA se determinó la inmovilización del APTMS y la cantidad anclada. La obtención de cimeno en condiciones no-catalíticas fue marginal ($Y < 0.1\%$), mientras que sobre Pd/H la producción de p-cimeno incrementó exponencialmente ($Y = 1.4\%$). Los resultados sugieren que el p-cimeno se forma a través de un mecanismo de hidrogenación-deshidrogenación del limoneno a $T < 500$ °C. Por encima de 500 °C, se produjo craqueo del p-cimeno reduciendo su producción en 30%. La cinética de formación del limoneno y cimeno se describió por los modelos de Mampel y contracción de partícula (R2), respectivamente. La energía de activación aparente para estas reacciones fueron 86.2 kJ/mol y 101 kJ/mol, según el método de Klemenstrud.

REFERENCIAS

- [1] Zhang, G.; Chen, F.; Zhang, Y.; Zhao, L.; Chen, J.; Cao, L.; Gao, J.; Xu, C. Properties and Utilization of Waste Tire Pyrolysis Oil: A Mini Review. *Fuel Process. Technol.* 2021, 211 (March 2020), 106582. <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2020.106582>.
- [2] Gao, X.; Tang, F.; Jin, Z. Pt-Cu Bimetallic Nanoparticles Loaded in the Lumen of Halloysite Nanotubes. *Langmuir* 2019, 35 (45), 14651–14658. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.9b02645>.
- [3] Klemetsrud, B.; Klinger, J.; Bar Ziv, E.; Shonnard, D. A Kinetic Study of the Fast Micro-Pyrolysis of Hybrid Poplar. *J. Anal. Appl. Pyrolysis* 2017, 128 (January), 353–362. <https://doi.org/10.1016/j.jaap.2017.09.014>.



SLJCL-344

EFFECTO DE LA INCORPORACIÓN SUPERCRÍTICA DE CINAMALDEHÍDO SOBRE LAS PROPIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS Y DE DESINTEGRACIÓN DE NANOCOMPÓSITOS BASADOS EN PLA/LIGNINA

Alejandra Torres,^{1*} Daniela Cerro,¹ Gonzalo Bustos,² Luis Constandil,² Carolina Villegas,¹ Francisco Rodriguez.¹

¹Universidad de Santiago de Chile, Centro de Innovación en Envases y Embalajes (LABEN), Facultad Tecnológica, Departamento de Ciencia y Tecnología de Alimentos, Obispo Umaña 050, Santiago, Chile

²Laboratorio de Neurobiología, Departamento de Biología, Facultad de Química y Biología, Universidad de Santiago de Chile, Chile

*alejandra.torresm@usach.cl

PALABRAS CLAVES: Impregnación Supercrítica Nanopartículas Lignina

INTRODUCCIÓN

Debido al impacto ambiental producido por los envases plásticos derivados del petróleo, los últimos años se ha incrementado el desarrollo de materiales biodegradables y/o compostables. El objetivo de este trabajo fue desarrollar bionanocompuestos de ácido poliláctico con nanopartículas de lignina y un compuesto activo, para aplicación como envases de alimentos.

MÉTODOS

Nanopartículas se incorporaron en PLA mediante un proceso de extrusión. Posteriormente estos films fueron sometidos al proceso de impregnación supercrítica con CO₂ para incorporar el compuesto activo. Se evaluaron sus propiedades térmicas, colorimétricas y se evaluó la transmitancia UV. Los ensayos de desintegración se realizaron por un período de 23 días.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos muestran que el proceso de impregnación de Ci tuvo una eficiencia que varía entre 5,7 y 10,8% w/w. La adición de ambos aditivos (Np-Lig y Ci) provocaron cambios en las propiedades térmicas y colorimétricas de los materiales finales, donde los bionanocompuestos exhibieron fuertes propiedades de barrera a la luz UV en comparación con los films de PLA. Los ensayos de desintegración de los bionanocompuestos en condiciones de compostaje mostraron que para el día 23, el porcentaje de desintegración fue superior al 90% para todos los films. Como conclusión se puede decir que los bionanocompuestos de PLA/Ci/Np-Lig poseen un gran potencial para ser usados como films compostables con barrera a la luz UV para el envasado de alimentos así como para aplicaciones biomédicas.



HERRAMIENTAS CONCEPTUALES PARA LA OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS DE DESTILACIÓN EXTRACTIVA EN LA PRODUCCIÓN DE ETANOL CARBURANTE UTILIZANDO ETILENGLICOL COMO SOLVENTE

César Augusto Sánchez Correa.*

Fundación Universidad de América - Grupo de Investigación en Procesos de Separación no Convencionales

*cesar.sanchez@profesores.uamerica.edu.co

PALABRAS CLAVES: Destilación, Etanol, Etilenglicol, Optimización

INTRODUCCIÓN

En este trabajo se presenta una aproximación para calcular el flujo mínimo de solvente y la relación mínima de reflujo en secuencias de destilación extractiva de tamaño definido. El objeto de estudio es la deshidratación de etanol utilizando etilenglicol en procesos con dos columnas y en columnas con pared divisoria.

MÉTODOS

Las simulaciones se realizaron en Aspen Plus V10® utilizando módulos RADFRAC para representar las unidades de destilación. Se utilizó una modificación del método de Figueiredo et al [1] para optimizar la secuencia clásica de destilación extractiva con dos columnas y el proceso intensificado en una columna con pared divisoria.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La parametrización de las soluciones del modelo matemático en función de la extensión de la zona extractiva y de la concentración del solvente en la misma zona permite calcular trayectorias que contienen los valores admisibles para el flujo de solvente (FS) y la relación de reflujo (RR). El seguimiento de estas trayectorias proporciona una aproximación directa para minimizar el FS y la RR. Para el caso del proceso en columnas con pared divisoria (CPD) se demostró numéricamente la igualdad de los equivalentes termodinámicos utilizados frecuentemente para representar los procesos en CPD [3]. Concluimos que desde el punto de vista de simulaciones utilizando el enfoque secuencial, el equivalente con tres módulos facilita la tarea de calcular los valores mínimos del FS y la RR. El proceso optimizado en CPD para la producción de etanol carburante utilizando etilenglicol proporciona un ahorro de energía de 20% respecto del proceso clásico con dos columnas.

REFERENCIAS

- [1] De Figueiredo, M.; Brito, K. D.; Ramos, W.; Sales Vasconcelos, L.; Brito, R. Effect of Solvent Content on the Separation and the Energy Consumption of Extractive Distillation Columns. *Chem. Eng. Commun.* 2015, 202 (9), 1191–1199.
- [2] Kiss, A.; Suszwalak, D. J. P. C. Enhanced Bioethanol Dehydration by Extractive and Azeotropic Distillation in Dividing-Wall Columns. *Sep. Purif. Technol.* 2012, 86, 70–78.
- [3] Cordeiro, G.; De Figueirêdo, M.; Ramos, W. B.; Sales, F. A.; Brito, K. D.; Brito, R. P. Systematic Strategy for Obtaining a Dividing-Wall Column Applied to an Extractive Distillation Process. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2017, 56 (14), 4083–4094.



SISTEMA INSTITUCIONAL INTEGRADO DE LABORATORIOS DE LA UNIVERSIDAD DEL VALLE (SIILUV): UNA FÁBRICA DE CONOCIMIENTO Y DESARROLLO TECNOLÓGICO A TRAVÉS DE LA GESTIÓN OPTIMIZADA Y SOSTENIBLE DE LABORATORIOS.

Fernando Luna Vera,* Diana Velasquez Ramirez, Carolina Villamil, Giseth Cardozo Pernia, Juan Manuel Peña Herrera

Universidad del Valle

*fernando.luna@correounivalle.edu.co

PALABRAS CLAVES: Laboratorios Innovación ISO9001 Corelabs

INTRODUCCIÓN

La posibilidad de generar nuevo conocimiento y desarrollo tecnológico se incrementa cuando se optimizan recursos y se comparten capacidades instaladas y de conocimiento. La Universidad Del Valle ha reconocido esa posibilidad y ha creado un sistema que permite articular los recursos y saberes de sus más de 170 laboratorios.

MÉTODOS

A través análisis del entorno, de las necesidades de la comunidad universitaria y de la región, a través de encuestas, análisis de redes y diversos talleres y espacios de diálogo, Univalle produjo la política institucional de laboratorios y el acuerdo que da lugar al sistema Institucional integrado de laboratorios (SIILUV).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Univalle cuenta hoy con un sistema que permite la gestión eficiente de laboratorios mediante una cultura de la calidad y la mejora continua, a través del establecimiento de un proceso de soporte para la universidad que pronto será certificado bajo ISO 9001:2015. Parte de la gestión eficiente de recursos se da a través de la plataforma de gestión de información llamada SIGELAB, la cual a su vez sirve como un gran brochure de servicios para la región. El sistema cuenta con una red de laboratorios descentralizados y otros centralizados. Estos últimos actúan como CoreLabs donde tecnología de punta permite apalancar investigación de alto nivel y servicios estratégicos para la industria de la región. El primero de estos CoreFacilities es el laboratorio Bionalitics, dotado con tecnología de punta para la caracterización molecular a través de detección con espectroscopía de masas de alta resolución, financiado a través de recursos del SGR.

REFERENCIAS

[1] Resolución 067 del Consejo Superior de la Universidad del valle, Por la cual se promulga la política institucional de laboratorios. 23 de Septiembre de 2020.

[2] Acuerdo 012 del Consejo Superior del Valle, Por la Cual se crea el Sistema Institucional Integrado de Laboratorios. 23 de Septiembre de 2020.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CATALIZADORES ACTIVOS EN LA OBTENCIÓN DE AMINOCOMPUESTOS

Doris Ruiz,^{1*} Carolina Quezada,¹ Karen Morales,¹ André Rosa Martins,^{2a} Luciene Santos Carvalho.^{2b}

¹Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Concepción. Concepción, Chile.

²Instituto Federal da Bahia, ^{2a}Porto Seguro, ^{2b}Camaçari, Bahia, Brasil.

*doruiz@udec.cl

PALABRAS CLAVES: Aminación Reductiva, Catálisis, Aminocompuestos

INTRODUCCIÓN

La reacción de Aminación Reductiva mediante una vía catalítica surge como una alternativa prometedora. Hasta ahora son muy pocos los resultados publicados utilizando catálisis heterogénea para la producción de aminas primarias mediante un proceso que utilice NH₃ como fuente de nitrógeno y que sea amigable con el medio ambiente.

MÉTODOS

El estudio contempla la síntesis, caracterización y estudio de la naturaleza metálica, el reductor (NaBH₄/H₂) y la fase activa en la aminación reductiva en reactor batch. La caracterización de Pt, Rh(Na), Rh(H₂) y Cu en sílice se realizó mediante adsorción-desorción de N₂, TEM, SEM-EDS, Quimisorción de CO, DRX y TPR.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La actividad catalítica se relaciona con un carácter bifuncional, relacionado con la exposición de la fase metálica superficial y con el carácter ácido de los materiales que afecta la actividad y selectividad en la aminación de ciclohexanona hacia ciclohexilamina.

El carácter hidrogenante, previamente ensayado en hidrogenación de moléculas test, permitió asociar que los metales nobles catalizan la aminación mediante una vía inicial de reducción, hidrogenando el sustrato a ciclohexanol para formar ciclohexilamina, sin embargo, una sobreaminación puede generar la formación minoritaria de una amina secundaria. De acuerdo a los resultados de conversión, pseudoconstantes cinéticas y a los niveles TOF, se concluye que el catalizador Rh/SiO₂(H₂) presentó la mayor actividad catalítica, seguido por Rh/SiO₂(Na), Pt/SiO₂ y finalmente Cu/SiO₂. Para el catalizador Rh/SiO₂(H₂) la conversión fue de un 99% y el TOF de 157 h⁻¹. Los niveles de selectividad hacia ciclohexilamina a las 24 h varió de 96 a 100%.

REFERENCIAS

- [1] Sharath R. Kirumakki, Maria Papadaki, Komandur V.R. Chary, N. Nagaraju. Reductive amination of cyclohexanone in the presence of cyclohexanol over zeolites H β and HY. *J. Mol. Catal. A: Chem.* 2010, 321, 1–2, 15-21.
- [2] Doris Ruiz, Atte Aho, Päivi Mäki-Arvela, Narendra Kumar, Hector Oliva, Dmitry Yu. Murzin. Direct Amination of Dodecanol over Noble and Transition Metal Supported Silica Catalysts. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2017, 56, 45, 12878–12887.



NEUROPROTECTIVE EFFECT OF TERPENOIDS RECOVERED FROM OLIVE LEAVES BY ADSORBENT-ASSISTED-SFE

Zully J. Suárez-Montenegro¹, Gerardo Álvarez-Rivera¹, José David Sánchez-Martínez¹, Rocío Gallego¹, Alberto Valdés¹, Fabián Parada-Alfonso, Elena Ibáñez^{1*}, Alejandro Cifuentes¹.

1. Foodomics Laboratory, Institute of Food Science Research (CIAL-CSIC)
2. Grupo de Investigación en Química de Alimentos, Universidad Nacional de Colombia

PALABRAS CLAVES: Terpenes, neurodegeneration, olive leaves

INTRODUCCIÓN

Olive leaves are considered an important by-product in the olive oil industry and a promising natural source of bioactive compounds such as terpenoids (1,2). In this work, an innovative adsorbent-assisted SFE, as well as chemical characterization and evaluation of the neuroprotective potential of olive leaves extracts, were developed.

MÉTODOS

The extraction/adsorption was performed at 30 MPa, 60°C, CO₂(g) flow (9 L/min), kinetic mode, and different commercial adsorbents. Chemical characterization by GC-qTOF-MS and in vitro antioxidant (ABTS), anti-inflammatory (LOX) and anti-acetylcholinesterase were applied for 32 extracts. Anti-butrylcholinesterase and blood-brain barrier tests were performed to the most promissory fraction.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

The silica-based materials are suitable adsorbents to partially retain polyunsaturated C10 and C15 terpene families; aluminum oxide increases C20 recoveries, whereas crystalline zeolites favors C30 terpenes recoveries. GC-QTOF-MS analysis showed the presence of cymenol (C10), caryophyllene oxide (C15), α -tocopherol (C20), and erithrodiol, uvaol and β -amyryn (C30) as main terpenes in OLE. The multivariate analysis suggests that the presence of pentacyclic triterpenes seemed to be correlated to the neuroprotective activity of obtained fractions. Sea sand adsorbate exhibited the highest neuroprotective effect than other fractions with IC₅₀ (μ g/mL) of 144.43 \pm 29.11, 183.82 \pm 22.47, 82.59 \pm 1.08, and 104.82 \pm 11.40 for anti-AChE, anti-BchE, antioxidant and anti-inflammatory activities, respectively. PAMPA-BBB showed a higher permeability of α -tocopherol. The main achievement of this work was to propose with scientific support the olive leaves as a source of neuroprotective potential fractions, using a green and sustainable extraction/adsorption technique. The current study is especially interesting and suitable for the revalorization of olive by-products. s graduales al plan de proyecto a uno más adecuado a los resultados.



QUÍMICA AMBIENTAL Y AGRÍCOLA

ILICL-121

ADSORPTION OF TRICLOSAN ON CARBON MATERIALS FOR ITS DISPOSAL OF CONTAMINATED WATERS

Lázaro Adrián González Fernández,^{1*} Nahúm Andrés Medellín Castillo,¹ Raúl Ocampo Pérez,¹ Héctor Hernández Mendoza.²

¹Universidad Autónoma de San Luis Potosí

²Instituto de Investigación de Zonas Desérticas

*lazaroadrian1995@gmail.com

KEY-WORDS: Adsorption Triclosan Carbon Water

INTRODUCTION

Triclosan is a powerful antibacterial and fungicidal agent. If ingested, it can cause serious illness. Previous results have shown that triclosan has a high toxicity in certain aquatic organisms. Due to its extensive use, triclosan has been detected in human plasma, breast milk and in the urine.

METHODS

Adsorption has been shown to be a promising and effective method of removing triclosan from water, but there are few studies about the use of materials that are proposed as sorbents for the treatment of triclosan-contaminated water.

RESULTS AND CONCLUSIONS

The characterization of these materials by physisorption of N₂ showed that Norit activated carbon has the largest surface area, that Norit and F400 carbons are microporous and that Darco carbon contains both micropores and mesopores. Kinetic studies shown necessary contact time values for activated carbons close to 3 hours and for carbon nanotubes of around 6 hours. Adsorption isotherms at different pH values showed that carbon nanotubes have a higher adsorption capacity than the three activated carbons studied. SEM/EDX analyzes showed the presence of the chlorine element in materials saturated with TCS, which corroborates the adsorption of this contaminant in the studied adsorbents.

REFERENCES

- [1] Singer, H., Müller, S., Tixier, C., & Pillonel, L. (2002). Triclosan: occurrence and fate of a widely used biocide in the aquatic environment: field measurements in wastewater treatment plants, surface waters, and lake sediments. *Environmental Science & Technology*, 36(23), 4998–5004.
- [2] Franz, S., Altenburger, R., Heilmeier, H., & Schmitt-Jansen, M. (2008). What contributes to the sensitivity of microalgae to triclosan? *Aquatic Toxicology*, 90(2), 102–108
- [3] Allmyr, M., McLachlan, M. S., Sandborgh-Englund, G., & Adolfsson-Erici, M. (2006). Determination of triclosan as its pentafluorobenzoyl ester in human plasma and milk using electron capture negative ionization mass spectrometry. *Analytical Chemistry*, 78(18), 6542–6546.



ADSORPTION OF TRICLOSAN ON CARBON MATERIALS FOR ITS DISPOSAL OF CONTAMINATED WATERS

Lázaro Adrián González Fernández¹, Nahúm Andrés Medellín Castillo¹, Raúl Ocampo Pérez¹, Héctor Hernández Mendoza²,

1. Universidad Autónoma de San Luis Potosí
2. Instituto de Investigación de Zonas Desérticas

PALABRAS CLAVES: Adsorption Triclosan Carbon Water

INTRODUCTION

Triclosan is a powerful antibacterial and fungicidal agent. If ingested, it can cause serious illness. Previous results have shown that triclosan has a high toxicity in certain aquatic organisms. Due to its extensive use, triclosan has been detected in human plasma, breast milk and in the urine.

METHODS

Adsorption has been shown to be a promising and effective method of removing triclosan from water, but there are few studies about the use of materials that are proposed as sorbents for the treatment of triclosan- contaminated water.

RESULTS AND CONCLUSIONS

The characterization of these materials by physisorption of N₂ showed that Norit activated carbon has the largest surface area, that Norit and F400 carbons are microporous and that Darco carbon contains both micropores and mesopores. Kinetic studies shown necessary contact time values for activated carbons close to 6 hours and for carbon nanotubes of around 12 hours. Adsorption isotherms at different pH values showed that carbon nanotubes have a higher adsorption capacity than the three activated carbons studied. SEM/EDX analysis showed the presence of the chlorine element in materials saturated with TCS, which corroborates the adsorption of this contaminant in the studied adsorbents.

REFERENCES

1. Singer, H., Müller, S., Tixier, C., & Pillonel, L. (2002). Triclosan: occurrence and fate of a widely used biocide in the aquatic environment: field measurements in wastewater treatment plants, surface waters, and lake sediments. *Environmental Science & Technology*, 36(23), 4998–5004.
2. Franz, S., Altenburger, R., Heilmeier, H., & Schmitt-Jansen, M. (2008). What contributes to the sensitivity of microalgae to triclosan? *Aquatic Toxicology*, 90(2), 102–108
3. Allmyr, M., McLachlan, M. S., Sandborgh-Englund, G., & Adolfsson-Erici, M. (2006). Determination of triclosan as its pentafluorobenzoyl ester in human plasma and milk using electron capture negative ionization mass spectrometry. *Analytical Chemistry*, 78(18), 6542–6546.



OLIGO (PHENYLENE VINYLENE)-GRAFTED TiO₂ PHOTOCATALYST FOR VISIBLE-LIGHT DRIVEN CONTROL OF 17β ESTRADIOL IN WATER

Mauricio Acelas, Nelson J. Castellanos, César A. Sierra

KEYWORDS: Oligo (phenylene vinylene); Photocatalysis; TiO₂-Sensitization; 17β-Estradiol

INTRODUCTION

Poultry production has been associated with the discharge of estrogens to streams and rivers through manure. Especial attention has been placed in 17β-estradiol (E2) for its physiological effects in living organisms, including humans.¹ Thus, visible light-driven photocatalytic processes stand out as promising alternatives to control estrogenic activity preserving water resources.²

METHODS

The grafting procedure comprised the cross-reaction between the trimethylsilylated TiO₂ (P25) and the oligo (phenylene vinylene) carboxylic acid substituent.³ FTIR, RAMAN, TGA, XRD, diffuse reflectance, fluorescence and N₂ adsorption/desorption isotherms were employed for characterization. E2 concentration was monitored by HPLC. A 3W white LED panel (400-700 nm) was used as irradiation source.

RESULTS AND CONCLUSIONS

The grafting of an oligo (phenylene vinylene) (OPV) onto TiO₂ was explored as a photocatalytic strategy to remove E2 from water. The performed characterization confirms the successful covalent grafting of the OPV onto the TiO₂ surface (0.049 mmol OPV/g catalyst) and the existence of a charge transfer mechanism where the OPV acts as a light-harvester to inject electrons into the TiO₂ conduction band. Indigo carmine was used as model pollutant to unveil a simultaneous oxidative/reductive degradation pathway along with an outstanding enhancement in stability/reusability, compared to the control OPV-TiO₂ adsorbed material. The photocatalytic experiments upon E2 solutions (2.5 μg/mL) displayed a 97% decrease in its concentration after seven minutes of reaction. Moreover, a photocatalytic mechanism was validated considering no photolysis or dark reactions were observed. It was confirmed that the prepared TiO₂/OPV photocatalyst serves as a model water treatment to rapidly reduce the concentration of E2 in water under visible light.

REFERENCES

- 1) Adeel, M.; Song, X.; Wang, Y.; Francis, D.; Yang, Y. Environmental Impact of Estrogens on Human, Animal and Plant Life: A Critical Review. *Environ. Int.* 2017, 99, 107–119. <https://doi.org/10.1016/j.envint.2016.12.010>.
- 2) Upreti, A. R.; Li, Y.; Khadgi, N.; Naraginti, S.; Zhang, C. Efficient Visible Light Photocatalytic Degradation of 17α-Ethinyl Estradiol by a Multifunctional Ag-AgCl/ZnFe₂O₄ Magnetic Nanocomposite. *RSC Adv.* 2016, 6 (39), 32761–32769. <https://doi.org/10.1039/c6ra00707d>.
- 3) Acelas, M.; Sierra, C. A. The Oligomer Approach: An Effective Strategy to Assess Phenylene Vinylene Systems as Organic Heterogeneous Photocatalysts in the Degradation of Aqueous Indigo Carmine Dye. *J. Photochem. Photobiol. A Chem.* 2021, 405, 112980. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2020.112980>.

ACKNOWLEDGEMENTS

Authors acknowledge financial support from Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación de Colombia through the Bicentenario Scholarship Program.



OCCURRENCE AND DISTRIBUTION OF PERSISTENT ORGANIC POLLUTANTS (POPs) IN THE ATMOSPHERE OF THE ANDEAN CITY OF MEDELLIN, COLOMBIA

Boris Santiago Avila¹, Diana Pemberthy M¹, Gustavo A. Peñuela¹, Andrés Ramírez²

¹Grupo de Diagnóstico y Control de la Contaminación (GDCON), Universidad de Antioquia, Facultad de Ingeniería, Sede de Investigación Universitaria (SIU), Medellín, Colombia. ²Programa de las Naciones Unidas para el Desarrollo, Proyecto PNUD-COL 98842/94749, Bogotá DC, Colombia.

boris.avila@udea.edu.co

KEYWORDS : PCDD/Fs, PBDEs, HBCDDs, PFASs.

INTRODUCTION

Passive air sampling was used to evaluate organochlorine pesticides (OCPs), polychlorinated biphenyls (PCBs), polybrominated diphenyl ethers (PBDEs), polybrominated biphenyls (PBBs), hexabromocyclododecanes (HBCDDs), polychlorinated dibenzo-p-dioxins (PCDDs), polychlorinated dibenzofurans (PCDFs), and PFASs in the atmosphere of Medellín, Colombia. This was in accordance with a special initiative of the Global Monitoring Plan¹.

MATERIALS AND METHODS

Passive air samples were deployed between 2017 and 2018 at Medellín (6°15'38"N 75°34'04"W), Colombia. The sampling campaigns were conducted for three months, giving four sampling quarters throughout each sampling year, to the exception of PCDD/Fs and dl PCBs in which the four PUFs by year were combined^{2,3}.

RESULTS AND DISCUSSION

In general, a slight tendency to increase the air concentrations of PBDEs, HBCDDs, dl PCBs, PCDDs, PCDFs, PFOS, and PFOA in the year 2018 with respect to 2017 were observed. Also, constant concentrations in air were observed of pollutants banned in Colombia many years ago, such as DDT isomers, in contrast with a slight decrease in some pollutants such as α -endosulfan. The highest concentration of OCPs was the pentachlorobenzene (76.9 pg·m⁻³) in the quartile 2017-Q3, besides, its concentration increased 3.5 times more respect to the initial concentration. On the other hand, the highest levels of PBDEs and HBCDD-isomers ($\Sigma 10$ PBDEs, 38.8 pg·m⁻³ and $\Sigma 3$ HBCDDs isomers, 105.0 pg·m⁻³) were observed in 2018-Q1. Finally, the results provided a general vision of the air concentrations of chlorinated, brominated, and fluorinated pollutants in Medellín, Colombia, and can be a starting point for the identification of local sources and monitoring of the release of these pollutants in the city.

REFERENCES

- (1) Magulova, K.; Priceputu, A. Global Monitoring Plan for Persistent Organic Pollutants (POPs) under the Stockholm Convention: Triggering, Streamlining and Catalyzing Global POPs Monitoring. *Environ. Pollut.* 2016, 217, 82–84.
- (2) Bogdal, C.; Scheringer, M.; Abad, E.; et al. Worldwide Distribution of Persistent Organic Pollutants in Air, Including Results of Air Monitoring by Passive Air Sampling in Five Continents. *TrAC - Trends Anal. Chem.* 2013, 46, 150–161.
- (3) Rauert, C.; Harner, T.; Schuster, J. K.; et al. Air Monitoring of New and Legacy POPs in the Group of Latin America and Caribbean (GRULAC) Region. *Environ. Pollut.* 2018, 243, 1252–1262.



Rh-CATALYZED AMINATION OF CYCLOHEXANONE: THROUGHPUT STUDY ON THE REACTION CONDITIONS

Raydel Manrique¹, Maray Ortega¹, Romel Jiménez¹, Luis E. Arteaga-Pérez^{1,2}

¹Laboratory of Thermal and Catalytic Processes., Wood Eng. Department, University of Bío-Bío, Concepción, Chile;

²Unidad de Desarrollo Tecnológico, Coronel, Chile. Laboratorio de Carbono y Catálisis, Universidad de Concepción, Concepción, Chile.

PALABRAS CLAVES: Catalytic amination; Pd/C; Cyclohexanone

INTRODUCTION

The use of rhodium-catalyzed reductive amination of biomass-derived ketones is a viable alternative to reduce the environmental risks associated to the conventional technologies for producing secondary amines¹. Herein, we investigate the Rh/C as a catalyst for cyclohexanone amination via throughput study involving temperature, amine concentration and hydrogen donor availability.

MATERIALS AND METHODS

Chemical and textural properties of 5% Rh/C (Alfa-Aeser) were studied by TEM, XRD, SEM-EDX and TPR techniques. Reactions were carried out in a ReactiTherm™ block using reinforced glass autoclave reactors. The effect of several operation parameters (i.e., catalyst mass, reaction temperature, amine concentration and H₂ availability) was studied.

RESULTS AND DISCUSSION

SEM-EDX and TEM show a homogeneous particle distribution without agglomerations with mean cluster sizes of 2.5 nm. Combining XRD and TPR, we found the presence of metallic Rh on the catalyst surface. The proposed reaction pathway is consistent with a condensation of the cyclohexanone (CyO) with the aniline (PhNH₂), followed by a disproportionation of the imine to the secondary amines. The highest activity (X_{CyO} = 73% and X_{PhNH₂} = 74%) was achieved at 140 °C, using 0.2 mol/L CyO, 0.2 mol/L PhNH₂, 4 eqs. NaCO₂H (hydrogen donor) and 7 % mol Rh/C, respectively. Selectivity to secondary amines under these reaction conditions was 72%, which is in the same order as that previously reported by our group but using Pd/C as catalysts². In addition, this analysis allows inferring that the disproportionation is occurring on Rh⁰ but favoring the hydrogenation over the dehydrogenation steps.

REFERENCES

- (1) Domine, M. E.; Hernández-Soto, M. C.; Pérez, Y. Development of Metal Nanoparticles Supported Materials as Efficient Catalysts for Reductive Amination Reactions Using High-Throughput Experimentation. *Catal. Today* 2011, 159 (1), 2–11. <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2010.08.011>.
- (2) Arteaga-Pérez, L. E.; Manrique, R.; Castillo-Puchi, F.; Ortega, M.; Bertiola, C.; Pérez, A.; Jiménez, R. One-Pot Amination of Cyclohexanone-to-Secondary Amines over Carbon-Supported Pd: Unraveling the Reaction Mechanism and Kinetics. *Chem. Eng. J.* 2021, 417 (December 2020). <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.129236>.



MAGNETIC MODIFICATION OF THE *Stenocereus griseus* AND *Melocactus sp* MUCILAGE, THROUGH CROSSLINKING METHOD.

Jeny Catalina Nitola Orduz, Lucia Marlen Moreno Bastidas
Basic Sciences Faculty, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Colombia

jeny.nitola@uptc.edu.co

KEYWORDS: Mucilage, magnetization, water treatment

INTRODUCTION

Water is one of the essential resources for the survival and development of civilization. Certainly there are methods that are useful and effective in water treatment, but not all of these methods and technology are easily accessible for all. We are studying a feasible alternative for water treatment.

METHODS

We used two kinds of mucilage that were modified with magnetite. A crosslinking method was carried out in which two materials were obtained. Their function in the water treatment was tested and each material was characterized through X-ray Diffraction and vibrating sample magnetometer.

RESULTS AND CONCLUSIONS

The magnetic modification of the material is demonstrated. It is shown that the magnetic properties of the material decrease the required sedimentation time in water treatment, which would be positive in a water treatment plant.

REFERENCES

- (1) Hizam Mohamed (2018); Synthesis of Magnetic Cellulose as Flocculante for Pre-Treatment of Anaerobically Treated Palm Oil Mill Effluent. CHEMICAL ENGINEERING TRANSACTION. Vol 63.
- (2) Guo Chen (2013), Magnetic Flocculant for High Efficiency Harvesting of Microalgal Cells; Department of Plant and Microbial Biology of California, Berkeley, California.
- (3) Vijayaraghavan G., S. T. (2011) Application of plant based coagulants for wastewater treatment.



OCURRENCIA Y DEPURACIÓN DE CONTAMINANTES EMERGENTES TIPO PRODUCTOS FARMACÉUTICOS Y DE CUIDADO PERSONAL EN AGUAS RESIDUALES DE LA UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE PEREIRA (UTP), COLOMBIA.

Juan Pablo Arrubla Vélez, Diego Paredes Cuervo, Janeth Cubillos Vargas, Juliana Peña Gómez.
Grupo de Investigación Agua y Saneamiento, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.
juanpablo77@utp.edu.co

PALABRAS CLAVES: CE, SPE, SPME, Humedales.

INTRODUCCIÓN

Se cuantificó contaminantes emergentes (CE) en agua residual de la UTP, optimizando las técnicas SPE, SPME/GC MS. Se evaluó la depuración de los CE en PTAR convencional y por humedales construidos con aireación controlada. Se ha propuesto una tecnología sostenible para disminuir la presencia de CE en el medio ambiente local.

MÉTODOS

El muestreo se realizó en PTAR de la UTP, se implementó un diseño experimental de tipo Box Behnken con el software Statgraphics. Se utilizó SPE con Strata X, SPME con fibra de PA y DVB/CAR/PDMS, se derivatizaron los analitos y se analizaron en un GC Shimadzu QP2010 Plus-MS QP2020.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se obtuvo un método GC-MS SCAN/SIM para la identificación de CE como ácido salicílico, metilparabeno, etilparabeno, propilparabeno, butilparabeno, paracetamol, ibuprofeno, naproxeno y diclofenaco. Para SPE se obtuvo recuperación $\geq 70\%$ en cartuchos Strata X, acondicionados con 3 mL de acetato etilo, 3 mL agua a pH 2, carga 300 mL de muestra, flujo 2 mL/min. Secado con N₂, elución con 2 mL x 3 de acetato de etilo:acetona (50:50), derivatización con 100 μ L de BSTFA+TMCS 99:1 a 60°C por 45 min. Para SPME (Recuperación $\geq 70\%$) en modo SPME-DI con fibras (PA) y (DVB/CAR/PDMS) volumen 5mL, 80min, secado en N₂, derivatización idéntica a SPE.

Se cuantificaron concentraciones trazas (ppb) de los CE en aguas residuales, persistiendo en la PTAR convencional. Se implementaron humedales construidos con aireación controlada como opción de tratamiento sostenible para la remoción de diferentes contaminantes emergentes, demostrando ser una opción viable, económica y sostenible para el entorno local.

REFERENCIAS

Basaglia, G.; et al. Optimization of a SPME/GC/MS Method for the Simultaneous Determination of Pharmaceuticals and Personal Care Products. *Chromatographia*. [Online] 2012, vol. 75, n° 7-8. <https://doi.org/10.1007/s10337-012-2207-7> (06 de feb. de 2020).

Peña-Álvarez, A.; Castillo-Alanís, A. Identificación y cuantificación de contaminantes emergentes en aguas residuales por microextracción en fase sólida-cromatografía de gases-espectrometría de masas (MEFS-CG-EM). *Rev. Espec. En Ciencias Químico-Biológicas*. [Online] 2015, vol. 18, n° 1. <https://doi.org/10.1016/j.recqb.2015.05.003> (06 de feb. de 2020).

Bedoya-Ríos, D. F.; et al. Ocurrencia de contaminantes emergentes en el ciclo urbano del agua, caso Bogotá. *Repositorio PUJ*. [Online] 2017, pp.1-17. https://repository.javeriana.edu.co/bitstream/handle/10554/40186/Enr%C3%ADquezHidalgoAndresMauricio2018_anejo2.pdf?sequence=3&isAllowed=y (06 de feb. de 2020).



IMPACTO DE LAS EMISIONES VEHICULARES EN RESIDENCIAS CIRCUNDANTES A VÍAS DE ALTO TRÁFICO EN UNA CIUDAD ANDINA

David Chuquer-Sola,^{1,4*} Santiago Ampudia,¹ Francisco Ramírez,² Carolina Puertas,¹ Valeria Díaz-Suarez,³ Patricio Espinoza-Montero.¹

¹Escuela de Ciencias Químicas, Pontificia Universidad Católica del Ecuador, Quito 170525, Ecuador.

²Facultad de Arquitectura, Diseño y Arte, Pontificia Universidad Católica del Ecuador, Quito 170525, Ecuador.

³Air Quality Monitoring Network, Secretariat of the Environment, Municipality of the Metropolitan District of Quito, Quito, Ecuador.

⁴Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Central del Ecuador, Quito 170521, Ecuador.

*dchuquer295@puce.edu.ec

PALABRAS CLAVE: Contaminación del aire urbano; Calidad del aire a filo de calle; Emisiones vehiculares, Correlación cruzada; Ciudad Andina.

INTRODUCCIÓN

La concentración de contaminantes de criterio tanto a filo de calle como en residencias cercanas a vías de alto tráfico, en muchos casos, excede los valores reportados por los Sistemas Estatales de Calidad del Aire (SAQS) debido a la acumulación de contaminantes en los cañones urbanos.

MÉTODOS

Se llevaron a cabo mediciones de campo con monitores continuos a filo de calle y en residencias adyacentes a diez vías de alto tráfico en Quito-Ecuador (2 815 metros sobre el nivel del mar) entre marzo y junio de 2018. La baja eficiencia de los motores de combustión interna provoca un aumento en la emisión de partículas y óxidos de nitrógeno provenientes de fuentes móviles.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los resultados encontrados mostraron incumplimiento con las Regulaciones Nacionales y las recomendaciones de la Organización Mundial de la Salud para la calidad del aire en términos de dióxido de azufre y partículas de tamaño menor a 10 μm . Además, se demostró que las concentraciones de monóxido de carbono y partículas menores de 2,5 μm son 40 y 13% más altas en comparación con las mediciones reportadas por el SAQS. El análisis de componentes principales y la correlación cruzada permitieron determinar que las partículas en interiores están directamente influenciadas por el tráfico de vehículos y las condiciones atmosféricas externas. Esta investigación se presenta como un caso de estudio relevante sobre el comportamiento de los contaminantes a filo de calle en ciudades de altura.

REFERENCIAS

- [1] Abhijith, K. V.; Kumar, P.; Gallagher, J.; McNabola, A.; Baldauf, R.; Pilla, F.; Broderick, B.; Di Sabatino, S.; Pulvirenti, B. Air Pollution Abatement Performances of Green Infrastructure in Open Road and Built-up Street Canyon Environments – A Review. *Atmos. Environ.* 2017, 162, 71–86. <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2017.05.014>.
- [2] Raysoni, A. U.; Armijos, R. X.; Weigel, M.; Echanique, P.; Racines, M.; Pingitore., N. E.; Li, W. W. Evaluation of Sources and Patterns of Elemental Composition of PM_{2.5} at Three Low-Income Neighborhood Schools and Residences in Quito, Ecuador. *Int. J. Environ. Res. Public Health* 2017. <https://doi.org/10.3390/ijerph14070674>.



SLICL-123

USO DE LODOS GALVÁNICOS COMO MATERIA PRIMA EN LA INDUSTRIA CERÁMICA PARA LA MITIGACIÓN DE LA CONTAMINACIÓN AMBIENTAL

Jhon Jairo Castañeda Bocanegra, Gloria Ivonne Cubillos Gonzalez, Edgar Espejo Mora
Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia

jjcastanedab@unal.edu.co

PALABRAS CLAVES: Arcilla, lodo, proceso, residuo.

INTRODUCCIÓN

Los lodos de procesos galvánicos por su alto contenido de Cr, Cu y Ni clasificados como residuos peligrosos, constituyen un gran peligro ambiental. Son un subproducto de la industria galvánica para el cual actualmente no existe ningún tipo de aprovechamiento industrial, por lo que se acumulan en celdas de seguridad.

MÉTODOS

Lodo galvánico adicionado en diferentes concentraciones (2%, 5% y 8% en peso) a arcilla de elaboración de cerámica. Las piezas se obtienen por dos métodos de conformado: prensado en seco y extrusión. Se estudian dos ciclos de cocción, temperatura máxima de 1150°C: Corto de 34 minutos; largo de 42 horas.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los resultados muestran que a medida que incrementa el porcentaje de lodo adicionado a la pieza cerámica, decrece la resistencia a la flexión y la contracción lineal del material. Por el contrario, la absorción de agua y las pérdidas por calcinación incrementan. Las coordenadas colorimétricas para las muestras obtenidas por prensado en seco evidencian, que a mayor concentración de lodo el color cambia de un tono crema a un tono verdoso; mientras que, en las muestras obtenidas por extrusión el color cambia de un tono crema a un tono café oscuro. En cuanto a la capacidad encapsulante de la arcilla cocida, medida a partir del método TCLP, se observa que a medida que incrementa el porcentaje de lodo, mayor es la cantidad de metales extraídos de la pieza cerámica en el siguiente orden: Cr > Cu > Ni y que ninguno de los extractos superó el límite de 5 mg Cr/L.

REFERENCIAS

Ministerio de Ambiente, “Decreto 4741,” Minist. Ambient. y Desarro. Territ., no. 4741, p. 30, 2005. UE, “Directiva 2008/98/CE del Parlamento Europeo y del Consejo, sobre los residuos y por la que se derogan determinadas Directivas,” Parlam. p. 28 pags, 2008.

O. D Ozdemir , S Piskin, “Characterization and environment risk assessment of galvanic sludge.,” J. Chem. Soc. Pakistan, vol. 34, pp. 1032–1036, 2012.

J.J Castañeda, E Espejo, G Cubillos., “Encapsulation in ceramic material of the metals Cr , Ni , and Cu contained in galvanic sludge via the solidification / stabilization method,” J. Environ. Chem. Eng. pp. 3834–3843, 2017.



EFFECTO DEL ÁCIDO 1-NAFTALENACÉTICO SOBRE ALGUNOS COMPONENTES DE RENDIMIENTO EN YUCA (*Manihot esculenta Crantz*) VARIEDAD MCol 2066.

Pardo Plaza, Yuri Janio¹; Cantero Guevara, Miriam²; Ávila Arciria, Jhonatan¹; Miranda Cardona, Cristian¹; +Segura Delgado Alonso¹

¹Grupo de Bioquímica y de Biotecnología del departamento de Química. Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Córdoba, Montería, Colombia.

²Grupo de Investigaciones Microbiológicas y Biomédicas de Córdoba, Programa de Bacteriología. Universidad de Córdoba, Montería, Colombia.

cmelengca@gmail.com

PALABRAS CLAVE: yuca, materia seca, almidón

INTRODUCCIÓN

Las raíces de yuca se usan en la alimentación humana y animal, como raíces frescas o transformadas industrialmente¹. En algunos países y zonas colombianas la producción ha disminuido, debido a que no se cuenta con la tecnología y conocimientos suficientes para contribuir a la demanda actual de yuca².

El objetivo fue evaluar el efecto del ácido 1-naftalenacético sobre algunos componentes de rendimiento en yuca variedad MCol 2066 (chirosa) en el municipio de Ciénaga de Oro, Departamento de Córdoba.

MÉTODOS

Se estableció un cultivo de yuca, variedad MCol 2066 (chirosa), obteniendo esquejes de 15 cm de longitud. Se aplicaron tres tiempos de inmersión (5, 10, 20 min), en cuatro concentraciones de ácido 1-naftalenacético (0, 100, 200, 300 ppm) y se evaluaron algunos componentes de rendimiento del cultivo de yuca.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Las variables evaluadas: porcentaje de almidón, materia seca y masa fresca de raíces presentaron diferencias significativas entre tratamientos. Los valores más altos se observaron en el tratamiento a 20 min de inmersión en 200 ppm de ácido 1-naftalenacético para las variables, almidón (45,56%), materia seca (51,6%) y masa fresca de raíz (73.270 kg/ha). No se encontraron diferencias estadísticas para diámetro, longitud y número de raíces por planta.

A las condiciones del estudio el tratamiento aplicado a 20 min de inmersión en 200 ppm de ácido 1-naftalenacético, fue el mejor inductor para aumentar el rendimiento del cultivo de yuca, debido a que influyó positivamente, mostrando mejores resultados en las variables porcentaje de almidón, materia seca y masa fresca de la raíz, lo cual podría ser favorable para mejorar el rendimiento del cultivo de yuca variedad MCol 2066 (chirosa) en la región.

REFERENCIAS

1. Dissanayake, L.; Perera, P.; Attanayaka, T.; Heberle, E.; Jayawardhana, Early. Development of Direct Embryos in the Cultured Anthers of *Manihot esculenta Crantz*. *Plants* 2020, 9 (10), 1315.
2. Serrano, L.; Martos, J.; RENEDO, V. Influencia de cuatro sistemas de laboreo en las propiedades físicas de un Fluvisol y en el balance energético en cultivos de raíces y tubérculos. *Universidad & Ciencia* 2017, 6 (1), 65-81.



INFLUENCIA DE PARÁMETROS FÍSICOQUÍMICOS DE CALIDAD DEL AGUA EN LA FORMACIÓN DE TRIHALOMETANOS Y ÁCIDOS HALOACÉTICOS EN AGUA DE PISCINA

William A Hernández-Herrera^{abc}, Olga I Vallejo-Vargas^{abc}, Carlos H Montoya-Navarrete^{abc}, Leonardo Beltrán-Angarita^{ade}

- a. Grupo de Estudio del Recurso Hídrico, Escuela de Química, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia. B. Maestría en Ciencias Químicas, Escuela de Química, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia. C. Laboratorio de Análisis de Aguas y Alimentos, Escuela de Química, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia. D. Facultad Ciencias de la Salud, Unidad Central del Valle del Cauca, Colombia. E. Facultad de Medicina, Fundación Universitaria de las Américas, Colombia.

lbeltran@utp.edu.co

PALABRAS CLAVES: Trihalometanos; Ácidos Haloacéticos; Piscinas

INTRODUCCIÓN

Parámetros como el carbono orgánico, dosis de cloro, pH, alcalinidad, metales, poco cambio del agua de las piscinas favorecen la formación de trihalometanos (THM's) y ácidos haloacéticos (HAA's). En este estudio nos propusimos determinar la influencia de parámetros fisicoquímicos en la formación de THM's y HAA's en aguas de piscinas.

MÉTODOS

25 muestras de agua de piscinas fueron incluidas en el estudio, los parámetros de calidad del agua se determinaron siguiendo el Standard Methods Ed23, niveles de THM's y HAA's fueron determinados mediante Cromatografía de gases-ECD. Análisis de correlación fueron realizados en el SPSSv23.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

El promedio de la concentración de THM's y HAA's encontrado fue de $41,61 \pm 21,5 \mu\text{g/L}$ y $12675 \pm 7320 \mu\text{g/L}$; respectivamente. Los compuestos con mayores niveles fueron Cloroformo ($21,5 \pm 5 \mu\text{g/L}$), Ácido Tricloroacético ($7188 \pm 2670 \mu\text{g/L}$) y Ácido Bromocloroacético ($5296 \pm 3661 \mu\text{g/L}$). El SUVA se encontró asociado con los niveles de THM's (coeficiente 0,36 $p=0,03$). Los niveles de ácidos haloacéticos son superiores a los reportados para países como US, Italia, Alemania, Canada y Francia y ciudades como Medellín. Las concentraciones encontradas en las muestras evaluadas indican la necesidad de realizar más estudios para prevenir su formación y la posible incorporación de un límite máximo permitido en la normatividad nacional y establecer algoritmo predictivo de formación.

REFERENCIAS

- [1] World Health Organization, "Guidelines for safe recreational water environments Swimming pools and similar environments," WHO Libr., vol. 2, p. 146, 2006.
- [2] Carter, R.A.A.; Joll, C.A. Occurrence and formation of disinfection by-products in the swimming pool environment: A critical review. J. Environ. Sci. 2017, 58, 19–50. H. G. Gorchev and G. Ozolins, WHO Guidelines for Drinking Water Quality, 4th ed., vol. 38, no. 3. Ginebra: WHO Library Cataloguing, 2011.
- [3] Lara, P.; Ramírez, V.; Castrillón, F.; Peñuela, G.A. Presence of Disinfection Byproducts in Public Swimming Pools in Medellín, Colombia. Int. J. Environ. Res. Public Health 2020, 17, 4659. <https://doi.org/10.3390/ijerph17134659>



GENERACIÓN DE PRODUCTOS CON VALOR AGREGADO A PARTIR DE LA TRANSFORMACIÓN DE BIOMASA RESIDUAL

Beatriz Pava Gómez, Ariel M. Sarotti, Rolando A. Spanevello y Alejandra G. Suárez.
Instituto de Química Rosario. CONICET-UNR, Facultad de Ciencias Bioquímicas y Farmacéuticas. Universidad Nacional de Rosario. Suipacha 531, (S2002LRK) Rosario, Argentina,

pavagomez@iquir-conicet.gov.ar

PALABRAS CLAVE: Biomasa, levoglucosenona, carbón activado

INTRODUCCIÓN

Es bien sabido la importancia que tiene el cultivo de soja como actividad económica en Argentina, comúnmente es usada para la extracción de aceites, proceso en que se genera como subproducto cáscara de soja. Nuestro trabajo se centra en ofrecer una alternativa bioeconómica para el uso de este residuo.

MÉTODOS

La pirólisis convierte la biomasa sólida en carbón, bio-aceite, junto con gases carbonatados y no condensables. Se realiza una la pirólisis selectiva de la cáscara de soja, con el propósito de degradar su cadena polimérica, para generar productos químicos de valor agregado y carbón con propiedades adsorptivas.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos demuestran que el pre-tratamiento del material a pirolizar con cantidades catalíticas de H₃PO₄, a temperaturas entre 270 y 350 °C genera un condensado formado por bio-aceite (entre un 15 y 40%) y carbón (entre un 40 y 60%). La composición del material orgánico se analizó por RMN, siendo el componente principal levoglucosenona (1). Por otra parte, se analizó el carbón para su potencial empleo como carbón activado, demostrando tener un buen poder de adsorción, determinado por ensayo con azul de metileno (AM), hasta alcanzar equilibrio de adsorción-desorción. Estos carbones también fueron sometidos a un proceso de activación en presencia de ZnCl₂, KOH y H₃PO₄, a 400 °C en atmósfera de nitrógeno. Demostrando una mejora de su capacidad de adsorción de 90 mg AM / g Carbón a 490 mg AM / g Carbón, para los que fueron pretratados con KOH en con una relación 1:1 en peso.

REFERENCIAS

- 1- Comba, M. B.; et al. Eur. J. Org. Chem., 2018, 590-604.
- 2- B. Hu, et al. J. Energy Chem. 2020, 43, 78–89.
- 3- A. Zubrik, M. et al. J. Clean. Prod. 2017, 143, 643–653.



SÍNTESIS DE REDES METALORGÁNICAS (MOFs) FUNCIONALIZADAS CON ÓXIDO DE GRAFENO PARA LA REMOCIÓN DE Ba, Cd Y Pb EN AGUA

Ivon Esther Valenzuela Jaramillo
Universidad Federal de Pernambuco

IEVJ.18@GMAIL.COM

PALABRAS CLAVES: ZIF-8@GO, HKUST-1@GO, metales pesados, ICP-OES

INTRODUCCIÓN

La exposición crónica a metales pesados, incluso en pequeñas cantidades, puede contribuir a una mayor incidencia de enfermedades. Estos contaminantes presentes en el agua son un factor de riesgo para la población en general y, por tanto, un problema de salud pública por ello deben ser removidos del medio ambiente.

MÉTODOS

Síntesis y funcionalización de redes metalorgánicas con óxido de grafeno caracterización de los materiales obtenidos por FTIR, RAMAN, DRX Y SEM. Determinación de la concentración de los metales Ba, Cd y Pb utilizando ICP-OES Diseño experimental factorial para la determinación de variables que influyen en el porcentaje de remoción de los metales

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En esta investigación se obtuvieron dos híbridos HKUST-1@GO y ZIF-8@GO y se aplicaron en la remoción de metales pesados como Ba²⁺, Cd²⁺ y Pb²⁺ en agua. La formación de los híbridos se confirmó mediante SEM, DRX, RAMAN, FTIR y presentó porcentajes de remoción de bario, cadmio y plomo de 93.2%, 79.4% y 54.3% para HKUST-1@GO y 96.4%, 85.6% y 71.1% para ZIF-8@GO, respectivamente. Los cuales demostraron buena estabilidad y una alta capacidad para eliminar metales pesados de un ambiente acuoso. Según diseño factorial, el principal factor que influyó en la remoción de metales analizados fue el pH del medio usando ZIF-8@GO, y la concentración inicial de metal para remoción de Ba²⁺ y Cd²⁺ usando HKUST-1@GO

REFERENCIAS

SAMMANI R. et al. Performance of metal–organic frameworks for the adsorptive removal of potentially toxic elements in a water system: a critical review, RCD Advances, 2019.

MUXIN L. et al. Graphene Aerogel–Metal–Organic Framework–Based Electrochemical Method for Simultaneous Detection of Multiple Heavy-Metal Ions, Anal. Chem, v. 91, n. 1, p. 888–895, 2019.

MANOUSI N, et al. Extraction of Metal Ions with Metal–Organic Frameworks, Molecules, v. 24, n. 24, p. 4605, 2019.

CHOWDHURY T. et al. Removal of Arsenic(III) from Aqueous Solution Using Metal Organic Framework–Graphene Oxide Nanocomposite, Nanomaterials (Basel), v. 8, n. 12, p. 1062, 2018



ADSORCIÓN DEL GLIFOSATO EN DISOLUCIONES ACUOSAS UTILIZANDO ARCILLAS NATURALES IMPREGNADAS CON HIERRO

Yeyzon Javier Cruz¹, Ana María Montañez¹, Lisette Ruiz Bravo^{2*}, Mery Carolina Pazos Zarama^{1*}

¹Grupo de Investigación Desarrollo y Aplicación de Nuevos Materiales DANUM de la UPTC, Escuela de Ciencias Químicas, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja 150003, Colombia.

²Grupo de Investigación en Materiales, Ambiente y Desarrollo- MADE, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Universidad de la Amazonía, Calle 17 – diagonal 17 carrera 3F, Campus Porvenir, Florencia, Colombia.

lis.ruiz@udla.edu.co; carolina.pazos@uptc.edu.co

PALABRAS CLAVE : Adsorción, arcilla, impregnación, glifosato.

INTRODUCCIÓN

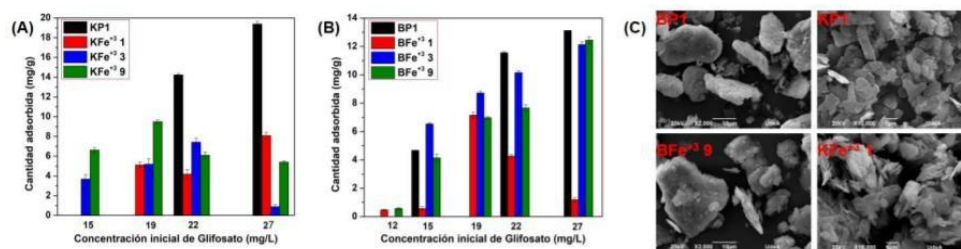
El glifosato es un herbicida muy utilizado; sin embargo, su detección en agua es un problema ambiental debido a su carácter como contaminante emergente [1-4]. Para su degradación se utilizan POAS sobre materiales con Fe [5]. En este estudio se evaluaron arcillas impregnadas con Fe para su adsorción.

MÉTODOS

La bentonita y caolinita se impregnaron con 1, 3 y 9 mmol de Fe/g de arcilla y se caracterizaron por DRX, SEM, FTIR. La adsorción de glifosato se realizó en un rango entre 12 y 27 mg/L. La concentración final de glifosato se midió por UV-Vis a 568 nm [6].

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los DRX de las arcillas purificadas e impregnadas con Fe, demostraron que las modificaciones no afectaron sus estructuras cristalinas; sin embargo, produjo algunos cambios morfológicos como se observó por SEM (esquema 1). Las pruebas de adsorción con glifosato indicaron que la caolinita y bentonita de partida (KP1, BP1) presentaron las capacidades de adsorción más elevadas (19.38 y 13.12 mg/g) en comparación con los materiales impregnados con Fe en donde se alcanzaron valores entre el 9.49 y 12.44 mg/g para caolinita impregnada con 1 mmol Fe (KFe³⁺1) y bentonita impregnada con 9 mmol Fe (BFe³⁺9), respectivamente (esquema 1). Después de la adsorción, los materiales KP1, BP1, KFe³⁺1, y BFe³⁺9 fueron analizados por FTIR revelando la presencia de algunas bandas de vibración del glifosato. Las arcillas impregnadas con Fe adsorbieron glifosato lo que los convierte en potenciales soportes para la degradación catalítica en procesos tipo – Fenton.



Esquema 1. Estudio de Adsorción (A) Caolinita, (B) Bentonita y (C) Imágenes de SEM. Donde KFe+3 1, 3 y 9 corresponde a caolinita impregnada con 1, 3 y 9 mmol Fe+3/gramo de caolinita; y BFe+3 1, 3 y 9 corresponde a bentonita impregnada con 1, 3 y 9 mmol Fe+3/gramo de bentonita.

REFERENCIAS

- [1] G. S. A. Camacho, A. V. Herrera, D. M. G. Rincón, and J. E. A. Ospina. El Centauro. 2016, 8, 71-86.
- [2] W. D. C. Maya. RUC. 2020, 29, 096-098.
- [3] W. R. Duarte, I. R. Barragán, and P. E. Mocha. Orinoquia. 2003, 7, 10-100. v
- [4] Hu J. et al., Sci. Rep. 2021, 11, 1-10.
- [5] D. Feng, A. Soric, and O. Boutin. " Sci Total Environ 2020, 140559.
- [6] R. C. Pereira, A. C. da Costa, F. F. Ivashita, A. Paesano Jr, and D. A. Zaia. Heliyon. 2020, 6, e03532.



EFICIENCIA DE REMOCIÓN DE DIVERSOS MICROCONTAMINANTES ORGÁNICOS EN HUMEDALES DE TRATAMIENTO

Amado Enrique Navarro Frómata, Jorge Antonio Herrera Cárdenas

Universidad Tecnológica de Izúcar de Matamoros

navarro4899@gmail.com

PALABRAS CLAVES: humedales, eficiencia, remoción, microcontaminantes

INTRODUCCIÓN

Los altos costos e insuficiente remoción de los microcontaminantes orgánicos (MCO), en los sistemas de tratamiento convencionales de aguas residuales domésticas, condiciona el vertido de una amplia gama de estos a los cuerpos de agua. Los humedales de tratamiento son una alternativa ecoeficiente para la remoción de estos contaminantes.

MÉTODOS

Basados en un diseño cuadrado latino, se establecieron 15 sistemas de flujo subsuperficial horizontal. Las muestras se extrajeron y analizaron por CG/EM (1). Se estudió la remoción de CAFeína, GALaxolide, TONalide, PARsol, sunSCReen UV15, MetilDiHidroJasmonato, AlquilFenoles, AlquilFenoles MonoEtOxilados, AlquilFenoles DiEtOxilados y 3 antiinflamatorios no esteroideos, AINES: NAProxeno, DiCloFenaco e IBuproFeno.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

De los tres parámetros estudiados, macrófita (carrizo, tule y papiro), medio soporte (grava, grava volcánica gruesa y fina) y el tiempo de residencia hidráulica (1, 3 y 5 días), solo el último tuvo un efecto significativo sobre la remoción de los MCO, excepto para los AINES. De los diez compuestos analizados, CAF, GAL, TON, SCR, PAR y AFDEO tuvieron la mayor remoción, con porcentajes entre 88 y 95%, seguidos de los AF y AFMEO que presentaron remociones alrededor de 81 y 82% respectivamente. Los AINES fueron los compuestos más recalcitrantes, situándose en el orden DCF (70%)>NAP (64%)>IBF (63%). Esto último es atribuible a la limitada presencia de oxígeno en los HFSSH. Los resultados demuestran la eficiencia de los HFSSH para remover una amplia gama de MCO con un menor costo de instalación, mantenimiento y operación, utilizando las macrófitas disponibles en las comunidades donde se desee implementar dicha tecnología.

REFERENCIAS

- Herrera-Cárdenas, J.A.; Navarro-Frómata, A. E.; Torres-Ramírez, E. Effects of porous media, macrophyte type and hydraulic retention time on the removal of organic load and micropollutants in constructed wetlands. *J Environ Sci Heal A*, 2016, 51(5), 380-388, DOI:10.1080/10934529.2015.1120512.



SORCIÓN DE CARBOPLATINO DE MATRICES ACUOSAS EN CENIZAS DE CÁSCARA DE ARROZ

Dixon Andi Grefa

Universidad de La Habana

dixon.9572@gmail.com

PALABRAS CLAVES: Espectrofotometría, carboplatino, biosorción, ceniza

INTRODUCCIÓN

El uso de un adsorbente natural como la ceniza de cáscara de arroz, que existe como residual de la industria arrocerera, permite resolver dos problemas ambientales: la utilización y disposición adecuada de este residuo y la remoción de contaminantes orgánicos como el carboplatino en matrices acuosas.

MÉTODOS

Para la eliminación de carboplatino de matrices acuosas, se realizó un estudio de dosis de adsorbente, pH de máxima adsorción, estudio cinético y estudio de equilibrio ceniza fármaco. Se utilizó la técnica analítica espectrofotométrica UV-VIS para la cuantificación de carboplatino en matrices acuosas.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La cantidad mínima de cáscara de arroz, necesaria para lograr una adecuada remoción de carboplatino del medio acuoso, sobre la base de la capacidad de adsorción, fue de 1 gramos para un volumen de disolución de 100 mL. El valor de pH al que se alcanzó la máxima remoción de carboplatino de disoluciones acuosas fue de 10; en ese medio básico el adsorbente se encontraba cargado y el fármaco en su forma disociada, por lo que el tipo de interacción fue electrostática. El proceso de eliminación de carboplatino siguió una cinética de pseudo segundo orden con un coeficiente de correlación de 0,9915 y la concentración de equilibrio se alcanzó a los 60 minutos. Se determinó que los modelos de isothermas de Dubinin-Radushkevich y Langmuir fueron los de mejor ajuste no lineal para el citostático carboplatino y representaron de forma eficiente el proceso de equilibrio ceniza/fármaco.

REFERENCIAS

- Balarak, D., Mostafapour, F., Azarpira, H., & Joghataei, A. Langmuir, Freundlich, Temkin and Dubinin–radushkevich Isotherms Studies of Equilibrium Sorption of Ampicilin unto Montmorillonite Nanoparticles. *Journal of Pharmaceutical Research International*, 2017, 20(2), 1–9. <https://doi.org/10.9734/jpri/2017/38056>
- Chou, K. Sen, Tsai, J. C., & Lo, C. T. The adsorption of Congo red and vacuum pump oil by rice hull ash. *Bioresource Technology*, 2001, 78(2), 217–219. [https://doi.org/10.1016/S0960-8524\(00\)00116-4](https://doi.org/10.1016/S0960-8524(00)00116-4)
- Mane, V. S., Deo Mall, I., & Chandra Srivastava, V. Kinetic and equilibrium isotherm studies for the adsorptive removal of Brilliant Green dye from aqueous solution by rice husk ash. *Journal of Environmental Management*, 2007, 84(4), 390–400. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2006.06.024>



ENVIRONMENTAL SUSTAINABILITY OF AGRICULTURE SYSTEMS BASED ON THERMODYNAMIC INDICATORS

Casas-Ledón Y.^{1,2}, Silva J.S.¹, Martínez-Martínez Y.³

¹Environmental Engineering Department, Faculty of Environmental Sciences-EULA Center, University of Concepción, Chile; ²Unidad de Desarrollo Tecnológico, Universidad de Concepción, Coronel, Chile. ³Doctorate in Energy, Faculty of Engineering, University of Concepción, Chile

yannaycl@gmail.com

KEYWORDS: Exergy, net resources consumption, agriculture

INTRODUCTION

Net primary productivity (NPP)-based exergy indicators are applied for evaluating the land use impact by human intervention at the grid, region, country and world level^{1,2}. These indicators rely on socio-economic activities by region, which varies significantly along the country. This study estimated the exergy resources balance used for agriculture systems for evaluating the resources efficiency.

METHODS

The net annual exergy production ($\Delta NExP$) was determined for agriculture systems located at Biobío region, Chile. It is estimated by difference between harvested biomass (NPP_{actual}), cumulative exergy consumption from non-local resources (CExC) and the natural potential of biomass production (NPP_{pot}) $\Delta NExP = NPP_{actual} - !NPP_{pot} + CExC$ " All parameters were expressed in MJex/m²year.

RESULTS AND CONCLUSIONS

The $\Delta NExP$ depicted positive values for all studied crops. This means that the biomass production from agriculture was higher than biomass produced naturally and the resources consumed to produce them. Therefore, more sustainable will be the biomass production system at higher $\Delta NExP$. Moreover, the indicator values varied significant between crops (20- 80%), demonstrating the high sensitivity to the productivity of the main product, which is closely related to biomass structure, and agricultural management. Furthermore, the proposed indicator provided a comprehensive overview on the natural resources balance, making emphasis on land uses productivity, promoting a more environmentally sustainable biomass-based economy in the region.

REFERENCES

- [1] Taelman, S.; Schaubroeck, T.; De Meester, S.; Boone, L.; Dewulf, J. Accounting for land use in life cycle assessment: The value of NPP as a proxy indicator to assess land use impacts on ecosystems, *Sci. Total Environ.* 2016, 550,143–156.
- [2] Alvarenga, R.; Dewulf, J.; Van Langenhove, H.; Huijbregts, M. Exergy-based accounting for land as a natural resource in life cycle assessment, *Int. J. Life Cycle Assess.* 2013, 18, 939–947.
- [3] Alvarenga, R.; Dewulf, J.; Van Langenhove, H. A new natural resource balance indicator for terrestrial biomass production systems, *Ecol. Indic.* 2013, 32, 140–146.



UNA APROXIMACIÓN METODOLÓGICA PARA LA IDENTIFICACIÓN DE VARIABLES QUE AFECTAN EL COMPORTAMIENTO MECÁNICO DE MATERIALES ARCILLO LIMOSOS Y SUS PROPIEDADES MINERALÓGICAS: CASOS DE ESTUDIO SABANA DE BOGOTÁ, EJE CAFETERO

Yolanda Calderón,* Julián Rodríguez, Luz Myrian Gómez, John Deiver Bonilla

Servicio Geológico Colombiano -SGC

*ycalderon@sgc.gov.co

PALABRAS CLAVES: geomecánica, arcillas, propiedades mineralógicas

INTRODUCCIÓN

Este artículo presenta un enfoque para la evaluación de posibles relaciones de interés entre el comportamiento geomecánico asociado a la deformación de suelos finos arcillo limosos, respecto de su génesis, aspectos fisiográficos y algunas variables ambientales en dos (2) zonas piloto preseleccionadas en Colombia: Sabana de Bogotá y Eje Cafetero

MÉTODOS

El método de investigación se basa en el análisis de información producto de caracterización geomecánica de campo y laboratorio, identificación de la composición mineralógica de los materiales, tamaño de partículas y microestructura, aplicación de técnicas de análisis de laboratorio y posterior análisis de relación de variables con minería de datos.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Como resultados de la investigación se tiene una base de datos que permite efectuar análisis estadísticos y brinda información nativa e imágenes; su desarrollo parte del uso de diferentes herramientas de software Arcgis (Arcmap, Arcgis online, Survey123, Arcgis Insight) el cual permite a través de su interfaz un análisis espacial y estadístico en las zonas de interés para la correlación de datos; propuesta de un modelo de correlación geomecánico entre variables geológico - geotécnicas y composición mineralógica y microfábrica de suelos finos arcillo - limosos, así como la identificación de algunas variables geológico - geomorfológicas y composicionales de alta importancia en el comportamiento en deformación de suelos finos, que involucran aspectos de composición de los materiales y algunas variables ambientales tales como aspectos fisiográficos y variables climáticas que no se han tenido en cuenta en la actual normatividad aplicada a la construcción de infraestructura en el país.

REFERENCIAS

- [1] Torres Suárez, M.C. Efectos de los ciclos de carga - descarga y humedecimiento - scado en el comportamiento geomecánico de rocas lodosas de los andes colombianos. Tesis Doctoral. Universidad Nacional de Colombia. Bogotá. 2011
- [2] Ávila Alvarez, G.E. Estudio de la retracción y el agrietamiento de arcillas – Aplicación a la arcilla de Bogotá. Tesis Doctoral. Universidad Nacional de Colombia. Bogotá, Colombia. 2004.
- [3] Rodríguez Castiblanco, E.A. Evaluación del Comportamiento Geomecánico de Arcillas en el Sector de Campoalegre – Ciudad de Barranquilla. Tesis Maestría. Universidad Nacional de Colombia. Bogotá, Colombia. 2014.



USO DE INTELIGENCIA ARTIFICIAL PARA EVALUAR EL RIESGO POR PRESENCIA DE SUSTANCIAS QUÍMICAS EN EL RÍO CAUCA

Rodrigo Sarria-Villa¹, William Ocampo-Duque², Martha Páez³

¹Departamento de Química, Universidad del Cauca, Cll 5 # 4-70, Popayán, Colombia ²Facultad de Ingeniería, Pontificia Universidad Javeriana, Cll 18#118-250, Cali, Colombia.

³Departamento de Química, Universidad del Valle, Cll 13 # 100-00, Cali, Colombia.

rodrigov@unicauca.edu.co

PALABRAS CLAVE: Sistemas de inferencia difuso, concentraciones ambientales, índice de riesgo ecológico, Río Cauca (Colombia).

INTRODUCCIÓN

Teniendo en cuenta el probable peligro ecológico debido a la presencia de sustancias químicas en el río Cauca, se desarrolló un modelo conceptual que consta de dos sistemas de inferencia difusa. La incertidumbre y subjetividad asociadas a los problemas ambientales fueron tratadas usando métodos computacionales basados en la inteligencia artificial.

MÉTODOS

Área de estudio

El muestreo se realizó en 8 de las 19 estaciones establecidas por la CVC Valle del Cauca

Sistemas de inferencia fuzzy

Manejo de sustancias peligrosas por medio de entradas numéricas que son convertidas en conjuntos difusos.

Salidas del sistema

Respuesta del sistema difuso

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Un sistema fuzzy fue empleado para estudiar la contaminación química del río Cauca en su paso por el Departamento del Valle. El modelo fuzzy permitió estimar el riesgo ecológico causado por diferentes sustancias químicas medidas en diferentes estaciones a lo largo del río. Los niveles más altos de riesgo ecológico fueron debidos principalmente a plaguicidas organoclorados, triazinas, HAPs y metales pesados como el Cr. La presencia de sustancias orgánicas persistentes y metales pesados puede ser debida a descargas por diferentes actividades industriales, principalmente de la ciudad de Cali y de la zona industrial de Yumbo, como también, las diferentes actividades agrícolas y el monocultivo de la caña de azúcar. Los resultados indican una alerta por la presencia de sustancias orgánicas y metales pesados (Con riesgo ecológico superior al 50%) en el río Cauca en su paso por el Departamento del Valle.

REFERENCIAS

Ocampo-Duque W, Osorio C, Piamba C, Schuhmacher M, Domingo J. 2013. Water quality analysis in rivers with non-parametric probability distributions and fuzzy inference systems: Application to the Cauca River, Colombia. *Environment International* 52, 17–28.

Sarria-Villa, R; Ocampo-Duque, W; Páez, M; Schuhmacher, M. 2016. Presence of PAHs in water and sediments of the Colombian Cauca River during heavy rain episodes, and implications for risk assessment, *Sci Total Environ.* 540, 455-465.

EVALUACIÓN DE ESPECIES LIXIVIABLES EN RELAVES PROVENIENTES DE PROCESAMIENTO DE ORO FILONIANO EN DISTRITO MINERO SANTA ROSA DEL SUR –Dpto. DE BOLÍVAR- APLICACIÓN MÉTODO TCLP.

Ruiz, V., Franco, L.

Servicio Geológico Colombiano, Dirección Laboratorios, Cali, Colombia

vrui@sgc.gov.co, lfranco@sgc.gov.co

PALABRAS CLAVES: TCLP, Lixiviación, relaves mineros, metales pesados.

INTRODUCCIÓN

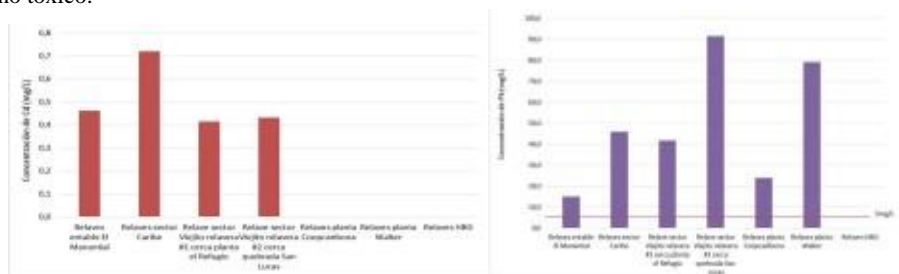
Se aplicó la prueba químico ambiental de TCLP (Toxicity characteristic leaching procedure) a relaves mineros provenientes del distrito del Sur de Bolívar. Se fundamenta en una lixiviación que mide la liberación de contaminantes en un residuo sólido cuando entra en contacto con fases líquidas simulando el medio ambiente natural. La prueba TCLP se realizó en muestras compost correspondientes a relaves de diferentes plantas de beneficio de oro de la zona de estudio. Para caracterizar el relave se realizaron análisis elemental de fluorescencia de rayos X, determinación de elementos mayores por E.A.A. llama y G.H., alcalinidad y tenor de oro por ensayo al fuego.

MÉTODOS

Muestras de 1 kg fueron recolectadas en campo bajo el muestreo aleatorio simple, empacadas y preservadas (15 °C), secadas a temperatura ambiente en laboratorio. Se realizó verificación de pH del residuo sólido para seleccionar la solución extractora (S.E.) 1 (pH: 4,93 ±0,05 und) y 2 (pH final de 2.88 ± 0,05 und); para esto se pesó 5 g de muestra (D80=1 mm y % de humedad < 0.5%), se adicionó 96,5 mL de agua desionizada. Para una solución con pH final < 5 und se utilizó la S.E. 1 y a las muestras con valores de pH > a 5 und, se adicionó 3,5 mL de HCl 1M, se agitó, se calentó (10 min) a T de 50 °C. En las muestras que presentaron valores de pH < 5 und, se utilizó la S.E. 1 y valor de pH > 5 und la 2. Para la lixiviación se pesó 25 g de relave, se adicionó 500 mL de S.E. (Relación líquido/sólido 1/20), y se generó agitación regulada durante 18 h, finalmente el sobrenadante se filtró y se cuantificaron los elementos: As, Ba, Cd, Cr, Hg, Ag, Pb, Se por E.A.A.-Llama y G.H.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En la figura 2 y 3, se muestran las concentraciones en el lixiviado de Cd y Pb, que fueron los analitos detectados por E.A.A. Los resultados se compararon con la norma colombiana y se determinó que en todos los casos existe toxicidad asociada a la lixiviación de plomo se exceden 5 mg/L (Decreto 4741 de 2005). En la muestra del relave del sector 2, se tienen 91,59 mg/L Pb, lo cual supera el valor permisible en un 1820% y algo similar ocurre en el relave de la planta del sector 1 en la cual se cuantificaron 79,09 mg/L Pb. Se detectó Cd en el lixiviado de ambos sectores, pero no supera el valor establecido en la norma. La prueba de lixiviación no detectó Ag, Cr en las muestras analizadas, posiblemente por la matriz de la muestra. En el relave de otra planta del sector 1, no se cuantificó ninguno de los metales de estudio por lo que puede considerarse no tóxico.



Resultados de determinación de Cd y Pb en el lixiviado

Fuente: Propia SGC. EAA-Llama y GH. Thermo Scientific iCe 3000 Series.

REFERENCIAS

1. Environmental Protection Agency (1992). Procedure toxicity characteristic leaching. Method 1311. USA Norm.
2. Wang, P., Sun, Z., Yuanan, Hu, Y., Cheng, H. (2019). Leaching of heavy metals from abandoned mine tailings brought by precipitation and the associated environmental impact. Science of the Total Environment, 695, 1-11. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.133893>
3. MinAmbiente (2005). Decreto 4741 de 2005. Concentraciones máximas de contaminantes para la prueba TCLP. Tabla 3 del anexo III.



EVALUACIÓN QUÍMICO AMBIENTAL DEL CONTENIDO DE MERCURIO EN MUESTRAS DE SEDIMENTOS ACTIVOS DE RÍO EN DISTRITO MINERO DE SANTA ROSA DEL SUR-BOLÍVAR, POR E.A.A.-G.H.

Annie Alexandra Arango Escobar ¹, Daniel Esteban Castañeda Pinzón ²

¹Química, Servicio Geológico Colombiano, Cra 97A #15A-79, Cali, Colombia. ²Tecnólogo Químico, Servicio Geológico Colombiano, Cra 97A #15A-79, Cali, Colombia.
aarangoe@sgc.gov.co, dcastaneda@sgc.gov.co

PALABRAS CLAVES: Evaluación, Ambiental, Cuantificación, Espectrofotometría

INTRODUCCIÓN

El mercurio utilizado en el procesamiento del material de las minas de oro, se acumulan formando relaves con contenido de este metal, que al interactuar con el medio ambiente por procesos fisicoquímicos naturales generan contaminantes que son descargadas cerca a fuentes hídricas, poniendo en riesgo el medio ambiente.

MÉTODOS

Para la determinación de mercurio por absorción atómica se emplea la técnica Generación de Hidruros, para esto es necesario realizar el tratamiento previo de las muestras, con el objetivo de reducir las interferencias por materia orgánica, material particulado y liberar el analito de la matriz manteniéndolo en solución.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En los sedimentos activos, se encontró mercurio en la muestra tomada aguas abajo de la quebrada La Estrella con una concentración de Hg de 1,66mg/kg, por lo que se asume que este elemento tiene origen antropogénico. Aguas arriba de esta misma quebrada, los niveles son iguales a 0,52mg/kg, un nivel mucho más bajo que el que se presenta en las muestras de aguas abajo. El punto muestreado en la quebrada La Espada, presenta niveles bajos de mercurio 0,096mg/kg; esta quebrada desemboca en la quebrada San Lucas, en la que se cuantificó mercurio de 0,3220mg/kg superior en aguas abajo, de manera que, existe sedimentación de mercurio que llega a las fuentes de agua superficiales. La muestra de sedimentos del río Caribona, tomada aguas abajo, presenta los niveles más altos de mercurio de 14,45mg/kg, por lo que se infiere que este se ha movilizadado alrededor de la zona.

REFERENCIAS

Servicio Geológico Colombiano. (01 de octubre de 2019). GUÍA METODOLÓGICA PARA EL MEJORAMIENTO PRODUCTIVO DEL BENEFICIO DE ORO SIN EL USO DEL MERCURIO. SANTA ROSA DEL SUR (BOLÍVAR). <https://libros.sgc.gov.co/index.php/editorial/catalog/book/62>

Servicio Geológico Colombiano. (13 de marzo de 2014). METODO DE ENSAYO, DETERMINACIÓN DE MERCURIO POR ABSORCIÓN ATÓMICA-GENERADOR DE HIDRUROS. [https://srv-iso.sgc.gov.co/Isolucion/Administracion/frmFrameSet.aspx?](https://srv-iso.sgc.gov.co/Isolucion/Administracion/frmFrameSet.aspx?Ruta=Li4vRnJhbWVWTZXRbcnRyY3Vsby5hc3A/UGFnZW5hPUJhbmNvQ29ub2NpbWllbnRvNFNHQ1Byby9DL0M3QzkkRUMzLUNFMdktNDY4Ri05RUI2LUVBMkNCRUJGRjZDNC9DN0M5MUVDMY1DRTA5LTQ2OEYtOUVCNi1FQTJDQkVCRkY2QzQuYXNwJkIEQVJUSUNVTE89NTU3MQ==)

[Ruta=Li4vRnJhbWVWTZXRbcnRyY3Vsby5hc3A/UGFnZW5hPUJhbmNvQ29ub2NpbWllbnRvNFNHQ1Byby9DL0M3QzkkRUMzLUNFMdktNDY4Ri05RUI2LUVBMkNCRUJGRjZDNC9DN0M5MUVDMY1DRTA5LTQ2OEYtOUVCNi1FQTJDQkVCRkY2QzQuYXNwJkIEQVJUSUNVTE89NTU3MQ==](https://srv-iso.sgc.gov.co/Isolucion/Administracion/frmFrameSet.aspx?Ruta=Li4vRnJhbWVWTZXRbcnRyY3Vsby5hc3A/UGFnZW5hPUJhbmNvQ29ub2NpbWllbnRvNFNHQ1Byby9DL0M3QzkkRUMzLUNFMdktNDY4Ri05RUI2LUVBMkNCRUJGRjZDNC9DN0M5MUVDMY1DRTA5LTQ2OEYtOUVCNi1FQTJDQkVCRkY2QzQuYXNwJkIEQVJUSUNVTE89NTU3MQ==)



CENIZAS VOLANTES COMO ADSORBENTES DE BAJO COSTO PARA LA RETENCIÓN DE ATRAZINA EN SUELO

María José Martínez-Cordón,¹ Erika J. Pérez-Manosalva,¹ Yazmin Agámez-Pertuz.¹

Laboratorio de Investigación en Combustibles y Energía (LICE), Chemistry Department, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

*mjmartinezc@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Herbicida, adsorción, cenizas volantes, contaminación

INTRODUCCIÓN

Las cenizas volantes (CV) son un subproducto de la generación de energía en Colombia que representan un problema ambiental y podrían ser utilizadas para la remediación de suelos contaminados con plaguicidas [1,2]. En este trabajo se evaluó el potencial de las CV en la inmovilización de atrazina en suelo.

MÉTODOS

Se obtuvieron las isotermas de adsorción-desorción por la técnica “batch-equilibrium” [3] con mezclas al 0, 5 y 10% p/p de CV y un suelo de Tinjacá, Colombia. Se usaron seis dosis de atrazina técnica (0.0523 - 0.6008 mg/L) más 14C-atrazina. Los análisis se realizaron en Contador de Centelleo Líquido.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los porcentajes de adsorción fueron de $99.73 \pm 0.07\%$ para CV y $75.21 \pm 2.29\%$ para el suelo. Los datos se ajustaron a la isoterma de Freundlich

$$x/m = KfCeq^n$$

Los valores de Kf fueron 1697.06 ± 3437.12 , 4.35 ± 0.48 , 24.16 ± 3.03 y $65.31 \pm 23.94\%$ para las CV, 0, 5 y 10% mezclas suelo-CV respectivamente. Estos resultados muestran el aumento de la adsorción del herbicida en presencia de CV. El ajuste a las isotermas de desorción indica que al aumentar las proporciones de CV disminuye el porcentaje de desorción de 28.20 ± 3.45 a $36.60 \pm 3.80\%$ en el suelo original hasta 2.53 ± 1.13 a $4.39 \pm 0.96\%$ para la mezcla al 10% p/p. La irreversibilidad del proceso aumenta al incrementar el porcentaje de CV añadido, con valores del coeficiente de histéresis para el suelo que varían entre 0.21-0.11 y se reducen a un rango de 0.03-0.01 en presencia del 10% de CV. Las CV demostraron alto potencial para remediar suelos contaminados con atrazina.

REFERENCIAS

- [1] Basu, M.; Pande, M.; Bhadoria, P. ; & Mahapatra, S. Potential fly-ash utilization in agriculture: A global review. *Progress In Natural Science*, 2009, 19(10), 1173-1186. <http://dx.doi.org/10.1016/j.pnsc.2008.12.006>
- [2] Konstantinou, I.; Albanis, T. Adsorption–Desorption Studies of Selected Herbicides in Soil–Fly Ash Mixtures. *Journal Of Agricultural And Food Chemistry*, 2000, 48(10), 4780-4790. <http://dx.doi.org/10.1021/jf0003606>.
- [3] Organisation for Economic Co-operation and Development. 2000. Test No. 106: Adsorption–desorption using a batch equilibrium method. OECD Guidelines for the Testing of Chemicals, Paris, France.



STUDY OF BIOLOGICALLY CHELATING COMPOUNDS IN METAL-PROMOTED ALZHEIMER DISEASE

Areli Flores-Gaspar.*

Departamento de Química, Facultad de Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Militar Nueva Granada.

*areli.flores@unimilitar.edu.co

INTRODUCTION

Due to the importance of metal ions in neurodegenerative disease, some recent research has been directed to use the properties of metal chelating ligands as therapeutic agents. Here we present a study of different ligands with potential application as drugs in the treatment of Alzheimer's disease.

METHODS

Using bioinformatics and electronic structure tools, 50 chelating ligands along with their respective copper(I/II) complexes were evaluated to determine the best drug candidates following four key aspects: 1) Lipinski's rules five (R5L) compliance, 2) blood-brain barrier (BBB) permeation, 3) standard reduction potential (SRP), and 4) affinity for copper ions.

RESULTS AND CONCLUSIONS

The results showed that the studied structures are found to be suitable for a correct absorption and stability by oral administration under R5L, moreover, the BBB permeation calculated for most ligands is in a good permeability zone. Regarding the affinities for copper ions, it was obtained that most ligands have an affinity that exceeds that of the B-amyloid peptide, so that a competition for the metal can be established and the respective complexes can be formed. The calculated PER shows that a group of ligands derived from ligands of the type (N,N-bidentate), have the ability to act as antioxidant agents since they exceed the 0.30 V, PER of the O₂/H₂O₂ pair under physiological conditions. According to the results obtained, the possibility of studying other families of chelating ligands by synthetically modifying the structures and substitutions of the analyzed structures is open.

REFERENCES

- [1] a) Reiman E.; et al. J. Alzheim. Dis. 2011, 26, 321. b) Alzheimer's Association. Alzheimer Dement, 2014, 10, 47.
- [2] Abraham M. H., Takács-Novák K., y Mitchell R. C., J. Pharm. Sci., 1997, vol. 86, pp. 310–315.
- [3] Xiao, Z., y Wedd, A. G., Natural Product Reports, 2010, vol. 27, pp. 768-789.
- [4] Nelson, D. L., Lehninger A. L., y Cox, M. M., 2008, Lehninger principles of Biochemistry. W.H. Freeman. USA.



QUÍMICA ANALÍTICA

SLACL-57

ESTUDIO DE LA TÉCNICA DE DATACIÓN POR CARBONO-14 EN EL SERVICIO GEOLÓGICO COLOMBIANO

Daniel G. Pinacho¹, Miguel Rojas, Amaya,¹ Guillermo Parrado, Lozano¹, Mary Peña, Urueña¹

¹Dirección de Asuntos Nucleares, Servicio Geológico Colombiano, Bogotá D. C., Colombia

dgonzalezp@sgc.gov.co

PALABRAS CLAVE: Radiocarbono, Datación, Validación analítica.

INTRODUCCIÓN:

La datación por radiocarbono es una técnica isotópica basada en la desintegración de ¹⁴C. Actualmente es la herramienta de datación predilecta en arqueología, sismología y paleoclimatología entre otras disciplinas.¹ Esta comunicación presenta los avances en la implementación de dicha técnica en el Servicio Geológico Colombiano y los resultados preliminares obtenidos.

MÉTODOS:

Tratamiento de muestra: Las muestras fueron sometidas a tratamiento Ácido-Álcali-Ácido previamente descrito² con ligeras modificaciones. Síntesis de benceno: Se utilizó el método convencional de síntesis de benceno, mediante una línea de síntesis comercial (AKP, Ucrania). Medición y análisis de datos: Las muestras se midieron mediante un espectrómetro de centelleo líquido.

RESULTADOS Y CONCLUSIÓN

Se estandarizó el tratamiento Físico-Químico de muestra utilizando 20 y 8 mL/g muestra (carbón y sedimento respectivamente) de 1 M HCl y 0,5 M NaOH, lavados ácidos de 24 horas y lavados básicos de 24 h (carbón) y 3 h (sedimento). Se estandarizó la síntesis de benceno mediante el método de fusión directa, 20 min de reacción, relación 0.75g litio /g muestra y 7.5 g muestra para carbón y método de pirólisis a vacío, 90 min de reacción, relación 0.1 g litio /g muestra y 100 g muestra para sedimentos. Se estableció la geometría de medición utilizando 10 mg butil-PBD/mL benceno, ventana de conteo entre los canales 140-412, 40 horas de medición/muestra y se construyeron curvas experimentales para la corrección de datos. Se estimó la edad de una muestra (madera carbonizada) en 5002 ± 273 años BP, resultados congruentes con los descritos en literatura³(5100 ± 110 años BP).

REFERENCIAS

1. Kutschera W. Applications of C, the Most Versatile Radionuclide to Explore Our World. In: Scheidenberger C., Pfützner M. (eds) The Euroschool on Exotic Beams - Vol. 5. Lecture Notes in Physics, 2018, 948. Springer, Cham.
2. Brock F., Higham T., Ditchfield P. and Bronk R. Current pretreatment methods for AMS radiocarbon dating at the oxford radiocarbon accelerator unit (ORAU). Radiocarbon. 2010, 52(1): 103–112.
3. Cepeda, H., Murcia, L.A., Monsalve, M.L., Méndez, R.A. & Núñez, A. Actividad eruptiva del volcán Machín. 1996, VII Congreso Colombiano de Geología, Memorias, III, 385–393.



DETECCIÓN Y REMOCIÓN DE METALES PESADOS EN AGUA RESIDUAL MEDIANTE STRIPPING ANÓDICO VOLTAMPEROMÉTRICO CON ELECTRODOS DE TRABAJO MODIFICADOS Y ENERGÍA FOTOVOLTAICA

D.H. Aristizábal¹, G. Taborda², L. Cardona¹, C. Betancur¹, J. E. Patiño¹, J. C. Carvajal¹, P. Valencia¹

¹Servicio Nacional de aprendizaje, SENA, regional Caldas, Manizales, Colombia. ²Universidad de Caldas, Manizales, Colombia.

धारिस्टिज़बल7@misena.edu.co

PALABRAS CLAVES: Electropolimerización, vertimientos, energía renovable

INTRODUCCIÓN

Los metales pesados como el plomo, cromo, cadmio y níquel presentes en agua residual como resultado de las actividades antropogénicas se han convertido en un riesgo para el ambiente y la salud humana, debido a que es imposible metabolizarlos generando acumulación en el interior ocasionando afecciones motrices, digestivas y cerebrales

MÉTODOS

Por esta razón, se diseñó y construyó un dispositivo electroquímico asistido por energía fotovoltaica bajo el concepto de un sistema de mínima instrumentación micropolarográfica (MIMP), con capacidad para detectar y remover metales en solución, por la técnica de redisolución anódica, comúnmente conocida como stripping anódico voltamperométrico.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

El dispositivo construido mediante electrónica análoga y asistido por un panel solar de W, fue controlado por una interfaz gráfica de usuario (IGU) que ejecutó los procesos de oxidación-reducción de Pb, Cr, Cd y Ni durante la electrodeposición y redisolución de estos analitos. En la fase de detección, se implementaron microelectrodos de grato modificados poliméricamente con pirrol como precursor polimérico. Para la fase de monitoreo, se realizó mediante una deposición (preelectrólisis) a 100 rpm durante dos (2) minutos, un periodo de receso de 30 s y la redisolución anódica de los analitos electrodepositados. La fase de remoción, implicó únicamente la etapa de preelectrólisis con macroelectrodos de grafito y se intercambiaron por comandos de programación dirigidos por el dispositivo para evitar la saturación de estos y generar su limpieza cada tres (3) horas de trabajo. De esta manera, se espera aumentar la evaluación e intervención del agua residual del sector industrial.

REFERENCIAS

- (1) Meneses Barroso, Y. M.; Patiño Mantilla, P. A.; Betancur Perez, J. F. Remoción de Cromo En Aguas Residuales Industriales Mediante El Uso de Biomasa de Spirulina Sp, Sedimentación Primaria y Precipitación Química. Rev. Investig. Agrar. y Ambient. 2018, 10 (1), 141–152.
- (2) Aristizabal, D. H.; Giraldo, D. A.; Sanchez, S.; Taborda, G.; Baeza, A. Implementation of Electrochemical Elements for an Alternative Detection of Ochratoxin A. J. Phys. Conf. Ser. 2017, 786 (1), 012040.



USO DE LA BIOMASA MUERTA DE BACTERIAS *Lysinibacillus sphaericus* COMO FASE EXTRACTANTE EN UN SISTEMA DE MICROEXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA PARA LA DETERMINACIÓN DE MERCURIO INORGÁNICO EN MEDIO ACUOSO

Ingrid Quinchanequa, Ricardo Rivas

Universidad de los Andes

INTRODUCCIÓN

La técnica de microextracción en fase sólida (SPME), modalidad miniaturizada de la clásica (SPE), provee prestaciones enmarcadas bajo una visión ecológica y austera dentro de la “química analítica verde”. La presente investigación plantea el diseño de un sistema de SPME para preconcentrar y determinar mercurio en matrices acuosas mediante AAS.

MÉTODOS

Basándose en la ya comprobada capacidad de las bacterias para interactuar de manera “adsortiva” con el mercurio. Se propone el uso del horno de grafito, en vista de su versatilidad en el análisis directo de sólidos en proporciones reducidas, requiriendo la preconcentración del mercurio sobre la superficie de las bacterias.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Con base a la volatilidad del mercurio en horno de grafito, se requiere mantenerlo bajo una forma química térmicamente estable para evitar pérdidas durante etapas previas a su atomización. Se requiere entonces del uso de modificadores químicos, necesarios para retener en mayor medida al elemento dentro del horno mejorando notablemente la sensibilidad. Se estudió el efecto de la concentración de diferentes modificadores químicos como el Pd(NO₃)₂, KMnO₄ y nanopartículas de oro (AuNps) en presencia de la biomasa muerta de las bacterias. Por otro lado, al examinar las potencialidades de la biomasa como material adsorbente de mercurio inorgánico, se encontró un factor de preconcentración cercano a 30, pero hubo limitaciones en términos de reproducibilidad, por efecto de inyección manual dentro del horno. Se utilizaron nanopartículas de cobalto (CoNps) como patrón interno para corregir dicho efecto usando una línea secundaria (253,59 nm) en las vecindades de la línea principal del mercurio (253,65 nm).

REFERENCIAS

Vega-Páez, J. D.; Rivas, R. E.; Dussán-Garzón, J., High Efficiency Mercury Sorption by Dead Biomass of *Lysinibacillus sphaericus*—New Insights into the Treatment of Contaminated Water. *Materials* 2019, 12 (8), 1296.

Aramendía, M.; Guarda, A.; Leite, D.; Resano, M., Direct mercury determination in blood and urine by means of high-resolution continuum source graphite furnace atomic absorption spectrometry using gold nanoparticles as a chemical modifier. *Journal of Analytical Atomic Spectrometry* 2017, 32 (12), 2352-2359.

Resano, M.; Flórez, M. R.; García-Ruiz, E., High-resolution continuum source atomic absorption spectrometry for the simultaneous or sequential monitoring of multiple lines. A critical review of current possibilities. *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy* 2013, 88, 85-97.



VALIDACIÓN DE UN MÉTODO POR CROMATOGRAFÍA DE GASES PARA EL ANÁLISIS DE NITROSAMINAS EN ENSAYOS DE MIGRACIÓN DE EMPAQUES PLÁSTICOS.

Felipe Rico Sarmiento,* Diana Cristina Sinuco León, Cristian Nicolas Patiño Gomez, Diego Alejandro Mora Rojas

Universidad Nacional de Colombia

*fricos@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Metrología normatividad elastómeros

INTRODUCCIÓN:

Las N-nitrosaminas son compuestos carcinogénicos que pueden migrar desde empaques plásticos hacia los alimentos durante su almacenamiento. En Colombia, los materiales elastoméricos destinados a entrar en contacto con alimentos y bebidas no deben ceder N-nitrosaminas en cantidades superiores a 0.01mg/kg de simulante. Esto requiere un método de análisis metrológicamente trazable.

MÉTODOS:

Ensayo de migración global con simulante salino (saliva artificial).

Extracción de N-nitrosaminas.

Análisis por Cromatografía de Gases (FID y MSD).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

Mediante GC-FID, se establecieron que los límites de cuantificación para 5 nitrosaminas reguladas se encuentran entre 6 y 12mg/L (ppm), valor muy superior al establecido por normatividad. Entonces se implementó y validó el método de análisis por GC-MSD. Se realizaron ensayos de migración en teteros con simulante salino (saliva artificial).

REFERENCIAS

- [1] Choi, N. R.; Kim, Y. P.; Ji, W. H.; Hwang, G. S.; Ahn, Y. G. Identification and Quantification of Seven Volatile N-Nitrosamines in Cosmetics Using Gas Chromatography/Chemical Ionization-Mass Spectrometry Coupled with Head Space-Solid Phase Microextraction. *Talanta* 2016, 148, 69–74. <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2015.10.045>.
- [2] Ma, Q.; Xi, H. W.; Wang, C.; Bai, H.; Xi, G. C.; Su, N.; Xu, L. Y.; Wang, J. B. Determination of Ten Volatile Nitrosamines in Cosmetics by Gas Chromatography Tandem Mass Spectrometry. *Fenxi Huaxue/ Chinese J. Anal. Chem.* 2011, 39 (8), 1201–1207. [https://doi.org/10.1016/S1872-2040\(10\)60466-5](https://doi.org/10.1016/S1872-2040(10)60466-5).



DEVELOPMENT AND CERTIFICATION OF REFERENCE MATERIAL OF PESTICIDES RESIDUES IN AVOCADO

Diego Ahumada¹, Laura Morales¹, Andrés Salinas¹, Amadeo Fernández-Alba², José Díaz³, Clemens Jaitner⁴, Hermann Unterluggauer⁴, Laura Quinn⁴

1. Instituto Nacional de Metrología de Colombia (INM), 2. European Union Reference Laboratory for Pesticide Residues in Fruit & Vegetables, 3. Austrian Agency for Health and Food Safety (AGES), 4. National Metrology Institute of South Africa

lmorales@inm.gov.co

KEY-WORDS: Traceability, Avocado, pesticides, Collaborative

INTRODUCTION

Analytical methods used by laboratories that support the implementation of legislation must be subjected to validation procedures. Methods need to provide trueness, repeatable, and reproducible results within and between different laboratories. In this sense, certified reference materials (CRMs) play an important role in the validation and verification of analytical measurements.

METHODS

In this work, the collaborative study was the selected alternative, meaning that the material is characterized by a group of laboratories (two reference laboratories and two national metrology institutes), applying one or - by default- more methods (2).

RESULTS AND CONCLUSIONS

In the homogeneity study, for most of the pesticides, it was found an uncertainty associated to homogeneity between bottles between 0.06% and 3.3 %, except for thiamethoxam whose uncertainty was 6.3 %. On the other hand, in the stability studies (long and short time), there were no significant regressions for the kinetics of orders 0, 1, and 2 ($p < 0.05$). Finally, as the goal was to seek independent estimates from the participants, our collaborators were given the freedom to use their internally validated methods for the determination of pesticide residues. The results from the participating laboratories were combined using the random-effects model and was possible to establish the baseline value for only 10 of the 22 analytes

REFERENCIAS

- (1) International Organization for Standardization (ISO). ISO 17034:2016- General Requirements for the Competence of Reference Material Producers. ISO, Geneva; 2016.
- (2) International Organization for Standardization (ISO). ISO GUIDE 35:2017 Reference Materials — Guidance for the Characterization and the Assessment of the Homogeneity and Stability of the Material. Geneva, Switzerland 2017.



ESTUDIO DE LA CINÉTICA DE FORMACIÓN DEL CRISTAL β -HEMATINA EN PRESENCIA DE ANTIMALARICOS EN UN MEDIO ACUOSO.

Julieth Herrera, Adriana Pabón, Cesar Barrero, Karen Garcia, Julián Zapata.

Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia
Grupo de Estado Sólido UdeA, Grupo Malaria UdeA; Grupo Análisis de Residuos UdeA
julieth.herrera@udea.edu.co

PALABRAS CLAVES: Plasmodium, β -hematina, cloroquina, cinética

INTRODUCCIÓN

La biocristalización de hemozoína es un mecanismo de supervivencia utilizado por el parásito *Plasmodium falciparum* para desintoxicar el grupo Hemo liberado durante la digestión de la hemoglobina. El hemo es tóxico para el parásito, y este lo dimeriza en un cristal llamado hemozoína, su equivalente sintético se conoce como β -hematina.

METODOS

Para entender el proceso de formación del cristal hemozoína y el efecto que tiene la presencia de fármacos antimaláricos, se realizaron estudios cinéticos en función del porcentaje de conversión de hemo en cristal de hemozoína. El porcentaje de conversión se determinó cuantificando el aducto de la hemo -piridina por espectrofotometría.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los cristales de β -hematina fueron obtenidos en un medio acuoso controlando los parámetros pH y Temperatura, se caracterizaron por FTIR, SEM y AFM. Se observó que los fármacos antimaláricos afectan la velocidad de formación del cristal y adicionalmente cambian sus propiedades vibracionales y morfológicas.

REFERENCIAS

- [1] Straasø, T. (2011). The Role of the Four Stereoisomers of the Heme Fe–O Cyclic Dimer in the Crystalline Phase Behavior of Synthetic Hemozoin: Relevance to Native Hemozoin Crystallization. *Crystal Growth & Design*, 11(8), pp.3342-3350.
- [2] Fitzroy, S.(2017). The Effects of Quinoline and Non-Quinoline Inhibitors on the Kinetics of Lipid-Mediated β -Hematin Crystallization. *Langmuir*, 33(30), 7529-7537
- [3] Guerra, E. (2016). Surface Characterization of Hematin Anhydride: A Comparison between Two different Synthesis.
- [4] Pasternack, R. (2010). On the kinetics of formation of hemozoin, the malaria pigment. *Journal of Inorganic Biochemistry*, 104(10), pp.1119-1124.



NUEVAS FIBRAS SPME HECHAS EN LABORATORIO CON UN REVESTIMIENTO VERDE BASADO EN UNA ARCILLA MODIFICADA MEDIANTE DEPOSICIÓN FÍSICA DE VAPOR PARA LA DETERMINACIÓN DE HIDROCARBUROS EN MUESTRAS DE AGUAS

Diana Castillo-Gómez 1 *, Jhon Fiscal-Ladino 1 , Álvaro Pulzara-Mora 2 , Milton Rosero-Moreano 1

1. Universidad de Caldas
2. Universidad Nacional sede Manizales
3. Outsourcing Comercial S.A.S.

PALABRAS CLAVE: SPME, deposición física de vapor, GC-MS, fina película, hidrocarburos

INTRODUCCIÓN:

La preparación de muestras es el cuello de botella en todo el proceso analítico, por esta razón las técnicas de microextracción han ganado mucho terreno en el procedimiento analítico, la microextracción en fase sólida SPME, desarrollada por Pawliszyn [1], es una poderosa técnica para la determinación de compuestos químicos. en muestras de agua, especialmente para analitos en concentraciones trazas.

METODOLOGÍA:

Se depositaron películas delgadas de arcilla montmorillonita (1 cm de ancho y 1 μm de espesor) sobre un sustrato (alambre de NiTi) mediante deposición física de vapor con pulverización catódica con magnetrón. El argón se introdujo en la cámara, del equipo de magnetrón sputtering, encendiéndose la fuente y generando un plasma entre el objetivo de la pulverización catódica (arcilla de montmorillonita) y el obturador para iniciar la deposición durante un tiempo fijo a la temperatura del sustrato. Luego, una vez depositada la capa fina de arcilla sobre alambre de NiTi, se realizó el proceso de intercalación con líquido iónico (bromuro de 1-hexadecil 3-metilimidazolio) [2]. De esta manera, las nuevas fibras SPME fabricadas en laboratorio están listas para extraer las moléculas diana no polares.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

Los analitos diana fueron 5 compuestos de hidrocarburos como: heneicosano, 5-butyl-5-ethylheptadecano, tetrapentacontano, dotriacontano y 2-metiloctacosano. Los resultados obtenidos con la nueva técnica SPME propuesta fueron muy buenos, incluso mejores que la técnica comparativa mediante el uso de fibra de recubrimiento SPME tradicional (PDMS). Cada proceso se realizó tres veces para evaluar la reproducibilidad y la repetibilidad (la RSD estuvo entre el 9 y el 26%). En cuanto a LOD y LOQ, porque los analitos se extrajeron a ng mL^{-1} en el rango de 0.12 hasta 0.15. Con altas recuperaciones superiores al 90%. La prueba Anova por dos factores (intra e inter días) para la evaluación de precisión durante 30 días alcanzó los p-valores de superiores a 0,05, lo que significa un cumplimiento del objetivo. Es evidente que el sistema tiene un buen modo de extracción ya que logra preconcentrar los analitos a casi la misma concentración de una inyección directa. Este proceso puede considerarse un proceso alternativo de la microextracción SPME con recubrimientos convencionales. El proceso fue optimizado en base a variables críticas de extracción, debido a la baja concentración de las moléculas de interés y los buenos factores de preconcentración logrados, se reporta alta detectabilidad, arrojando bajos límites de detección y cuantificación.

REFERENCIAS

- [1] C. L. Arthur and J. Pawliszyn, Solid phase microextraction with thermal desorption using fused silica optical fibers, *Anal. Chem.*, 62, 19 (1990) 2145–2148.
- [2] J.A. Fiscal-Ladino, et al., Ionic liquids intercalated in montmorillonite as the sorptive phase for the extraction of low-polarity organic compounds from water by rotating-disk sorptive extraction, *Anal. Chim. Acta*, 953 (2017) 23-31.



MATERIALES DE REFERENCIA: EFECTO DE LA LIXIVIACIÓN SOBRE LA INCERTIDUMBRE DEL VALOR CERTIFICADO.

Juliana Serna Saiz , Paula Lucía Sanchez Garcia , Diego Alejandro Ahumada Forigua
Instituto Nacional de Metrología

dahumada@inm.gov.co

PALABRAS CLAVE: Materiales de referencia, incertidumbre

INTRODUCCIÓN

Los materiales de referencia certificados (MRC), son una de las herramientas más valiosas para brindar confiabilidad, validez y trazabilidad metrológica a las mediciones realizadas; estos pueden ser clasificados en materiales de referencia de alta pureza o de matriz, siendo los primeros indispensables para el establecimiento de trazabilidad metrológica [1].

MÉTODOS

Se prepararon 7 MRC mono elementales de Ca, Na, K, Mg, Fe, Zn y Cd a una concentración nominal de 1000 mg/kg. Estas soluciones fueron caracterizadas por las técnicas de Espectrometría de Absorción Atómica (EAA), Cromatografía Iónica (CI) y Espectrometría de Masas con Plasma Acoplado Inductivamente (ICP MS)

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En el estudio de homogeneidad y estabilidad , se encontró que cada uno de los lotes presentó una homogeneidad y estabilidad aceptables [2]. En la asignación del valor se obtuvieron concentraciones 973mg/kg y 1019mg/kg. En la estimación de incertidumbre se encontró que para MRC de Ca, Mg y Zn, la caracterización fue el componente de incertidumbre más importante. Por otro lado, por primera vez se reportan la inclusión de un componente de incertidumbre asociado a la lixiviación del envase (ampollitas de vidrio), en las cuales se almacena el material. Dicha estimación de incertidumbre, se realizó a través de algunas de las características de desempeño del método o a través de las curvas de lixiviación para los elementos que fue posible cuantificar. Los resultados indicaron que los elementos que más aportan a la incertidumbre corresponden a Na, Mg y Zn. Elementos como Fe, Cd y Pb no fueron detectados.

REFERENCIAS

- [1] Van der Veen, A. M. (2015). Revision of ISO Guide 33: good practice in using reference materials. Accreditation and Quality Assurance, 20(6), 529-532.
- [2] Ellison, S. L., & Botha, A. (2018). Principles for the assessment of homogeneity and stability in the new ISO Guide 35: 2017. Accreditation and Quality Assurance, 23(1), 47-51.



DETERMINACIÓN DE α -pirrolidinopentiofenona (α -PVP) MEDIANTE UN BIOSENSOR ELECTROQUÍMICO BASADO EN LA ENZIMA CYP2D6

Andrés Felipe Lugo Vargas^{1,2}, William Giovanni Quevedo Buitrago², Diana Carolina Chaves Silva², Jaime Fernando Martínez Suárez¹

1. Semillero de Investigación Electroquímica de Sistemas Biológicos, Moléculas Orgánicas Pequeñas y Polímeros, Grupo de Investigación en Productos Naturales Amazónicos, Universidad de la Amazonia, Calle 17 Diagonal 17 con Carrera 3F, Florencia, Colombia.
2. Grupo de investigación en sustancias psicoactivas, Maestría en Toxicología, Universidad Nacional de Colombia, Carrera 45 # 26-85, Edificio Uriel Gutiérrez Bogotá, Colombia.

alugov@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE : Drogas de diseño, biosensor electroquímico, citocromo P450, catinonas sintéticas.

INTRODUCCIÓN

α -PVP pertenece a la familia de las catinonas sintéticas¹, su detección se realiza a través de pruebas colorimétricas y generan resultados poco confiables. En el presente trabajo se presenta una alternativa para la detección y cuantificación de α -PVP a través de biosensor electroquímico basado en la enzima CYP2D6.

MÉTODOS

La α -PVP y reactivos fueron grado analítico. Se emplearon electrodos serigrafiados de carbón vítreo y un potenciostato 797 VA Computrace. La inmovilización de CYP2D6 se realizó por metodologías reportadas¹. La cuantificación se realizó mediante DPV en un rango de 0,5 a 100 μ M en tampón fosfato 0,1 M a pH 7.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

El electrodo en sus diferentes etapas de modificación (desnudo, enlace covalente con nitrobenzeno, reducción electroquímica del grupo nitro y enlace tipo amida de CYP2D6) se caracterizó por VC en presencia de la cupla redox ferro/ferri, observándose una significativa disminución de la intensidad de corriente de pico y reversibilidad de la cupla redox, especialmente en la etapa de unión covalente de la enzima CYP2D6, estos resultados indican la efectiva modificación de la superficie del electrodo serigrafiado. El límite de detección y rango de detección de α -PVP por DPV en condiciones optimizadas fue 0,29 μ A μ M⁻¹ y 0,5 a 10 μ M, respectivamente.

REFERENCIAS

- (1) Nóbrega, L.; Dinis-Oliveira, R. J. The Synthetic Cathinone α -Pyrrolidinovalerophenone (α -PVP): Pharmacokinetic and Pharmacodynamic Clinical and Forensic Aspects. *Drug Metab. Rev.* 2018, 50 (2), 125–139. <https://doi.org/10.1080/03602532.2018.1448867>.
- (2) UNODC. Métodos Recomendados Para La Identificación y El Análisis de Las Catinonas Sintéticas En Los Materiales Incautados; Nueva York, 2016.
- (3) Asturias-arribas, L.; Alonso-lomillo, M. A.; Domínguez-renedo, O.; Arcos-martínez, M. J. Sensitive and Selective Cocaine Electrochemical Detection Using Disposable Sensors. *Elsevier B.V.* 2014, 834, 30–36. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2014.05.012>.



SLACL-540

PREPARACIÓN Y CERTIFICACIÓN DE UN MATERIAL DE UN MATERIAL DE REFERENCIA CERTIFICADO DE AFLATOXINA B1 EN ACETONITRILLO

Laura V, Morales E.; Silvia Ramírez; Juliana Serna; Yeraldin Aguilar; Ivonne A. González; Diego A. Ahumada

Grupo de investigación en metrología química y biomedicina, Instituto Nacional de Metrología de Colombia, Bogotá D.C, Colombia.

lvmorales@inm.gov.co

INTRODUCCIÓN

A nivel mundial, las micotoxinas han generado pérdidas millonarias en el comercio mundial. Estos compuestos son toxinas naturales que se generan a partir de algunas especies de hongos y pueden estar presentes en los alimentos, generando un riesgo para la salud del consumidor.

MÉTODOS

En este trabajo se desarrolló un MRC de aflatoxina B1 en acetonitrilo, el cual fue preparado de manera gravimétrica de acuerdo con lo establecido en la ISO 170341. Su homogeneidad y estabilidad fueron evaluadas acorde a la guía ISO 352, empleando espectrofotometría UV-Vis y HPLC-DAD. La asignación del valor del material se llevó a cabo por gravimetría y fue confirmado por HPLC-DAD.

RESULTADOS

En el proceso de evaluación de la homogeneidad se encontró una incertidumbre del 0.16 % para el lote producido, lo cual corresponde a un grado de homogeneidad acorde con este tipo de materiales. Por otro lado, en la evaluación de la estabilidad no se detectó ninguna tendencia asociada al cambio de concentración en función del tiempo, sin embargo se estimó la incertidumbre relacionada con el proceso de evaluación de la inestabilidad del 0.34%. La determinación del valor certificado se basó en el proceso de preparación gravimétrica del material, a partir del cual se obtuvo un valor certificado de 4.001 mg/kg. Finalmente, al combinar las fuentes de incertidumbre: homogeneidad, estabilidad y caracterización se determinó que el valor certificado es de 4.001 mg/kg \pm 0.088 mg/kg. Finalmente, se concluyó que el material producido es suficientemente homogéneo y estable y es adecuado para su uso en la calibración analítica de métodos de medición que miden el contenido de aflatoxina B1, la evaluación del desempeño de métodos y su validación.

REFERENCIAS

- (1) International Organization for Standardization (ISO). ISO 17034:2016- General Requirements for the Competence of Reference Material Producers. ISO, Geneva; 2016.
- (2) International Organization for Standardization (ISO). ISO GUIDE 35:2017 Reference Materials — Guidance for the Characterization and the Assessment of the Homogeneity and Stability of the Material. Geneva, Switzerland 2017.



QUÍMICA DE ALIMENTOS

ILKCL-269

CHEMICAL CHARACTERIZATION OF TEQUILA MATURATION PROCESS AND THEIR CONNECTION WITH THE PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF THE CASK

Walter M. Warren-Vega^{ab}, Rocío Fonseca-Aguíñaga^c, Linda V. González Gutiérrez^d, Francisco Carrasco-Marín^e, Ana I. Zárate-Guzmán^d, Luis A. Romero Cano^{af}

^aGrupo de Investigación en Materiales y Fenómenos de Superficie. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Autónoma de Guadalajara. Av. Patria 1201, C.P. 45129. Zapopan, Jalisco. MEXICO.

^bCentro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica (CIDETEQ) S.C., Parque Tecnológico Sanfandila, Pedro Escobedo, Querétaro, 760703, MEXICO

^cLaboratorio de Isotopía. Consejo Regulador del Tequila A. C. Av. Patria 723, C.P. 45030. Zapopan, Jalisco. MEXICO.

^dGrupo de Investigación en Materiales de Carbón, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Av. Fuente Nueva s/n, Granada, C.P. 18071, Spain

* corresponding author: luis.cano@edu.uag.mx

KEY-WORDS: Tequila-maturation, Kinetic-models, Polyphenols-extraction, Thermic-treatment

INTRODUCTION

The effect of time in the maturation process of Tequila employing two types of casks was studied: A new (labeled as Cask-New) and a medium-toasted cask (15 min at 200 °C) (labeled as Cask-MT). For that purpose, the wood used in the casks had a physicochemical characterization

METHODS

by Energy-dispersive X-ray spectroscopy, Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR), X-ray Photoelectron Spectroscopy, Scanning Electronic Microscope and physisorption of nitrogen; and its properties were contrasted with the physicochemical characterization of the beverage throughout the maturation time studied by FTIR, UV-Vis spectroscopy, and with the determination of isotopic ratios $\delta^{13}\text{CVPDB}$ and $\delta^{18}\text{OVSMOW}$.

RESULTS AND CONCLUSIONS

Results show that woods used are essentially mesoporous with SBET of 1.83 and 0.81 m²g⁻¹. The $\delta^{13}\text{CVPDB}$ values were a range of 12.0-13.5‰, related to species of Agave tequilana Weber blue variety used in sugar's fermentation, Crassulacean Acid Metabolism plants which have a $\delta^{13}\text{CVPDB}$ in a range of -12 to -30‰. $\delta^{18}\text{OVSMOW}$ analysis (average = +24.17‰) for Cask-New and (average = +23.13‰) for Cask-MT. These values are higher and positive than ones from silver-class tequila². The kinetic maturation study of tequila- 100% agave, by UV-Visible spectra was made from t=0 to t=12 months. A band was observed at 280 nm (Total- Polyphenols-Index I280). In the region from 320-360 nm (Total-Flavonoid-Index I365). Best model that represented I280 and I365 extraction was proposed by Minchev & Minkov³. Extraction rate constants explained process is slower in Cask-MT due to textural characteristics of the toasting stage, which collapses mesoporous structures having mass transfer limitations. Results obtained allow a better description of the maturation process.

REFERENCES

- (1) Aguilar-Cisneros, B. O.; López, M.; Richling, E.; Heckel, F.; Schreier, P. Tequila Authenticity Assessment by Headspace SPME-HRGC-IRMS Analysis of 13 C/12 C and 18 O/ 16 O Ratios of Ethanol. *J. Agric. Food Chem.* 2002, 50, 7520–7523. <https://doi.org/10.1021/jf0207777>.
- (2) Fonseca-Aguíñaga, R.; Gómez-Ruiz, H.; Miguel-Cruz, F.; Romero-Cano, L. A. Analytical Characterization of Tequila (Silver Class) Using Stable Isotope Analyses of C, O and Atomic Absorption as Additional Criteria to Determine Authenticity of Beverage. *Food Control* 2020, 112 (February), 107161. <https://doi.org/10.1016/j.foodcont.2020.107161>.
- (3) Balyan, U.; Verma, S. P.; Sarkar, B. Phenolic Compounds from Syzygium Cumini (L.) Skeels Leaves: Extraction and Membrane Purification. *J. Appl. Res. Med. Aromat. Plants* 2019, 12 (January), 43–58. <https://doi.org/10.1016/j.jarmap.2018.12.002>.



SLKCL-118

OBTENCIÓN DE EXTRACTOS ANTIOXIDANTES DE CÁSCARA DE MANDARINA (C. RETICULATA VAR. ARRAYANA) Y SU USO COMO AGENTE PROTECTOR CONTRA LA OXIDACIÓN LIPÍDICA DE UNA MAYONESA.

Franco-Arnedo, G.¹ Buelvas-Puello, L.M.² Miranda-Lasprilla, D.³ Martínez-Correa, H.A.⁴ Parada-Alfonso, F.^{1*}
¹Laboratorio de Fluidos Presurizados, Grupo de investigación en Química de Alimentos, Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Carrera 30 No. 45-03, 111321, Bogotá D.C., Colombia.
²Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad Nacional de Colombia, Carrera 30 No. 45-03, 111321, Bogotá D.C., Colombia.
³Departamento de Ingeniería, Universidad Nacional de Colombia, 32th Avenue #12-00, 763533, Palmira, Colombia.
⁴Autor de correspondencia E-mail: fparadaa@unal.edu.co (Fabián Parada-Alfonso)

Dirección postal: Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Carrera 30 No. 45-03, 111321, Bogotá D.C., Colombia. Tel: +57 3114750329.

KEY-WORDS: Valorización de cáscaras de mandarina, extracción con fluidos supercríticos, antioxidantes naturales en mayonesa.

INTRODUCCIÓN

Por medio de la extracción con fluidos supercríticos (SFE) fue posible obtener, a partir de cáscaras de mandarina (TP, *Citrus reticulata* var. Arrayana), un extracto antioxidante para ser probado en una mayonesa.

MÉTODOS

Las TP fueron sometidas a extracción Soxhlet (SE) usando etanol (EtOH), y SFE usando CO-EtOH como solvente. Aplicando diseño central compuesto fue evaluado efecto de temperatura (T), presión (P) y % cosolvente sobre rendimiento, contenido total de fenoles (TPC), contenido total de flavanonas (TFC) y capacidad antioxidante (AC, método DPPH).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

SFE presentó menor rendimiento; mayor TPCs, TFCs y porcentajes de inhibición en comparación a SE. En SFE, la temperatura y la presión tuvieron efectos positivos sobre la AC. Los extractos SFE fueron analizados por UHPLC-DAD, identificando tentativamente ocho flavonoides. El extracto más activo fue obtenido a 22.0 MPa, 80 °C y 5.0% (p/p) EtOH. Este extracto fue probado como antioxidante en una mayonesa a diferentes concentraciones, monitoreando TBARS (Thiobarbituric Acid Reactive Substances). Dicho extracto protegió la mayonesa contra la oxidación lipídica de manera similar al antioxidante sintético BHA. Los resultados obtenidos en este trabajo conforman una propuesta promisoriosa para valorizar las TP.



SLKCL-128

USO DE UNA RELACIÓN INSTRUMENTAL-SENSORIAL PARA EVALUAR TEXTURA DURANTE EL DISEÑO DE UN PONQUÉ CON ADICIÓN DE CASCARILLA DE CACAO

Jorge Villamizar Villamizar,^{1*} Liliam Palomeque Forero.²

¹Maestría en Ciencia y Tecnología de Alimentos – Programa Interfacultades – Universidad Nacional de Colombia – Sede Bogotá

²Departamento de Química – Facultad de Ciencias - Universidad Nacional de Colombia – Sede Bogotá

*jeduvilla20@gmail.com

PALABRAS CLAVES: sensorial ponqué textura TPA

INTRODUCCIÓN

La selección, entrenamiento y mantenimiento de un panel sensorial implican la inversión de tiempo y recursos que lo pueden hacer poco sostenible. Considerando lo anterior, se propuso determinar una especificación de textura a partir de una relación entre datos instrumentales tipo TPA y la percepción sensorial de un grupo consumidores

MÉTODOS

Texture profile analysis con texturómetro TXTA plus y evaluación sensorial con consumidores utilizando escalas diferenciales semánticas de 5 puntos y escalas de agrado de 5 puntos

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se encontró que la especificación de firmeza instrumental debe ser igual a 8,14 N con una desviación estándar de 1,58 N; si una muestra de ponqué cumple esta especificación, se supone que su textura tendrá una mayor probabilidad de aceptación por parte de los consumidores. Para aplicar la especificación se analizan los productos usando el protocolo establecido y los datos se comparan estadísticamente con un conjunto de datos simulados de distribución normal; en este caso como ya se contaba con el conjunto de datos del producto comercial, simplemente se comparó estadísticamente contra una fórmula del ponqué con adición de fibra. Al aplicar la especificación, se encontró que la fórmula diseñada del ponqué no se encuentra exactamente dentro de esta, pero tampoco se encuentra muy lejos de cumplirla, por lo que probablemente con un pequeño ajuste en la formulación, se logre un producto más aceptado en términos de textura

REFERENCIAS

- [1] Bourne, M. (2002). Food Texture and Viscosity: Concept and Measurement . Academic Press.
- [2] Varela, P., & Gastón, A. (2012). Sensory profiling, the blurred line between sensory and consumer science. A review of novel methods for product characterization. Food Research International, 893-908.
- [3] Matos, P., Di Luccio, M., Wüst, A., Zavariz, M., & De Francisco, A. (2016). Relationship between instrumental and sensory texture profile of bread loaves made with whole-wheat flour fat replacer. Journal of Texture Studies, 14-23



DISEÑO DE UN PRODUCTO HORNEADO ADICIONADO CON FIBRA DIETARIA PROVENIENTE DE LA CASCARILLA DE CACAO (*Theobroma cacao* L.)

Laura Melissa Ramírez Gómez,¹ Liliam Alexandra Palomeque Forero.²

¹Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos, Grupo de Investigación en Química de Alimentos, Universidad Nacional de Colombia, Carrera 30 No. 45-03 Edificio 500A, Bogotá D.C., Colombia, 111321

²Grupo de Investigación en Química de Alimentos, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Universidad Nacional de Colombia, Carrera 30 No. 45-03, 111321, Bogotá D.C., Colombia.

*lamramirezgo@unal.edu.co

PALABRAS CLAVES: Residuo Cacao Fibra Diseño

INTRODUCCIÓN

La cascarilla de cacao es un subproducto agroindustrial, su disposición representa un desaprovechamiento de componentes de interés y ocasiona problemas ambientales. Este proyecto diseña un producto horneado con la inclusión de la cascarilla para darle un valor agregado y obtener un producto que se destaque por su contenido de fibra.

MÉTODOS

Análisis proximal, determinación de minerales y análisis microbiológico de la cascarilla.

Propiedades fisicoquímicas de la harina de cascarilla.

Diseño del producto horneado, análisis de textura y color.

Análisis de consumidores para determinar aceptación sensorial.

Estudio de vida útil microbiológico (propiedades fisicoquímicas y microbiológicas)

Escalamiento teórico y análisis económico del proceso.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se diseñó un producto horneado tipo brownie con reemplazo del 40 % de harina de trigo por harina de cascarilla de cacao. Una porción de 75g es una buena fuente de fibra dietaria, al aportar 16 % del valor diario recomendado. Para el diseño, se tuvieron en cuenta las propiedades fisicoquímicas, microbiológicas y tecno-funcionales de la cascarilla y se evaluó el efecto de la inclusión en las propiedades fisicoquímicas, microbiológicas, sensoriales y en la vida útil del producto. El 60 % de la composición de la cascarilla corresponde a fibra dietaria y debe ser sometida a un tratamiento térmico de 140 °C durante una hora. El brownie se destaca por su valor nutricional, es apto para el consumo humano, fue aceptado sensorialmente y tiene una vida útil de seis días a condiciones de almacenamiento medio ambientales. El proceso de producción fue escalado teóricamente y se hizo un análisis económico del mismo.

REFERENCIAS

- [1] Okiyama, D. C. G.; Navarro, S. L. B.; Rodrigues, C. Cocoa Shell and Its Compounds: Applications in the Food Industry. *Trends Food Sci. Technol.* 2017, 63, 103–112. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2017.03.007>.
- [2] Campos-Vega, R.; Nieto-Figueroa, K. H.; Oomah, B. Cocoa (*Theobroma Cacao* L.) Pod Husk: Renewable Source of Bioactive Compounds. *Trends Food Sci. Technol.* 2018, 81, 172–184. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2018.09.022>.
- [3] Vásquez, Z. S.; de Carvalho Neto, D. P.; Pereira, G. V.; Vandenberghe, L. P. S.; de Oliveira, P. Z.; Tiburcio, P. B.; Rogez, H. L. G.; Góes Neto, A.; Soccol, C. R. Biotechnological Approaches for Cocoa Waste Management: Review. *Waste Manag.* 2019, 90, 72–83. <https://doi.org/10.1016/j.wasman.2019.04.030>.



Influencia del proceso de preparación de la muestra en la determinación del contenido de materia seca en aguacate Hass (*Persea americana*. Mill. Var. Hass).

Giraldo, J. M.; Ramírez, S.L.; González, I. A.; Barrios-Guio, J.

Subdirección de Metrología Química y Biología, Instituto Nacional de Metrología de Colombia, Bogotá. E-mail: jmgiraldo@inm.gov.co

Palabras clave: Aguacate variedad Hass, Materia seca, Incertidumbre de medición.

Introducción

Se presenta el estudio de la medición del contenido de materia seca en aguacate Hass, destacando la relevancia de la preparación de la muestra como factor determinante en el resultado, adicionalmente, se presentan herramientas para la estimación de la incertidumbre de medición de los valores obtenidos

Métodos

Secado en horno convencional, método gravimétrico, Análisis estadísticos de Datos.

Resultados y Conclusiones

Resultados

El proceso de preparación de la muestra es un factor decisivo en la determinación del contenido de materia seca en aguacate Hass en estado verde de madurez, ya que se encontraron diferencias estadísticamente significativas entre los resultados obtenidos mediante varios tipos de procesamiento. Lo anterior, podría representar valores incorrectos del parámetro y por tanto implican el riesgo de tomar decisiones erróneas sobre el tiempo óptimo de cultivo, generando una disminución de la calidad del producto y por tanto pérdidas económicas para el productor.

Conclusiones

1. En condiciones de repetibilidad se estableció el coeficiente de variación de 3 % para muestras de aguacate Hass en estado verde de madurez.
2. Se estableció el intervalo de peso constante correspondiente a la medición de 0.15 g/100 g.
3. La máxima incertidumbre de medición del contenido de materia seca en aguacate Hass en estado verde de madurez es 0.49 g/100 g.

Referencias

- [1] Colombia se afianza como tercer mayor exportador mundial de aguacates |Agronoticias: Actualidad agropecuaria de América Latina y el Caribe |Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y la Agricultura [Internet]. [cited 2021 Mar 31]. Available from: <http://www.fao.org/inaction/agronoticias/detail/es/c/1029614/>.
- [2] Parodi G, Parodi G, Sanchez M, Daga W. Correlación del contenido de aceite, materia seca y humedad de pulpa como indicadores de cosecha en Frutos de Palto (*Persea americana* Mill) Var. Hass cultivado bajo condiciones de dos localidades en Chincha-Perú. Proc VI World Avocado Congr. 2007;(978):12–6.



SLKCL-191

Validación de método y determinación de cadmio, plomo y zinc en granos de cacao por la técnica de digestión asistida por microondas con espectrometría de absorción atómica.

Felipe Arcila-Zambrano,^{1,2} Olga I. Vallejo-Vargas,^{1,2} Carlos H. Montoya-Navarrete,^{1,2} Leonard Beltrán-Angarita.^{1,3,4} *

¹Grupo de Estudio del Recurso Hídrico, Escuela de Química, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.

²Laboratorio de Análisis de Aguas y Alimentos, Escuela de Química, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.

³Facultad Ciencias de la Salud, Unidad Central del Valle del Cauca, Colombia

⁴Facultad de Medicina, Fundación Universitaria de las Américas, Colombia

* lbeltran@utp.edu.co

Palabras Claves: Cadmio, Cacao, Absorción Atómica, Validación.

Introducción

Niveles máximos de cadmio en productos de cacao en el rango de 100-800 µg/Kg han sido establecidos. Se validó un método fácil y rápido para determinación de Cadmio, Plomo y Zinc en granos de cacao basado en la técnica de digestión-ácida asistida por microondas antes de la cuantificación utilizando Espectrometría de Absorción Atómica

Métodos

Se estimaron los parámetros de validación linealidad, exactitud, precisión, límite de detección, límite de cuantificación y medición de incertidumbre. La validación del método siguió el protocolo de las guías EURACHEM. Se procesaron 5 muestras de granos de cacao para verificar la aplicabilidad del método.

Resultados y conclusiones

El límite de cuantificación encontrado varió de 10 a 25 µg/kg. Las recuperaciones de metales pesados a niveles de 250 y 1000 µg/kg oscilaron entre 96,27-108,75. Los valores de % RSD obtenidos fueron todos inferiores al 15% y las medidas de incertidumbre expandida para los elementos fueron inferiores al 25%. En las muestras se obtuvieron valores < 100µg/Kg. En este estudio, se validó con éxito la cuantificación de Cd, Pb y Zinc en granos de cacao mediante una técnica de digestión-ácida asistida por microondas y analizada por AAS. Se considera una técnica confiable y rápida para el análisis de trazas de metales de productos de cacao. El método mostró una buena selectividad, linealidad, límite de detección/cuantificación, recuperación y precisión aceptable según los criterios de validación de EURACHEM. El nivel de concentración de los metales estudiados en los granos de cacao es inferior al nivel alarmante.

Referencias

- [1] European Commission (2006). Regulation (EC) no 1881/2006. (2014). National Food Safety Standard of Maximum Levels of Contaminants in Foods.
- [2] CODEX (2017). Subject request for comments at step 3 on proposed draft maximum levels for cadmium in chocolate and cocoa-derived products 2017.Codex, 150(2017/24).
- [3] Magnusson, B., & Örnemark, U. (2014). Eurachem guide: The fitness for purpose of analytical methods—A laboratory guide to method validation and related topics.Eurachem Guide(2nded.). ISBN 978-91-87461-59-0.
- [4] Meter A., Atkinson R.J. and Laliberte B. (2019).Cadmium in Cacao from Latin America and the Caribbean—A Review of Research and Potential Mitigation Solutions. Bioversity International, Rome, October 2019.



SLKCL-285

Extracción verde de compuestos bioactivos presentes en los residuos del beneficio del cacao (*Theobroma cacao*. L.)

Vladimir Ernesto Vallejo-Castillo,* Juan David Benavides-Gómez, Angie Daniela Solarte-Romo.

Universidad Mariana

*vevallejo@umariana.edu.co

Palabras clave: Cacao, Extracción, polifenoles, flavonoides.

Introducción

En el proceso de beneficio del cacao se generan diversos residuos como el epicarpio del fruto, sin embargo este residuo se dispone directamente al suelo o a rellenos sanitarios. El cual es una fuente de compuestos bioactivos con actividad antioxidante susceptibles de recuperarse mediante técnicas de extracción verde [1].

Métodos

Para establecer el tiempo óptimo de extracción de polifenoles y flavonoides del residuo, se realizó una extracción acuosa con agitación orbital durante 3 horas a 30°C, utilizando una relación de muestra a solvente de 1:40 (g:mL). Finalmente, se realizó un análisis de varianza y una prueba de Tukey ($p < 0,05$).

Resultados y Conclusiones

La cinética de extracción verde indicó que la velocidad de transferencia de masa es alta hasta los 15 minutos debido a la diferencia de concentración de los compuestos bioactivos entre el solvente y la muestra. A partir de los 45 minutos se alcanza un equilibrio en esta velocidad, lo cual se evidenció mediante el análisis estadístico. El extracto óptimo presentó una concentración de $1472,42 \pm 19,15$ mg GAE/100 g FW y $1170,16 \pm 21,12$ mg CE/100 g FW para polifenoles y flavonoides, respectivamente.

Estos valores están dentro del rango informado por otros estudios que utilizan solventes que tienen un impacto ambiental negativo y son difíciles de reutilizar [2,3]. De acuerdo a la cinética de extracción de polifenoles y flavonoides se observó que los primeros minutos de extracción son los más eficientes. Por lo tanto, empleando una tecnología verde y económica se logró obtener un extracto con un alto contenido de compuestos bioactivos con diversas aplicaciones agroindustriales.

Referencias

- [1] Ellam, S.; Williamson, G. Cocoa and Human Health. *Annu. Rev. Nutr.* 2013, 33, 105–128. <https://doi.org/10.1146/annurev-nutr-071811-150642>.
- [2] Yapo, B. M.; Besson, V.; Koubala, B. B.; Koffi, K. L. Adding Value to Cacao Pod Husks as a Potential Antioxidant-Dietary Fiber Source. *Am. J. Food Nutr.* 2013, 1 (3), 38–46. <https://doi.org/10.12691/ajfn-1-3-4>.
- [3] Campos-Vega, R.; Nieto-Figueroa, K. H.; Oomah, B. D. Cocoa (*Theobroma Cacao* L.) Pod Husk: Renewable Source of Bioactive Compounds. *Trends Food Sci. Technol.* 2018, 81 (November 2017), 172–184. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2018.09.022>.



SLKCL-287

Valorización de residuos de plazas de mercado para la obtención de compuestos bioactivos

William Alexander Diaz-Lopez,* Vladimir Ernesto Vallejo-Castillo, Esteban Hernan Arteaga-Cabrera, Kimberly Yaritza Vallejo-Escobar, Gregory Ordoñez-Gomez, Oswaldo Osorio-Mora.

Universidad de Nariño

*williamdiaz@udenar.edu.co

Palabras claves: cítricos, residuos, ultrasonido, polifenoles

Introducción

En las plazas de mercado se producen grandes cantidades de residuos de frutas como cítricos principalmente la naranja y mandarina. Los cuales se desechan directamente a rellenos sanitarios. Sin embargo, estos contienen alta cantidad de compuestos bioactivos de interés en la industria química, farmacéutica y de alimentos.

Métodos

Con el fin de maximizar la recuperación de polifenoles, flavonoides y actividad antioxidante de los residuos de naranja, mandarina y su mezcla. Se realizó una cinética de extracción asistida por ultrasonido con solvente etanol-agua al 50% (v/v) durante 90 minutos a 40°C y relación muestra a solvente de 1:40 (g/mL).¹

Resultados y conclusiones

La cinética de extracción de polifenoles, flavonoides y actividad antioxidante indicó que la velocidad de transferencia de masa aumenta rápidamente durante los 10 minutos de extracción para los dos residuos y su mezcla, a partir de este tiempo se reduce hasta alcanzar un equilibrio. La mezcla de residuos de naranja y mandarina en partes iguales presentó el mayor contenido de compuestos bioactivos. El análisis estadístico estableció que el tiempo máximo de extracción de polifenoles y flavonoides fue de 60 y 50 minutos, respectivamente. Con un valor para polifenoles de 2557,37±58,55 mg GAE/100 gFW, y para flavonoides de 583,88±10,81 mg CE/100 gFW con una actividad antioxidante de 3089,07±140,10 µmol TE/100 gFW. Estos valores se encuentran dentro del rango informado por otros estudios que utilizan tecnologías emergentes.^{2,3} Se confirma que la aplicación de ultrasonidos en extracción de compuestos bioactivos reduce tiempos, costos y es eficiente para obtener extractos de residuos de cítricos con una actividad antioxidante efectiva.

Referencias

- [1] Vallejo-Castillo, V.; Rodríguez-Stouvenel, A.; Martínez, R.; Bernal, C. Development of Alginate-Pectin Microcapsules by the Extrusion for Encapsulation and Controlled Release of Polyphenols from Papaya (Carica Papaya L.). *J. Food Biochem.* 2020, 44 (9), 1–17. <https://doi.org/10.1111/jfbc.13331>.
- [2] Khan, M. K.; Abert-Vian, M.; Fabiano-Tixier, A. S.; Dangles, O.; Chemat, F. Ultrasound Assisted Extraction of Polyphenols (flavonone Glycosides) from Orange (Citrus Sinensis L.) Peel. *Food Chem.* 2010, 119 (2), 851–858. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2009.08.046>.
- [3] Luengo, E.; Álvarez, I.; Raso, J. Improving the Pressing Extraction of Polyphenols of Orange Peel by Pulsed Electric Fields. *Innov. Food Sci. Emerg. Technol.* 2013, 17, 79–84. <https://doi.org/10.1016/j.ifset.2012.10.005>.



SLKCL-296

Evaluación de la actividad antifúngica de los aceites esenciales de tomillo (*Thymus vulgaris*) y limón (*Citrus lemon*) contra *Botrytis* sp. causante del moho gris en uchuva (*Physalis peruviana* L.)

Angie Vaca Portillo,* Oswaldo Osorio.

Universidad de Nariño

*angievacap@gmail.com

Palabras clave: Aceites esenciales, actividad antifúngica

Introducción

Actualmente los aceites esenciales son ampliamente estudiados debido a su alto potencial antimicrobiano, tornándose como un enfoque alternativo o complementario de los fungicidas sintéticos. La finalidad del presente estudio es evaluar de manera in vitro la actividad antifúngica de los aceites esenciales de tomillo y limón frente a *Botrytis* sp.

Métodos

Se utilizó diferentes concentraciones de los aceites esenciales por el método de agar envenenado con Agar Papa Dextrosa (APD), Benomil al 0.05% como control positivo y PDA y Tween 80 al 0,05% como control negativo. Se midió el crecimiento micelial hasta los 15 días. También se determinó la actividad fungistática.

Resultados y conclusiones

Como resultados se obtuvo que la concentración mínima inhibitoria (CMI) para el aceite esencial de limón fue de 2%, mientras que para tomillo fue de 0,1%. Posteriormente en la evaluación de la actividad fungistática para ambos, se demostró que los aceites esenciales actuaron como fungicidas, ya que los aislamientos tratados no se desarrollaron en un medio sin tratamiento. Como conclusiones se tiene que el aceite esencial de tomillo es eficaz en concentraciones más bajas que el aceite esencial de limón. Así pues el mecanismo de acción de los aceites esenciales se atribuye a sus componentes mayoritarios, como lo son el timol y carvacrol para el aceite esencial de tomillo,¹ como el limoneno y β -pineno para el aceite esencial de limón.² Además siendo los aceites esenciales fungicidas, se abre camino para investigaciones futuras sobre su incorporación directa en las frutas y así prolongar su vida útil.

Referencias

- [1] Reyes-Jurado, F.; Cervantes-Rincón, T.; Bach, H.; López-Malo, A.; Palou, E. Antimicrobial Activity of Mexican Oregano (*Lippia Berlandieri*), Thyme (*Thymus Vulgaris*), and Mustard (*Brassica Nigra*) Essential Oils in Gaseous Phase. *Ind. Crops Prod.* 2019, 131, 90–95. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2019.01.036>.
- [2] Ammad, F.; Moumen, O.; Gasem, A.; Othmane, S.; Hisashi, K. N.; Zebib, B.; Merah, O. The Potency of Lemon (*Citrus Limon* L.) Essential Oil to Control Some Fungal Diseases of Grapevine Wood. *Comptes Rendus Biol.* 2018, 341 (2), 97–101. <https://doi.org/10.1016/j.crv.2018.01.003>.



Polifenoles y actividad antioxidante en porotos autóctonos chilenos (*Phaseolus vulgaris* L.)

Nélida Nina,^{1*} Cristina Theoduloz,² Guillermo Schmeda-Hirschmann.¹

¹Instituto de Química de Recursos Naturales, Universidad de Talca, Talca, Chile

²Laboratorio de Cultivo Celular, Facultad de Ciencias de la Salud, Universidad de Talca, Talca, Chile

*nelidanina@gmail.com

Palabras clave: *Phaseolus vulgaris*, polifenoles, antioxidantes

Introducción

Los porotos son legumbres de origen americano. De las variantes sudamericanas, emergen tres razas Nueva Granada, Perú y Chile. Los estudios químicos sobre accesiones de la raza Chile son escasos. El objetivo fue caracterizar los metabolitos secundarios, en porotos locales (“landraces”) de la raza Chile y evaluar su actividad antioxidante.

Métodos

Se investigaron once variedades locales de porotos. La extracción de metabolitos fue con MeOH/H₂O(7:3) y se adsorbieron en Amberlita XAD-7 para obtener extractos enriquecidos (PEE). Los PEE fueron analizados por HPLC-DAD-MS/MS. Se cuantificaron contenidos totales de fenólicos, flavonoides y procianidinas, la capacidad antioxidante se evaluó DPPH, ORAC, FRAP y TEAC.

Resultados y conclusiones

Los perfiles de HPLC de las muestras investigadas, permitió diferenciar las landraces en tres grupos principales. Estos incluyen accesiones ricas en flavonoides, catequina/procianidinas y un grupo con tenor de saponinas. Dentro de los flavonoides, se han identificado derivados de kaempferol y quercetina. En el segundo grupo, se encuentran procianidinas y derivados glicosilados de catequina. No se han identificado ácidos fenólicos o derivados como productos mayoritarios, lo cuales se han reportado usualmente en cultivares de otros continentes. [1,2] Las diferencias en composición de las landraces chilenas se pueden relacionar con el color de las semillas. Las semillas coloreadas presentan flavonoides y derivados de catequina mientras que los porotos de color blanco/crema presentan menos señales relacionadas con los compuestos mencionados. Esta observación se correlaciona con el contenido de fenoles, flavonoides y procianidinas. En la actividad antioxidante, se observó que los porotos coloreados presentan elevada capacidad antioxidante respecto a los porotos de color claro.

Referencias

- [1] Lin, L. Z.; Harnly, J. M.; Pastor-Corrales, M. S.; Luthria, D. L. The polyphenolic profiles of common beans (*Phaseolus vulgaris* L.). *Food Chem.* 2008, 107, 399-410.
- [2] Luthria, D. L.; Pastor-Corrales, M. A. Phenolic acids content of fifteen dry edible bean (*Phaseolus vulgaris* L.) varieties. *J Food Comp. Anal.* 2006, 19, 205-211.



Evaluación de los niveles de arsénico y otros metales tóxicos en el arroz producido en Chile e importado para promover y asegurar la inocuidad alimentaria.

Eimmy E. Ramírez,^{1*} Karen S. Bastías,¹ Viviana L. Becerra,² Gabriel H. Donoso,² Mario O. Paredes,² Jorge C. Yáñez.^{1*}

¹University of Concepción, Faculty of Chemical Sciences, Department of Analytical and Inorganic Chemistry, Elemental Traces & Speciation Laboratory (LabTres), Concepción, Chile.

²Institute of Agricultural Research (INIA), Chillán, Avenida Vicente Méndez 515, Chile.

*eimmyramirez@udec.cl; jyanez@udec.cl

Palabras clave: Arroz, Arsénico, Espectrometría-Masa, Toxicidad

Introducción

El arsénico inorgánico es un agente cancerígeno, que se acumula en los granos de arroz. Debido a su alto consumo, el arroz es una de las principales fuentes de arsénico en la dieta. Por ello, la OMS y algunos países han establecido estrictas normativas para As en arroz y derivados.

Métodos

La determinación de As total y metales se realizó usando ICP-MS (iCAP RQ, Thermo Fisher Scientific, USA). Para la determinación de Asi, se utilizó cromatografía iónica IC (Dionex ICS-5000 IC) acoplado al ICP-MS y columna IonPac AG7 (guard column 2 x 50 mm) + IonPac AS7 (2 x 250 mm).

Resultados y conclusiones

Los resultados para las concentraciones promedio de As total y metales en arroz comercializado en Chile, según procedencia fueron los siguientes: América del Sur (Argentina N=36, Chile N=79, Paraguay N=9), 168 ± 26 µg/kg As, 13 ± 5 µg/kg Cd, 75 ± 32 µg/kg Pb y 15 ± 9 µg/kg Hg. Europa (España N=9, Italia N=9, Portugal N=3), 134 ± 27 µg/kg As, 16 ± 8 µg/kg Cd, 104 ± 31 µg/kg Pb y 8 ± 4 µg/kg Hg. Asia (India N=9, Pakistán N=9, Tailandia N=9), 114 ± 30 µg/kg As, 17 ± 7 µg/kg Cd, 80 ± 21 µg/kg Pb y 28 ± 17 µg/kg Hg. Aproximadamente el 54% del arsénico corresponde a As inorgánico (N=20) en el grano de arroz. Los niveles de arsénico y otros metales en el arroz encontrados en este estudio cumplen con la normativa nacional e internacional vigente.

Referencias

- [1] Chen, H., Tang, Z., Wang, P., Zhao, F.J. 2018. Geographical variations of cadmium and arsenic concentrations and arsenic speciation in Chinese rice. *Environ. Pollut.* 238, 482-490.
- [2] Da Rosa, F.C., Gonçalves Nunes, M.A., Duarte, F.A., de Moraes Flores, E.M.; Brito Hanzel, F., Souza Vaz, A., Pozebon, D., Dressler, V.L. 2019. Arsenic speciation analysis in rice milk using LC-ICP-MS. *Food Chemistry*. X 2, 100028.
- [3] Menon, M., Sarkarb, B., Huftona, J., Reynolds, Ch., Vazquez Reinac, Young, S. (2020). Do arsenic levels in rice pose a health risk to the UK population?. *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 197, 110601. doi.org/10.1016/j.ecoenv.2020.110601.



Evaluación de las condiciones de hidrólisis de proteínas de lactosuero a escala de laboratorio

Castellanos Baez, Y. T.¹ Aponte Colmenares, A. P.¹ Prieto Suarez, G. A.¹ Muvdi Nova, C. J.²

¹Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia – Facultad de Ciencias - Grupo de Investigación en Química y Tecnología de Alimentos – GIQTA.

²Universidad Industrial de Santander – Facultad de Ingenierías – Centro de Investigación en Ciencia y Tecnología de Alimentos – CICTA.

*yeimy.castellanos01@uptc.edu.co

Palabras clave: Hidrólisis, Lactosuero, Proteínas, Proteasas

Introducción

La industria láctea en Colombia representa uno de los eslabones principales de la economía del país y en los últimos años su desarrollo ha incrementado considerablemente. Dentro de los derivados lácteos se destacan las diferentes variedades de quesos en donde se desechan un 80% de lactosuero, ocasionando alto nivel de contaminación.

Métodos

Se realizaron análisis a un pH y temperatura de: 8.0, 9.0 y 10.0 y 55, 60 y 65 °C respectivamente, monitoreando cada 30 min por 300 min el GH gracias al método pH-stato. Por último, a las muestras con mayor grado de hidrólisis se evaluó la relación Na/Nt usando el método Kjeldahl.

Resultados y conclusiones

Los resultados mostraron que a un pH de 10 y una temperatura de 60 °C se alcanza el mayor grado de hidrólisis aproximado a un 22% y la relación Na/Nt fue de 0.057 terminado el tiempo de hidrólisis (300 min). Adicionalmente, se pudo observar que durante la inactivación enzimática se presentaron cambios de color en la solución, lo cual fue atribuido a la aparición de diferentes especies proteicas. Los resultados obtenidos son concordantes con otras investigaciones, y sugieren aplicar estas condiciones de operación en el escalado del proceso enzimático a volúmenes de 1L y 10L. Los hidrolizados de proteínas del lactosuero son productos intermediarios alimenticios (PIA) de alto valor biológico y también pueden ser utilizados como fuente de carbono y nitrógeno de bajo costo en medios de cultivo.

Referencias

[1] Duarte, P; González, J; Muvdi, C. Evaluación de las proteínas hidrolizadas del lactosuero como fuente de nitrógeno en la fermentación láctica de la lactosa. Rev. Ion **2019**, 32, 15-27.

[2] Eberhardt, A; Sihufe, G; Manzo, R. Hidrolizados enzimáticos de proteína de suero lácteo: obtención, purificación y evaluación de la presencia de propiedades bioactivas. Universidad Nacional de Cuyo **2018**, 1-13.



QUÍMICA DE MATERIALES, POLÍMEROS Y NANOTECNOLOGÍA

ILGCL-161

Cholesterol-based Amphiphilic Polymeric Nanoparticles for Improved Cancer Chemotherapy

Laura Gonzalez-Fajardo , Dennis Ndaya , Rajeswari Kasi , Xiuling Lu

University of Connecticut

key-words: Cholesterol, nanoparticles, cancer, efficacy

Introduction: Nanoparticles from amphiphilic block copolymers are deemed as flexible drug delivery platforms [1, 2]. Using cholesterol as the hydrophilic segment can confer stability and high loading to these carriers [3]. Our goal was the development of rationally designed cholesterol-based polymeric nanoparticles to improve the therapeutic index of toxic anticancer drugs.

Methods: Two cholesterol-based nanoparticles encapsulating Doxorubicin were developed and comprehensively evaluated in this study (in vitro/in vivo). The first type was formed by an amphiphilic brush-like block copolymer while the second type was a cleavable version incorporating a redox-sensitive disulfide bond in the polymer structure for bioresponsive drug release in tumors.

Results and Conclusions: Both types of developed cholesterol-based nanoparticles (non-cleavable and cleavable) were stable, successfully accumulating in tumor tissues and inhibiting tumor growth in an animal model. They also displayed better safety profiles than the free form of the drug. In addition, prove of the advantages associated to bioresponsive (cleavable) carriers was provided through comprehensive in vitro testing. These experimental outcomes validate the use of bioresponsive nanocarriers as a way to improve the efficacy of nanomedicines by facilitating drug release in the targeted tissue. Additionally, extensive evidence of the significant influence of the method of preparation on the characteristics and performance of polymeric nanoparticles was found as well, underlying the relevance of formulation optimization when developing this kind of nanomedicines. The extent in which the method of preparation can also affect the in vitro/in vivo performance of drug-loaded nanoparticles was a knowledge gap addressed by this research work.



Native starch-film formation study from Andean crops for potential sustainable bioplastics

Sandra Arroyave^a, Liliana Ávila-Martín^a, Elma Naranjo, Jairo E. Perilla^{*a}, Paulo César Narváez^b, Romel Morales^b

^aGrupo de Procesos Químicos y Bioquímicos, Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Nacional de Colombia, 111321 Bogotá D.C. Colombia ^bDepartamento de Investigación y Desarrollo, Sika Colombia S.A.S., Vereda Canavita Km. 20.5 Autopista Norte, Tocancipá-Cundinamarca, Colombia

* jeperillap@unal.edu.co

Palabras Claves: Starch, Gelatinization, film-formation, WVP

Introducción

The use of starch in industry is expanding due to its versatility in chemical and physical modifications. Film formation performance depend in great manner of the physicochemical and functional properties of native starches. In this research, films were prepared using starches from the Andean region as Achira, Plantain, Balú, Maize.

Métodos

Film properties by Optical microscopy, barrier properties ASTM E96, and mechanical properties ASTM D 882-18. Characterization of native starches by DSC, TGA, XRD, DLS, SEM, NMR. Regarding functional features, swelling power, WAI, WSI, and whiteness index. Acid-base digestion for fiber content and standard ISO 6647 for amylose content.

Resultados y Conclusiones

The results of the primary characterization showed that starches of particular species have markedly differences in physicochemical and functional properties. Maize starch exhibited the highest degree of branching while Achira starch presented the lowest value. The range of gelatinization temperatures founded varied from 65 to 78°C, with enthalpies from 11.8 to 15.8 J/g. Plantain starch presented higher retrogradation, while Balú starch presented the lowest one. This outcome is in accordance with the amylose content founded and its influences in the stability of the bioproduct. Concerning to the Elastic Modulus, the more rigid characteristic of films was found for those made from Balú starch, while more flexibility performance have been noted for Plantain starch films. Based on the results, it is established that standardized characterization of native starch is of crucial importance for the industrial formulation of starch-based products, and provide a wide range of diversification for sustainable bioplastics.



Chitosan-Grafted Carbon Nano-Onions Nanocomposite scaffolds for Biomedical Applications

Carlos David Grande Tovar¹, Carlos Humberto Valencia Llano², José Hermínsul Mina Hernandez².

1. Universidad del Atlántico
2. Universidad del Valle

Palabras clave: Films Chitosan nano-onions regeneration

Introducción

Scaffolds are three-dimensional structures with the capacity to promote cell adhesion, proliferation, and function differentiation [1]. In this research, chitosan was grafted with oxidized carbon nano onions through an amide-type bond and blended with polyvinyl alcohol to produce scaffolds subdermally implanted in Wistar rats for biocompatibility studies.

Métodos

Nanocomposites were prepared and characterized according to a previous methodology reported [2] and physically (DRX, SEM), mechanically (tensile strength), thermally (TGA and DSC), chemically (FTIR) characterized [3]. Nanocomposite scaffold's biocompatibility was assessed by degradation in simulated fluid (water absorption, weight loss, and pH) and subdermally implanted in Wistar rats.

Resultados y conclusiones

A grafting of carbon nano-onions with chitosan (CS-g-CNO) through an amide-type bond as demonstrated by chemical, mechanical and thermal characterization was reported and blended with chitosan and polyvinyl alcohol to produce films for subdermal implantation in Wistar rats. The degradation of the films into simulated body fluid (SBF) showed a faster degradation (weight loss and pH changes) due to a higher SBF interaction by hydrogen bonding. Subdermal implantation in Wistar rats of the films including CS-g-CNO demonstrated healthy resorption of the materials with lower inflammation processes as compared with the control formulations including only CNO without a grafting process. All these results are promising for biomedical applications including carbon nanomaterials and show that chemical functionalization of biopolymers is a good route for healthy resorption.



SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF SUNFLOWER OIL-BASED NON-ISOCYANATE POLYURETHANES FILMS OBTAINED THROUGH A SOLVENT AND CATALYST-FREE ROUTE

María del Pilar Maya, Betty Lucy López, Carmiña Gartner

Universidad de Antioquia

key-words: Non-isocyanate-polyurethane-(NIPU), sunflower-oil-(SFO), carbonated-sunflower-oil-(CSFO), polyaminepolyol- (PAPO)

Introduction

Non-isocyanate polyurethanes (NIPU) are crucial in polyurethane research because they do not use phosgene. However, there are risks associated with NIPU synthesis related with the non-renewable nature of its precursors. Thus, this work presents a successful solvent and catalyst free NIPU synthesis, based only in sunflower oil (SFO).

Methods

Epoxidized sunflower oil (ESFO) was used to obtain both precursors for NIPU synthesis. CSFO was obtained by reaction of CO₂ with ESFO. PAPO was obtained from ESFO and ethylenediamine (EDA). Biobased NIPU films were synthesized by polyaddition of PAPO with CSFO. Characterization was made by FTIR, ¹HNMR, DSC and TGA.

Results and Discussion

Double bonds of unsaturated fatty acids presented in SFO, characterized by iodine value (127.35 g I/100 g) and epoxy content (4.07 mmol.g⁻¹), were epoxidized with formic acid and excess of hydrogen peroxide. Epoxides were catalytic carbonated with CO₂ to obtain CSFO, yielding 86% conversion to cyclic carbonate. PAPO was synthesized by ring-opening polymerization from ESFO and EDA, which lead to an uncrosslinked elastomer with low glass transition temperature (T_g) of -36 °C and amine values of 346 mg KOH/g. Crosslinking reaction at 90°C between CSFO and 50% excess of PAPO generated NIPU films. Urethane group formation occurred between 12 to 18h of curing. NIPUs T_g lied between 5-10°C, associated to the crosslinking degree. HNRM and FTIR were used to identify the structures and to confirm the formation of urethane groups. These preliminary results show a facile, cost effective and environmentally friendly method for the synthesis of fully sunflower oil-based polyurethanes.



GREEN AND SCALABLE SYNTHESIS OF bioMOFs BASED ON Mg²⁺ AND PHENOLIC ACIDS EXTRACTED FROM COCOA WASTE

Andrea Yulieth Garzón Serrano , Cesar Augusto Sierra Avila

Grupo de Investigación en Macromoléculas – Departamento de Química - Universidad Nacional de Colombia – Sede Bogotá.

Palabras Claves : Nanomaterial, Optimization, Gallic acid.

Introducción

During the last decade, bioMOFs (biological metalorganic frameworks) has gained special recognition because of low toxicity and improved stability in water, demonstrating outstanding superiority in drug delivery systems compared to traditional MOFs. Among the biomolecules employed, phenolic acids (i.e., gallic acid) have been incorporated as organic linkers in bioMOFs (1,2).

Métodos

This research explores the optimization of a bioMOF synthesis using a reflux technique, where the variation in pH (values 7-8, 9, and 10-11), the differences in reaction times (20, 40, and 60 min), and the modification in the molar ratio (1:1, 1:2, and 2:1) were evaluated.

Resultados y Conclusiones

The synthesized bioMOF material is based on gallic acid (a phenolic acid found in agro-industrial cocoa waste) as the organic linker and magnesium as the metal center. The prepared bioMOF was characterized by IR, SEM, and XRD analysis and compared with the spectral results of the reported bioMOF. The outcomes indicate that the use of magnesium sulfate is a green alternative to obtain the bioMOF reported, considering safety hazards and corrosion problems caused by magnesium nitrates and chlorides, respectively (3). The variation of the pH allowed us to verify differences in the crystalline structure and possible differences in the biological activity, as previously reported (2). Finally, the SEM images confirm the differences in particle size due to changes in reaction time, pH, and variations in the molar ratio.



DESARROLLO DE COMPLEJOS DE INCLUSIÓN PARA APLICACIÓN EN MATERIALES DE ENVASE ANTIFÚNGICO DE ALIMENTOS

Cristina Muñoz-Shugulí, Francisco Rodríguez, Abel Guarda, Ma. José Galotto

Centro de Innovación en Envases y Embalajes (LABEN-Chile), Centro de Desarrollo para la Nanociencia y Nanotecnología CEDENNA, Universidad de Santiago de Chile.

cristina.munoz.s@usach.cl

Palabras Claves: β -ciclodextrina Compuesto-activo-volátil Botrytis-cinerea Liberación-hacia-espacio-de-cabeza

Introducción

La alta volatilidad de los compuestos activos volátiles (CAV) en materiales de envase antifúngico de alimentos (MEAA) impide mantener su actividad por tiempos prolongados[1]. Consiguientemente, en este trabajo se plantea la encapsulación de CAV mediante la formación de complejos de inclusión (CI) con β -ciclodextrina (β -CD) para su aplicación en MEAA.

Métodos

Se elaboraron dos CI (β -CD:A y β -CD:B) mediante co-precipitación[2]. Éstos se caracterizaron por análisis termogravimétrico y capacidad antifúngica contra Botrytis cinerea. Además, se determinó la eficiencia de atrapamiento mediante cromatografía de gases y así también la liberación del CAV hacia el espacio de cabeza (EC) a 3 humedades relativas (HR).

Resultados y Conclusiones

La degradación térmica máxima de los CI se observó sobre los 300°C y no se detectó la volatilización de los CAV. Esto verifica una buena estabilidad térmica de los CI y la protección de los CAV por su efectiva encapsulación en la cavidad de la β -CD. En cuanto a la capacidad antifúngica, solo β -CD:A permitió la inhibición total del crecimiento del hongo a bajas concentraciones y con un efecto fungicida. La eficiencia de atrapamiento de este CI fue de 59.1 ± 4.06 %. Por otro lado, a mayor HR, mayor fue la cantidad de CAV liberado hacia el EC, hecho que se atribuye al desequilibrio ocasionado por las moléculas de agua por su interacción con la pared hidrofílica de la β -CD. De esta forma, los resultados expuestos permiten considerar a β -CD:A como excelente candidato para el desarrollo de MEAA incluso mediante procesos industriales que utilicen altas temperaturas, como la extrusión.

Referencias

[1] Murray, K.; Wu, F.; Shi, J.; Jun Xue, S.; Warriner, K. Challenges in the Microbiological Food Safety of Fresh Produce: Limitations of Post-Harvest Washing and the Need for Alternative Interventions. *Food Qual. Saf.* 2017, 1 (4), 289–301.

[2] Herrera, A.; Rodríguez, F. J.; Bruna, J. E.; Abarca, R. L.; Galotto, M. J.; Guarda, A.; Mascayano, C.; Sandoval-Yáñez, C.; Padula, M.; Souza Felipe, F. R. Antifungal and Physicochemical Properties of Inclusion Complexes Based on β -Cyclodextrin and Essential Oil Derivatives. *Food Res. Int.* 2019, 121, 127–135.



MEMBRANAS DE INTERCAMBIO PROTÓNICO BASADAS EN MATERIALES COMPUESTOS SÍLICA POLÍMERO CON POTENCIAL APLICACIÓN EN CELDAS DE COMBUSTIBLE

Natalia A. Agudelo¹; Betty L. López O.¹

¹Grupo Ciencia de los Materiales, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia, Colombia

nataliaagudeloster@gmail.com

Palabras Clave: sPEES, Sílica, Membranas, Conductividad

Introducción

Las celdas de combustible de membranas poliméricas (PEMFC) han sido desarrolladas para mitigar los efectos ambientales generados por el uso de combustibles fósiles^{1,2}. Uno de sus componentes principales es la membrana de intercambio iónico³, por esto, se diseñarán membranas basadas en un polímero (sPEES) y partículas de sílica (tipo MCF).

Métodos

PEES se sintetizó por policondensación y se sulfonó con acetil sulfato. La sílica MCF se sintetizó por el método sol-gel y se modificó con grupos amino y sulfónicos. Las membranas se prepararon por el método de evaporación de solvente (DMSO). Caracterización: FTIR, TGA, SEM, IEC, Retención de agua y conductividad.

Resultados y conclusiones

El sPEES ($M_n = 15163$ Da) fue caracterizado por FTIR y ¹H NMR, confirmando la presencia de sus grupos característicos. Adicionalmente, se determinó el grado de sulfonación, obteniéndose un 75,7 %. Las sílica MCF sintetizadas y modificadas con grupos amino (-NH₂) y sulfónicos (-SO₃H) presentaron altos valores de área superficial (550 - 650 m²/g) y volumen de poro (1,6 - 1,7 cm³/g).

Las membranas se prepararon con diferente % de sílica (0%, 3%, 6%, 9%). La funcionalización de las partículas de sílica aumentó la IEC y en la conductividad, siendo el grupo sulfónico el que presentó mejores resultados. Las membranas que contienen sílica presentaron mejores propiedades comparadas con aquellas sin sílica, adicionalmente, el mayor porcentaje de sílica aumentó la IEC y la conductividad. Se concluye que la membrana con 9% de la sílica-SO₃H, es un material potencial para una PEMFC.

Referencias

- (1) Munavalli, B. B.; Kariduraganavar, M. Y. Development of Novel Sulfonic Acid Functionalized Zeolites Incorporated Composite Proton Exchange Membranes for Fuel Cell Application. *Electrochim. Acta* 2019, 296, 294–307. <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2018.11.056>.
- (2) Ahmadian-alam, L.; Mahdavi, H. A Novel Polysulfone-Based Ternary Nanocomposite Membrane Consisting of Metal-Organic Framework and Silica Nanoparticles: As Proton Exchange Membrane for Polymer Electrolyte Fuel Cells. *Renew. Energy* 2018, 126, 630–639. <https://doi.org/10.1016/j.renene.2018.03.075>.
- (3) Kim, D. J.; Jo, M. J.; Nam, S. Y. A Review of Polymer-Nanocomposite Electrolyte Membranes for Fuel Cell Application. *J. Ind. Eng. Chem.* 2015, 21, 36–52. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2014.04.030>.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UN COPOLÍMERO BASADO EN POLIACRILAMIDA - ÁCIDO MALEICO PARA CAMBIOS DE HUMECTABILIDAD DE ROCAS RESERVORIOS.

José Cárdenas

Ecopetrol S.A

jose.cardenasmo@ecopetrol.com.co

Palabras Claves: Síntesis Polímero Yacimiento Humectabilidad

Introducción

La producción de hidrocarburos depende de la sanidad de las rocas reservorio para ser humectables al agua o petróleo. Normalmente cuando existe humectabilidad al petróleo, se emplean tratamientos matriciales que modifiquen esta condición. En este trabajo se sintetiza, caracteriza y evalúa un material basado en copolímeros para alcanzar este objetivo.

Métodos

Se sintetizó un copolímero basado en ácido acrílico y ácido maleico. Se caracterizó mediante el uso de diferentes técnicas como FTIR, SEM, SEC, XRD y DLS. Se prepararon diferentes formulaciones del copolímero en medio acuoso variando las concentraciones, surfactantes aplicados, pH, y temperatura.

Resultados y Conclusiones

A partir de muestras de núcleo de formaciones sedimentarias con mineralogía de tipo aluminosilicato, se evaluaron cambios de humectabilidad de la roca a partir de ángulos de contacto precedido por pruebas de roca-fluido y fluido-fluido, tales como compatibilidad, detergencia, tensión interfacial y mojabilidad.

Debido a la naturaleza hidrofílica de las cadenas poliméricas, la poliacrilamida y el ácido maleico pueden absorber una gran cantidad de agua dentro de sus estructuras debido a la interacción de las moléculas de agua con los grupos funcionales del esqueleto macromolecular. Por otra parte se denota una muy buena absorción del fluido en la roca por la interacción electrostática ocasionada por el potencial Z del fluido y el uso de surfactantes.

Referencias

White, J. L.; Goddard, J. E.; Phillips, H. M. Use of Polymers To Control Water Production in Oil Wells. JPT, J. Pet. Technol. 1973, 25, 143–150. <https://doi.org/10.2118/3672-PA>.

Sparlin, D. D. Evaluation of Polyacrylamides for Reducing Water Production. JPT, J. Pet. Technol. 1976, 28, 906–914. <https://doi.org/10.2118/5610-PA>.

Eoff, L.; Dalrymple, E. D.; Reddy, B. R.; Everett, D. Structure and Process Optimization for the Use of a Polymeric Relative-Permeability Modifier in Conformance Control. Proc. - SPE Int. Symp. Oilf. Chem. 2001, No. June 2002, 77–90. <https://doi.org/10.2523/64985-ms>.



EFFECTO DE V₂O₅ EN LA SÍNTESIS DE MEMBRANAS DE INTERCAMBIO PROTÓNICAS A PARTIR DE ESTIRENO ÉSTER ACRÍLICO Y QUITOSANO

Dina del Carmen Mendoza Beltrán^a, Alvaro Realpe Jiménez^b

^aEstudiante del programa de Doctorado en Ingeniería, Grupo de Investigación Modelación de Partículas y Procesos (MPP), dmendozab1@unicartagena.edu.co, Universidad de Cartagena.

^bDocente Planta Tiempo Completo, Líder Grupo Investigación Modelación de Partículas y Procesos (MPP), arealpe@unicartagena.edu.co, Universidad de Cartagena.

Palabras clave: celda de combustible, estireno-éster acrílico, pentóxido de vanadio, carga.

Introducción

Se sintetizaron membranas a partir de la mezcla del copolímero estireno éster-acrílico y el biopolímero quitosano que luego fueron modificadas con carga inorgánica (%p/p) de pentóxido de vanadio (V₂O₅) en cantidades de 1%, 2% y 3% para evaluar su aplicación como electrolito en una celda de combustible

Métodos

Se caracterizaron las membranas con la capacidad de retención de agua, la capacidad iónica, espectroscopía infrarroja para investigar interacción entre carga y los polímeros. El análisis térmico se llevó a cabo con DSC Q200 V24.4 Build116. La conductividad se determinó utilizando el equipo analizador de impedancia Wayne Kerr 6420.

Resultados y Conclusiones

Los resultados muestran que la mezcla estireno éster acrílico y quitosano mejora la retención de agua y la adición de V₂O₅ contribuye, incrementando este efecto debido al carácter hidrofílico de la carga; el incremento de esta propiedad se observa de tener un porcentaje de 50,7% sin adición de carga a uno de 91,4% para una carga de 1%. La capacidad de intercambio iónico tuvo un comportamiento similar a la retención de agua, hubo un aumento, la medida de 0,12 meq/g membrana sin carga a 0,42 meq/g para una carga al 2%. La conductividad obtenida fue 1,27 *10⁻⁸ S/cm bajo condiciones secas, para la cargada al 2%. El análisis FTIR mostró enlaces que indican la modificación de la mezcla de los polímeros dada por la carga. Con el análisis térmico se determinó la temperatura de transición vítrea obteniendo T_g= 37,84°C en cargada al 1%. Confirmándose el efecto positivo al adicionar V₂O₅.

Referencias

Realpe, A.; Pino, Y.; Acevedo, M. T. Synthesis of a Proton Exchange Membrane from Natural Latex Modified with Vanadium Pentoxide for Application in a Fuel Cell. *Int. J. Chemtech Res.* 2016, 9, 524–529.

Realpe, A.; Romero, K.; Santodomingo, A. Synthesis of a Proton Exchange Membrane from Vinyl Acetate - Acrylic Ester Copolymer for Fuel Cells. *Int. J. Chemtech Res.* 2015, 8, 1319–1326



MEMBRANAS ELECTROHILADAS COMPUESTAS DE UNA MATRIZ POLIMÉRICA Y SISTEMAS HÍBRIDOS METAL/NTC PARA FILTRACIÓN Y SANITIZACIÓN DE AIRE

Andrea García Jiménez , Laura Pineda Bonilla, Manuela Alzate Tobón ,Jaime Gallego Marin

Química de Recursos Energéticos y Medio Ambiente, Instituto de Química, Universidad de Antioquia UdeA, Calle 70 No. 52–21, Medellín, Colombia.

andrea.garciaj@udea.edu.co

Palabras clave: nanofibras Metal/NTC filtración sanitización

Introducción

Los filtros de aire han mostrado perspectivas importantes para evitar la propagación de enfermedades; y los polímeros sintéticos son el material más utilizado para la fabricación de membranas para filtración, ya que estos tienen propiedades químicas y térmicas muy estables; y con la incorporación de M/NTC permite mejorar estas propiedades.

Métodos

Para la producción de las nanofibras, se utilizó DMF como disolvente al cual se le adicionó M/NTC, esta dispersión se llevó a ultrasonido durante 30 minutos, posteriormente se adiciona el polímero. Esta mezcla se calentó bajo agitación magnética durante 1 hora, para luego ser llevada a un proceso de electrohilado.

Resultados y Conclusiones

Las nanofibras se caracterizaron por análisis termogravimétrico, a partir del cual se determinó la cantidad de M/NTC dispersos en las fibras, obteniendo como resultado un porcentaje alrededor de 2% (fracción másica). También se usó microscopía SEM y TEM para analizar la morfología de estas fibras, donde se observaron pequeños cambios morfológicos con la adición de los sistemas híbridos de NTC; y también permitieron comprobar la dispersión homogénea de M/NTC. Además las nanofibras fueron expuestas a una prueba de radiación ultravioleta para analizar la degradación del polímero; los resultados IR muestran que la nanofibra no sufre cambios significativos durante la irradiación con UV en el tiempo. Finalmente las nanofibras también fueron sometidas a pruebas antibacterianas donde se demuestra que estas membranas son excelentes para la retención y eliminación de bacterias y virus, lo que las convierte en buenos candidatos para aplicaciones como filtración y sanitización de aire.

Referencias

1. Souzandeh H, Wang Y, Netravali AN, Zhong WH. Towards Sustainable and Multifunctional Air-Filters: A Review on Biopolymer-Based Filtration Materials. *Polym Rev.* 2019;59(4):651-686. doi:10.1080/15583724.2019.1599391
2. Yang Y-K, China PR, Xie X-L, China PR, Mai Y-W. Functionalization of carbon nanotubes for polymer nanocomposites. In: *Polymer–Carbon Nanotube Composites.* Elsevier; 2011:55-91. doi:10.1533/9780857091390.1.55



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE SISTEMAS HÍBRIDOS M/NTC CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA O ANTIVIRAL, PARA LA FABRICACIÓN DE FILTROS DE SANITIZACIÓN DE AIRE

Pineda L., Garcia A., Alzate M., Gallego J.

Química de Recursos Energéticos y Medio Ambiente, Instituto de Química, Universidad de Antioquia UdeA, Calle 70 No. 52–21, Medellín, Colombia.

lcarolina.pineda@udea.edu.co

Palabras clave: Metal/NTC, Actividad Antimicrobiana, Filtración.

Introducción

En la búsqueda de materiales con actividad antimicrobiana se han estudiado los sistemas híbridos de tipo metal-nanotubo de carbono (NTC). Dichos composites permiten sacar provecho de las conocidas propiedades fisicoquímicas de los NTC, con la eficiencia documentada en términos viricidas y bactericidas de metales como la plata y el cobre.

Metodos

NTC tras funcionalización ácida (f-CNT) y sales de Ag y Cu, se dispersaron en etanol o agua. La dispersión con etanol se calentó hasta evaporación del solvente y se sometió a pirólisis. Para el sistema en agua, se adicionó NH₃ hasta pH=9.5 y se evaporó el solvente.

Resultados y Conclusiones

Se hicieron pruebas termogravimétricas para comprobar la presencia y cantidad de los metales sobre los NTC, dando como resultado una impregnación alrededor del porcentaje nominal (10% en fracción másica), para ambas metodologías. Usando microscopía SEM y TEM se analizó el tamaño de partícula de las muestras, encontrándose que el tamaño de estas se encuentra en el rango de 2 nm a 30 nm. Los sistemas híbridos, M(Cu, Ag)/NTC, se mezclaron con poliacrilonitrilo (PAN) y se estructuraron a través de la técnica de electrohilado para obtener nanofibras. Finalmente, se evaluó la actividad antibacteriana de los composites obtenidos encontrando que la inclusión de los sistemas híbridos M/NTC mejora la actividad bactericida. De esta manera se compararon los resultados obtenidos a través de ambos métodos, su eficiencia, y su posible aplicabilidad en sistemas de filtración de aire y eliminación de agentes patógenos.

Referencias

- (1) Domagała, K.; Borlaf, M.; Kata, D.; Graule, T. Synthesis of Copper-Based Multi-Walled Carbon Nanotube Composites. Arch. Metall. Mater. 2020, 65 (1), 157–162. <https://doi.org/10.24425/amm.2019.131109>.
- (2) Huiqun, C.; Meifang, Z.; Yaogang, L. Decoration of Carbon Nanotubes with Iron Oxide. J. Solid State Chem. 2006, 179 (4), 1208–1213. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2005.12.040>.
- (3) Kizildag, N.; Ucar, N. Investigation of the Properties of PAN/f-MWCNTs/AgNPs Composite Nanofibers. J. Ind. Text. 2017, 47 (2), 149–172. <https://doi.org/10.1177/1528083716632807>.



EFFECTO DEL pH EN LA REACCIÓN SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS DE OXIDO DE COBRE UTILIZANDO COMO AGENTE REDUCTOR EXTRACTOS DE *Psidium guajava* Y *Moringa oleifera*

José Gabriel López Ortiz¹, Pablo Andrés Castellanos Pinzón², Carlos Jovany Ulloa Suarez², Debora Alcida Nabarlatz¹

1. Universidad Industrial de Santander. Facultad de Ingenierías Físicoquímicas. Grupo de Investigación en Tecnologías de Valorización de Residuos y Fuentes Agrícolas e Industriales para la Sustentabilidad Energética - INTEFASE. Bucaramanga, Santander, Colombia.
2. Zumo tecnología ZUMOTEC S.A. Grupo de Investigación ZUMOINNOVA, Bucaramanga, Santander, Colombia.

josegabrielq@gmail.com

Palabras claves: Nanopartículas, Cobre, Extractos, pH

Introducción

Las investigaciones sobre las nanopartículas (Nps) de óxido de cobre han venido creciendo, debido a sus propiedades biocidas y catalíticas. La síntesis química utiliza agentes reductores como la hidracina, que son altamente tóxicos. Una alternativa es la síntesis verde que utiliza agentes reductores como los extractos vegetales.

Métodos

Se realizó la síntesis de la Nps, a partir de sulfato de cobre pentahidratado, utilizando como agentes reductores los extractos de hoja de *Psidium guajava* y *Moringa oleifera*. Se evaluó el efecto del pH (4 y 10) en el tamaño de partícula por DLS, conversión por Uv-Vis y la composición por FTIR.

Resultados y Conclusiones

En la síntesis con el extracto de *P. guajava* a un pH ácido (4), se obtuvieron partículas con un tamaño de 1152,70 nm y una conversión de la sal precursora de $9,09 \pm 1,26\%$ y con un pH alcalino (10), un tamaño de 11,97 nm y una conversión de $87,31 \pm 3,6\%$. Para la *M. oleifera* se obtienen tamaños para pH alcalino de 226,3 nm y para el pH ácido de 306,3 nm. La composición de las Nps fue principalmente óxidos de cobre (CuO y Cu₂O) y compuestos orgánicos como polialcoholes y polifenoles provenientes de los extractos. Los resultados muestran que utilizando extractos de *P. guajava* y *M. oleifera*, los pH alcalinos favorecen la formación de Nps de óxidos de cobre.

Referencias

- Wang, L., Wu, Y., Xie, J., Wu, S., & Wu, Z. (2018). Characterization, antioxidant and antimicrobial activities of green synthesized silver nanoparticles from *Psidium guajava* L. leaf aqueous extracts. *Materials Science and Engineering C*, 1–8.
- Prasad, T. N. V. K. V., & Elumalai, E. K. (2011). Biofabrication of Ag nanoparticles using *Moringa oleifera* leaf extract and their antimicrobial activity. *Asian Pacific Journal of Tropical Biomedicine*, 1(6), 439.
- Rajesh, K. M., Ajitha, B., Ashok Kumar Reddy, Y., Suneetha, Y., & Sreedhara Reddy, P. (2016). Synthesis of copper nanoparticles and role of pH on particle size control. *Materials Today: Proceedings*, 3(6), 1985–1991.



CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA DE CARBONES ACTIVADOS PREPARADOS A PARTIR DE CUESCO DE PALMA AFRICANA EN EL PROCESO DE ADSORCIÓN DE CO₂

Sergio Acevedo^{1*}, Liliana Giraldo¹, Juan Carlos Moreno²

^{1*}: Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá. Avenida Carrera 30 No 45 -03, Bogotá (Colombia) ²: Departamento Química. Facultad de Ciencias. Universidad de los Andes. Carrera 1 No 18 A 10, Bogotá (Colombia) *Email: saacevedoc@unal.edu.co

Palabras Clave: Carbón activado, activación química, adsorción CO₂

Introducción

El acelerado crecimiento industrial ha generado en los últimos años graves problemas ambientales que son una amenaza para la sostenibilidad del planeta. Como una alternativa de solución, surgen los materiales porosos (Cas) que se utilizan en el campo de la adsorción a partir de residuos lignocelulósicos [1, 2].

Métodos

Impregnación y carbonización, isotermas adsorción N₂, Caracterización Química, determinación FTIR, determinación PHPZC, isotermas Adsorción CO₂; estas son las técnicas usadas con las que se caracterizaron las propiedades fisicoquímicas los materiales carbonosos preparados en esta investigación a partir de residuos lignocelulósicos Cuesco de Palma Africana con la finalidad de capturar CO₂

Resultados y Conclusiones

Se obtuvieron carbones activados por activación química del Cuesco de Palma Africana presentando diferentes características texturales áreas superficiales BET entre 120-1400 m² g⁻¹, y volúmenes de poros estrechos (V_n) que oscilan entre 0,34-0,53 cm³ g⁻¹; se establece que la capacidad de adsorción de CO₂ en los carbones activados se relaciona con la presencia de microporosidad estrecha y con el área superficial de la red porosa formada. La formación de mesoporosidad favorece la difusión del gas hacia los microporos para la adsorción de CO₂ [3]. Estos materiales serían de utilidad para procesos postcombustión en la captura de este contaminante atmosférico. Se observa que los sólidos presentan una capacidad de adsorción entre 173 y 218 mg g⁻¹ de acuerdo con estos valores, dichos carbones activados poseen una proporción elevada de microporos efectivos para la adsorción de CO₂ que explica las cantidades de este gas adsorbidas.

Referencias

- [1] F. Zhang, P. Zhao, M. Niu, and J. Maddy, "The survey of key technologies in hydrogen energy storage," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 41, no. 33, pp. 14535–14552, 2016.
- [2] I. Dincer and C. Acar, "Review and evaluation of hydrogen production methods for better sustainability," *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 40, no. 34, pp. 11094–11111, 2014.
- [3] H. Ahmad, S. K. Kamarudin, L. J. Minggu, and M. Kassim, "Hydrogen from photo-catalytic water splitting process: A review," *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 43, pp. 599–610, 2015.



Propiedades estructurales y ópticas del granate $\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce}^{3+}$ dopado con Fe^{3+}

Christian F. Varela,^{1*} Yeison D. Molina,² S. Sandoval Gutierrez,³ L. C. Moreno-Aldana⁴ and C. A. Parra Vargas⁵

¹Grupo de Investigación Física de Materiales, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia.

²Grupo de Sistemas Dinámicos, Universidad de los Llanos.

³Laboratorio de Catálisis Heterogénea, Aplicaciones fisicoquímicas del estado sólido.

christian.varela@uptc.edu.co

Palabras Claves: LuAG W-led Fotoluminiscencia Fósforo

Introducción

Aunque la conversión de luz azul es una ruta económica para la generación de luz blanca, genera a una reproducción deficiente del color, limitando las aplicaciones en iluminación doméstica.¹ Esto condujo al desarrollo de nuevos fósforos permitan lograr una amplia absorción azul y una emisión con un componente rojo intenso.²

Métodos

Los granates tipo $\text{Lu}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}:\text{Ce}^{3+}$ dopados con Fe^{3+} se prepararon mediante el método de reacción en estado sólido a 1200 °C durante 20 horas. Posteriormente, se caracterizaron mediante DRX, Reflectancia difusa, absorción óptica, fotoluminiscencia a temperatura ambiente y en función de la temperatura, y se determinó su eficiencia cuántica.

Resultados y Conclusiones

El dopaje con Fe^{3+} en los granates permitió mejorar la pureza de los materiales, obteniendo fase pura a un tiempo y temperatura menores a los anteriormente reportados. Una expansión de la celda unidad y modificaciones en la energías vibracionales fueron observadas al aumentar la concentración de Fe^{3+} , lo cual confirmó la adecuada inserción en estructura del huésped. El análisis óptico indicó que el dopaje con Fe^{3+} condujo a una fuerte reducción del band-gap y a la intensificación de la energía del campo cristalino, las cuales fueron atribuibles a la hibridación de orbitales moleculares. Además, la fotoluminiscencia de emisión se desplazó del verde al naranja debido a las modificaciones en los niveles de energía de cationes Ce^{3+} . Los materiales obtenidos exhibieron propiedades ópticas notables, como alta conversión de color, estabilidad térmica, alto rendimiento cuántico y pureza de color, que permiten su aplicación en la producción de dispositivos LED de luz blanca.

Referencias

- (1) Ohno, Y. Spectral Design Considerations for White Led Color Rendering. *Optical Engineering* 2005, 44 (11), 111302.
- (2) Sun, W.; Jia, Y.; Pang, R.; Li, H.; Ma, T.; Li, D.; Fu, J.; Zhang, S.; Jiang, L.; Li, C. $\text{Sr}_9\text{Mg}_{1.5}(\text{PO}_4)_7:\text{Eu}^{2+}$: A Novel Broadband Orange-Yellow-Emitting Phosphor for Blue Light-Excited Warm White LEDs. *ACS Applied Materials & Interfaces* 2015, 7 (45), 25219–25226.



Preparación de catalizadores basados en ferritas de sodio NaFeO_2 para la combustión catalítica de hollín proveniente de las arenas de fundición

Aaron Achanccaray Ninantay¹, Rómulo Cruz Simbrón¹, Mario Hurtado Cotillo¹, Gino Picasso¹, Rosario López¹

¹Laboratorio de Investigación Físicoquímica UNI, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Ingeniería, Lima-Perú.

aachanccarayn@uni.pe

Palabras Claves : ferritas combustión-catalítica arenas-de-fundición hollín

Introducción

El problema de investigación es evitar la formación de hollín en arenas de fundición haciendo uso de los catalizadores de ferrita de sodio. Con el uso de estos catalizadores, se logra que las arenas de fundición usadas en los moldes sean reusadas y tengan un tiempo de vida más largo.

Métodos

Las ferritas de sodio máxicas fueron preparadas por el método de impregnación, donde se evaluaron los efectos de temperatura de calcinación (600, 650, 700 y 800 °C), tiempo de calcinación (6, 12, 24 h) y tiempo de impregnación (2 y 12 h).

Resultados y Conclusiones

En conclusión, se determinó que la condición óptima para preparar los catalizadores de ferrita de sodio es a 625 °C durante 12 horas de calcinación obteniéndose las fase α y β - NaFeO_2 pero principalmente la fase α - NaFeO_2 sin la presencia de NaNO_3 y hematita. Esta muestra presenta mayor reducibilidad respecto a las muestras calcinadas a mayor temperatura o las calcinadas a menor tiempo. Los resultados preliminares muestran que los catalizadores de ferrita de sodio se reduce la temperatura de combustión del hollín (T50) en 100 °C.

Referencias

Kugai, J., Mine, H., Seino, S., Nakagawa, T., Yamamoto, T. A., & Yamada, H. Effects of sodium nitrate and heat treatment atmosphere on the synthesis of α - NaFeO_2 layered oxide. Mater. Chem. Phys. 2020, 249

Legutko, P., Stelmachowski, P., & Kotarba, A. Promotion of iron-oxide with potassium as optimization of the soot combustion catalyst. Chall. Mod. Technol. 2012, 3

Yanase, I., Onozawa, S., Ohashi, Y., & Takeuchi, T. CO₂ capture from ambient air by β - NaFeO_2 in the presence of water vapor at 25–100°C. Powder Technol. 2019, 348, 43–50



Estudio de las propiedades físicas y mecánicas de mezclas termoplásticas de almidón/ácido poliláctico modificadas con agentes ácidos

Carolina Caicedo Cano¹, Heidy Lorena Calambás Pulgarín².

1. Universidad Santiago de Cali
2. ASTIN, SENA

carolina.caicedo03@usc.edu.co

Palabras clave: biopolímeros, reología, propiedades térmicas

Introducción

Presentamos una estrategia de funcionalización de mezclas de almidón/ácido láctico (PLA) con ácidos orgánicos en estado fundido. Los ácidos orgánicos facilitaron las interacciones entre los biopolímeros. Se logró una reducción en la polaridad de la superficie, un aumento de la resistencia mecánica. Lo anterior, relevante para la industria del embalaje. Se obtuvieron 8 mezclas en proporciones 70:30 TPSm/PLA.

Métodos

Se realizó un análisis reológico, análisis FTIR, Análisis termogravimétrico y calorimetría diferencial de barrido, Análisis de microscopía electrónica de barrido con aumentos de 1500 y 500 de la superficie de la fractura. Análisis de ángulo de contacto y pruebas de tracción.

Resultados y conclusiones

La adición de ácidos a las mezclas TPS/PLA puede mejorar eficazmente la procesabilidad del material de acuerdo con los resultados reológicos. Existe una dispersión óptima de los componentes en el sistema. Los componentes demuestran una transición en la que prevalece el comportamiento viscoso. Los análisis de DSC y TGA muestran que los compuestos de TPS y PLA son incompatibles. La adición de ácido acético promueve los cambios de fase (cristalización) del PLA y aumenta su estabilidad térmica. El ángulo de contacto y la naturaleza del ácido orgánico favorecen la dispersión de PLA y sistemas hidrófobos como el ácido oleico. Las propiedades de tracción mostraron un proceso no sinérgico entre agentes ácidos que fue corroborado por los resultados del análisis térmico. Cabe señalar que la muestra de TPS-L-PLA demostró una mayor resistencia a la tensión en comparación con la de TPS puro. Es necesario incorporar agentes tensioactivos que aumenten las interacciones.

Referencias

Caicedo, C., & Pulgarin, H. L. C. (2021). Study of the Physical and Mechanical Properties of Thermoplastic Starch/Poly (Lactic Acid) Blends Modified with Acid Agents. *Processes*, 9(4), 578.



EVALUACIÓN DEL EFECTO DEL SOPORTE (SiO₂, C y Al₂O₃) Y TAMAÑO DE CLÚSTER METÁLICO EN LA AMINACIÓN DE FENOLES SOBRE CATALIZADORES DE Pd

Maray Ortega Díaz 1, Raydel Manrique Suárez 1, Daviel Gómez Acosta 2, Romel Jiménez Concepción 2, Luis Ernesto Arteaga Pérez 1.

1. Laboratory of Thermal and Catalytic Processes, Wood Eng. Department, University of Bío-Bío, Concepción, Chile
2. Laboratorio de Carbono y Catálisis, Universidad de Concepción, Concepción, Chile

marayod5@gmail.com

Palabras Claves: aminación fenol soporte paladio

Introducción

Las aminas secundarias se producen industrialmente por vía petroquímica, lo que se traduce en una baja economía del átomo y altos impactos ambientales. Este estudio evalúa el efecto de la acidez del soporte y el tamaño de clúster metálico en catalizadores de Pd en un proceso alternativo utilizando fenoles ligno-derivados.

Métodos

Catalizadores de Pd soportado (C, SiO₂ y Al₂O₃) a diferentes tamaños de partícula (D1, D2, D3) se sintetizaron y caracterizaron por TPR, TGA-MS, XRD, TEM y TPD-NH₃. Se estudió la reacción del fenol con ciclohexilamina, a una carga fija de metal (7% mol Pd), 140°C y 1,5 bar de H₂.

Resultados y conclusiones

El XRD mostró señales en $2\theta = 40.0, 46.4, 68.2$ y 82.1° , correspondientes a Pd₀. El TPD-NH₃ confirmó que los sitios de acidez intermedia (Pd/Al₂O₃ = 1,99 $\mu\text{mol NH}_3 \text{ g}^{-1}$) favorecen la aminación de fenol, con un valor de TOF (1.5 h⁻¹) 3 veces superior al Pd/SiO₂. La imina se formó independientemente del tipo de soporte, aunque la acidez afectó la actividad (XPd/C=87%>XPd/Al₂O₃ = 83%> XPd/SiO₂ = 17%) y el rendimiento a aminas secundarias (YPd/C = 48%>SPd/Al₂O₃ = 43%>SPd/SiO₂ = 13%). La actividad intrínseca para Pd/C y Pd/Al₂O₃ fue muy similar, mientras que la selectividad para aminas secundarias fue diferente presumiblemente por la formación de sitios ácidos específicos sobre Al₂O₃ por spillover de H. Las partículas de menor tamaño contienen una alta proporción de sitios de Pd con baja coordinación de superficies, bordes y esquinas, favorecen la hidrogenación de imina.

Referencias

- J.D. Vidal, M.J. Climent, P. Concepcion, A. Corma, S. Iborra, M.J. Sabater, Chemicals from Biomass: Chemoselective Reductive Amination of Ethyl Levulinate with Amines, *ACS Catal.* 5 (2015) 5812–5821. doi:10.1021/acscatal.5b01113.
- T. Cuyper, P. Tomkins, D.E. De Vos, Direct liquid-phase phenol-to-aniline amination using Pd/C, *Catal. Sci. Technol.* 8 (2018) 2519–2523. doi:10.1039/c8cy00193f.
- Z. Chen, H. Zeng, S.A. Girard, F. Wang, N. Chen, C.J. Li, Formal Direct Cross-Coupling of Phenols with Amines, *Angew. Chemie - Int. Ed.* 54 (2015) 14487–14491. doi:10.1002/anie.201506751.



FUNCIONALIZACION DE TEXTILES CON NANOPARTÍCULAS DE SiO₂ Y TiO₂

José Miguel Montero Vásquez¹; Brayan Stick Betin Bohórquez²; Cristian Camilo Ramírez Fosca³; Ada Sol Hincapie Lumbaque⁴; Javier Rincon⁵; Andrés Ordoñez⁶; Daniel Llamosa Perez⁷

¹Programa de Bioquímica. Facultad de Ciencias. Universidad Antonio Nariño ²Grupo de Investigación en Ciencias Biológicas y Químicas - GIBIQs. Universidad Antonio ³Grupo de Investigación Fundamental y Aplicada en Materiales - GIFAM. Universidad Antonio Nariño

J
montero88@uan.edu.co

key-words: Sol-gel, superhidrofóbicos, hidrocarburos, fotocatalíticas.

Introducción

En la actualidad existen diversas formas para controlar los derrames de petróleo o las grandes cantidades de aguas residuales aceitosas, un ejemplo de estos son químicos, redes o incendios controlados. Sin embargo, su uso trae consigo desventajas como lo son la generación de gases tóxicos, elevados costos y poca eficiencia.

Métodos

Se propone el recubrimiento de un textil con nanopartículas de SiO₂ y TiO₂ sintetizadas a partir del método sol-gel asistido por ultrasonidos directos, posteriormente se funcionalizó el textil mediante métodos de impregnación, secado y curado. Además se estudiaron sus características con técnicas SEM-EDS, AFM, DRX, UV-Vis y Angulo de contacto.

Resultados y Conclusiones

Empleando la técnica DRX se determinó la estructura cristalográfica de las nanopartículas de SiO₂ y TiO₂, esto a través de sus patrones de difracción. Por AFM y SEM se estableció su distribución de tamaño, estos datos fueron ajustados a una distribución lognormal, comprobando que las nanopartículas presentan una morfología esférica y con el análisis de EDS se confirmó la composición química de las nanopartículas. Para las características fisicoquímicas otorgadas por las nanopartículas hacia el textil. Primero se determinó la propiedad superhidrofóbica del textil empleando el método ángulo de contacto, obteniendo ángulos mayores a 165° y finalmente se realizaron ensayos de oxidación fotocatalítica a través de UV-Vis identificando las características de auto-limpieza otorgadas por las nanopartículas hacia el textil.

Con este trabajo se sintetizaron nanopartículas de SiO₂-TiO₂ depositadas sobre textiles, las cuales fueron caracterizadas empleando varias técnicas que permitieron comprobar sus propiedades fisicoquímicas consideradas relevantes para la aplicación planteada.

Referencias

- Dell'Edera, M.; La porto, C.; Pasquale, I.; Petronella, F.; Curri, M.; Agostiano, A.; Comparelli, R. Photocatalytic TiO₂-based coatings for environmental applications. Elsevier. [Online] 2021. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920586121001899#!>
- Martel, A. Aplicaciones de nanopartículas en textiles para el diseño de interiores. I+D. [Online] 2016. https://www.researchgate.net/publication/295854571_Aplicaciones_de_nanoparticulas_en_textiles_para_el_diseno_de_interiores.
- Pan, G.; Xiao, X.; Yu, N.; Ye, Z. Fabrication of superhydrophobic coatings on cotton fabric using ultrasound-assisted in-situ growth method. Elsevier. [Online] 2018, 125. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S030094401830081X#!>



SLGCL-319

NANOPARTÍCULAS DE Fe₃O₄@SiO₂ FUNCIONALIZADAS CON UN PÉPTIDO BIOMARCADOR COMO POTENCIAL AGENTE DE CONTRASTE.

Brayan Stick Betin Bohórquez¹, José Miguel Montero Vasquez¹, Lady Johana Endo Aguilar¹, Indry Milena Saavedra Gaona², Carlos Arturo Parra Vargas², Karina Vargas Sanchez³, Rolando Javier Rincon⁴, Daniel Llamosa Pérez⁵.

1. Programa de Bioquímica, Facultad de Ciencias, Universidad Antonio Nariño, 2. Grupo Física de Materiales, Escuela de Física, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, 3. Escuela de Medicina, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia, 4. Grupo de Investigación en Ciencias Biológicas y Químicas - GIBIQs, Universidad Antonio, 5. Grupo de Investigación Fundamental y Aplicada en Materiales - GIFAM, Universidad Antonio Nariño

bbetin96@uan.edu.co

Palabras Claves

Fe₃O₄@SiO₂, nanocompuesto, citotoxicidad, ELISA.

Introducción

El gadolinio es usado como agente de contraste dentro de la resonancia magnética, sin embargo, su uso se ha relacionado con efectos secundarios. Con el fin de disminuir estos efectos, se ha propuesto el empleo de materiales superparamagnéticos como alternativa promisoría, como lo son las nanopartículas de Fe₃O₄@SiO₂.

Métodos

Se sintetizaron nanopartículas de Fe₃O₄@SiO₂ funcionalizadas con un péptido-biomarcador. Para la síntesis del núcleo magnético y su recubrimiento se emplearon métodos sonoquímicos. El nanocompuesto fue caracterizado por SEM-EDX, AFM, DRX, DLS y VSM. Se verificó la unión péptido-nanocompuesto a través del inmunoensayo ELISA. Finalmente, se evaluó la citotoxicidad mediante MTT.

Resultados y Conclusiones

Se identificaron las fases cristalinas Fe₃O₄ y SiO₂ del nanocompuesto mediante DRX. Por AFM y SEM se determinó su distribución de tamaños, comprobando que las nanopartículas presentan una morfología esférica. Por DLS se verificó la distribución de tamaños y se calculó el índice de polidispersión (PDI) determinando que estos sistemas son altamente monodispersos. Por análisis de EDX se confirmó la composición química de las nanopartículas. Los ciclos de histéresis magnéticos realizados por VSM mostraron un comportamiento superparamagnético. Para determinar la funcionalización de las nanopartículas se utilizó un inmunoensayo tipo ELISA, donde las nanopartículas funcionalizadas mostraron un aumento en el nivel de absorbancia. Finalmente, se evaluó la respuesta a citotoxicidad y estrés oxidativo de las células mediante ensayos MTT.

En conclusión, se sintetizaron nanopartículas de Fe₃O₄@SiO₂/Pe que pueden ser candidatos potenciales para ser utilizadas como agentes de contraste de resonancia magnética debido a sus características químicas, morfológicas, magnéticas y de biocompatibilidad.

Referencias

- Del Pilar Rueda A, Enríquez LF. Una revisión de técnicas básicas de neuroimagen para el diagnóstico de enfermedades neurodegenerativas. *Biosalud*. 2018;17(2):59-90. <http://www.scielo.org.co/pdf/biosa/v17n2/1657-9550-biosa-17-02-00059.pdf>.
- Hu P, Kang L, Chang T, Yang F, Wang H, Zhang Y, Yang Z. High saturation magnetization Fe₃O₄ nanoparticles prepared by one-step reduction method in autoclave. *Journal of Alloys and Compounds*. 2017; 728:88-92. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0925838817330190>
- Lee DW, Fatima H, Kim KS. Preparation of silica coated magnetic nanoparticles for bioseparation. *Journal of nanoscience and nanotechnology*. 2018;18(2):1414-1418. https://www.researchgate.net/profile/Hira-Fatima-2/publication/322195601_Preparation_of_Silica_Coated_Magnetic_Nanoparticles_for_Bioseparation/links/5ce4d9af458515712eba719f/Preparation-of-Silica-Coated-Magnetic-Nanoparticles-for-Bioseparation.pdf.



Oxidación fotoelectroquímica de agua con nanobarras de TiO₂ reducidas y modificadas con puntos cuánticos de carbono

Jhon Puerres,* Sergio Polanía, Andrés Pérez, Pablo Ortiz, María-T Cortés

Universidad de los Andes

*jd.puerres@uniandes.edu.co

Palabras clave: TiO₂, reducción, CQD, fotoelectroquímica

Introducción

La fotoelectroquímica es una de las alternativas más llamativas para producir hidrógeno de forma sostenible y con bajo impacto ambiental [1]. No obstante, la baja eficiencia del proceso limita su aplicación [2]. Entre las estrategias para mejorarla están el dopaje de los materiales fotoelectroactivos y la formación de materiales compuestos [3].

Métodos

En el presente trabajo se sintetizaron nanobarras de TiO₂, posteriormente se realizó un tratamiento electroquímico de reducción sobre las nanobarras y se incorporaron puntos cuánticos de carbono (CQD) sobre su superficie. Los fotoelectrodos se caracterizaron mediante microscopías SEM, espectroscopias de reflectancia difusa, impedancias, voltamperometrías de barrido lineal (LSVs) y cronoamperometrías.

Resultados y conclusiones

Se encontró que las dos estrategias (la reducción electroquímica y la incorporación de puntos cuánticos de carbono) permitieron aumentar las fotocorrientes generadas con las nanobarras de TiO₂. Dichas mejoras se obtuvieron al emplear cada estrategia por separado y al emplearlas de forma simultánea, siendo esta última la que conllevó a los mejores desempeños. Adicionalmente, las caracterizaciones por espectroscopía de reflectancia difusa y por impedancia electroquímica permitieron ahondar en el mecanismo mediante el cual cada estrategia contribuye hacia la obtención de mayores fotocorrientes. Nuestros resultados podrían contribuir en el camino de elaborar materiales funcionales más eficientes para la oxidación fotoelectroquímica de agua.

Referencias

- [1] Tilley, S. D. Recent Advances and Emerging Trends in Photo-Electrochemical Solar Energy Conversion. *Adv. Energy Mater.* 2019, 9 (2), 1802877. <https://doi.org/10.1002/aenm.201802877>.
- [2] Saraswat, S. K.; Rodene, D. D.; Gupta, R. B. Recent Advancements in Semiconductor Materials for Photoelectrochemical Water Splitting for Hydrogen Production Using Visible Light. *Renew. Sustain. Energy Rev.* 2018, 89 (March), 228–248. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2018.03.063>.
- [3] Eftekhari, A.; Babu, V. J.; Ramakrishna, S. Photoelectrode Nanomaterials for Photoelectrochemical Water Splitting. *Int. J. Hydrogen Energy* 2017, 42 (16), 11078–11109. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.03.029>.



Electrodeposición de PEDOT-Al₂O₃ para celdas invertidas de perovskita con eficiencia y potencia estabilizada mejorada.

Eider Erazo, Martín Gómez, Leonardo Rios, Edgar Patiño, Pablo Ortiz, María-T Cortés

Universidad de los Andes

ea.erazo@uniandes.edu.co

PALABRAS CLAVE: PEDOT:PSS-Al₂O₃, Celdas perovskita, Electrodeposición

INTRODUCCIÓN

Las celdas solares de perovskita son una alternativa llamativa para disminuir los costos de la energía fotovoltaica.1 Entre los materiales utilizados en estas celdas se destaca el PEDOT:PSS por su bajo costo. Sin embargo, el PEDOT:PSS genera bajas eficiencias en las celdas debido a sus niveles energéticos.2

MÉTODOS

En este trabajo se electropolimerizó PEDOT:PSS-Cl sobre ITO y se modificó con Al₂O₃ electrodepositado por vía electroquímica con un recocido térmico. Sobre estos sustratos se fabricaron celdas solares y se caracterizaron mediante curvas JV y medidas de potencia estabilizada. Los materiales se caracterizaron mediante técnicas electroquímicas, espectroscópicas y de microscopía.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se encontró que la modificación del PEDOT:PSS-Cl con Al₂O₃ mejora la eficiencia de las celdas solares principalmente por el aumento en la fotocorriente y voltaje. También se encontró que las celdas con PEDOT Al₂O₃ tienen la misma potencia estabilizada que la determinada mediante curvas JV. En cambio, las celdas con sólo PEDOT:PSS-Cl entregan alrededor del 90% de su eficiencia como potencia estabilizada. Los anteriores resultados concuerdan con una mejora en los niveles energéticos (HOMO) del PEDOT al incorporar Al₂O₃ que lo hace más compatible con la perovskita. Se probaron varias temperaturas de recocido del Al₂O₃ y se determinó la temperatura que resulta en mejores eficiencias. Al incrementar la temperatura se encontró que la eficiencia disminuye, esto concuerda con una menor absorbancia debido a polarones y bipolarones del PEDOT, la misma tendencia se encontró mediante análisis Mott-Schottky. Estos resultados podrían contribuir en el desarrollo de celdas solares más eficientes.

REFERENCIAS

- (1) Han, W.; Ren, G.; Liu, J.; Li, Z.; Bao, H.; Liu, C.; Guo, W. Recent Progress of Inverted Perovskite Solar Cells with a Modified PEDOT:PSS Hole Transport Layer. *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2020, *acsami.0c13576*. <https://doi.org/10.1021/acsami.0c13576>.
- (2) Jiang, K.; Wu, F.; Zhang, G.; Chow, P. C. Y.; Ma, C.; Li, S.; Wong, K. S.; Zhu, L.; Yan, H. Inverted Planar Perovskite Solar Cells Based on CsI-Doped PEDOT:PSS with Efficiency beyond 20% and Small Energy Loss. *J. Mater. Chem. A* 2019, *7* (38), 21662–21667. <https://doi.org/10.1039/C9TA08995K>.



PROPIEDADES ELECTRÓNICAS, ELECTROQUÍMICAS Y BACTERICIDAS VÍA ERO DE NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDOS METÁLICOS ACTIVADAS FOTOQUÍMICAMENTE

YENNY AVILA 1, JHONATAN CORRALES 2, ISRAEL VALENCIA 3, YUBERTH GARCIA 1.

1. Universidad Santiago de Cali
2. Universidad Tecnológica de Pereira
3. Universidad Nacional Autónoma de México

yennytorres@usc.edu.co

PALABRAS CLAVES : FOTOCATÁLISIS, NANOPARTÍCULAS, ANTIBACTERICIDAS

INTRODUCCIÓN

En este trabajo se lleva a cabo el estudio de las propiedades electrónicas, electroquímicas y microbiológicas de Np α -MnO₂ y CuO, determinando el mecanismo bactericida específico de las Nps a través de EROs activados vía foto - catalítica en suspensión y estado sólido contra los algunos microorganismos.

MÉTODOS

Sinterización usada para obtención de targets de óxidos metálicos.

Ablación láser usada para síntesis de nanopartículas.

Fotocatálisis como mecanismo de inhibición antimicrobiana

Voltametría cíclica, UV-Vis (Reflectancia difusa) y DFT Gaussian para estimar las propiedades electrónicas Susceptibilidad microbiana en suspensión como mecanismo de detección contra S. Aereus y E. Coli

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

- ✓ Existe un efecto significativo del solvente en la estabilización de las nanopartículas obtenidas por ablación láser.
- ✓ A mayor tiempo y energía la actividad óptica de las nanopartículas aumenta y así mismo el tamaño de las nanopartículas.
- ✓ El valor de la brecha energética entre HOMO y LUMO para las NPs en suspensión coloidal determinada por el método de Tauc fue mayor al calculado para NPs inmovilizadas por espectro-electroquímica-. Por lo tanto, las interacciones en estado sólido y posibles efectos de transferencia de carga, favorecen la disminución del GAP en este tipo de nanopartículas.
- ✓ La funcionalización de las nanopartículas de MnO₂ con el aminoácido L-Prolina conllevan a una mejora en la brecha energética entre HOMO y LUMO, el cual fue de 2.67 eV respecto a las nanopartículas sin funcionalizar (4.93 eV). Posible resonancia y transferencia de carga entre el ligante y las nanopartículas favorecen este efecto.

REFERENCIAS

- [1] M. Pujol, "Epidemiología general de las infecciones nosocomiales," *Enferm Infecc Microbiol Clin*, vol. 31, no. 2, pp. 108–113, 2016.
- [2] A. M. Revista, "Archivo histórico."
- [3] J. O'neill, "More in Singapore popping vitamins, supplements," *Straits Times*, no. May, 2018.
- [4] C. Guzmán-Terán, V. Rodríguez-Rodríguez, and A. Calderón-Rangel, "Análisis de usos y resistencia a antibióticos en una UCI de Montería, Colombia," *Rev Med Risaralda*, vol. 24, no. 2, pp. 75–80, 2018.
- [5] M. J. Hajipour et al., "Antibacterial properties of nanoparticles," *Trends Biotechnol.*, vol. 30, no. 10, pp. 499–511, 2012.



SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA (Ag-NP) EN TELA DE ALGODÓN UTILIZANDO EXTRACTOS DE HOJAS DE *Eucalyptus globulus*

Pablo Salgado¹, Luis Bustamante², Manuel Francisco Meléndrez³, Olga Rubilar⁴, Claudio Salazar¹, Gladys Vidal^{5,*}

1. Departamento de Ingeniería Civil, Facultad de Ingeniería, Universidad Católica de la Santísima Concepción, Alonso de Ribera 2850, Concepción, Chile

2. Departamento de Análisis Instrumental, Facultad de Farmacia, Universidad de Concepción, Chile

3. Interdisciplinary Group of Applied Nanotechnology (GINA), Hybrid Materials Laboratory (HML), Department of Materials Engineering (DIMAT), Faculty of Engineering, University of Concepcion, 270 Edmundo Larenas, Box 160-C, Concepcion 4070409, Chile

4. Centro de Excelencia en Investigación Biotecnológica Aplicada al Medio Ambiente (CIBAMA), Facultad de Ingeniería y Ciencias, Universidad de La Frontera, Temuco 4811230, Chile

5. Grupo de Ingeniería y Biotecnología Ambiental, Facultad de Ciencias Ambientales y Centro EULA-Chile, Universidad de Concepción, Concepción 4070386, Chile.

PALABRA CLAVES: Nanopartículas, Eucalyptus, Extractos, Tela

INTRODUCCIÓN

Las Ag-NP poseen una importante actividad antibacteriana. Se ha usado extractos de *E. globulus* para obtener Ag-NP, pero no se conoce un claro mecanismo explicando la formación de Ag-NP usando extractos. El objetivo de este trabajo fue estudiar el efecto de los fitoquímicos en extractos de *E. globulus* formando Ag-NP.

METODOLOGÍA

Las Ag-NP en tela se sintetizaron mezclando AgNO₃ y extractos de *E. globulus*. Las Ag-NP fueron caracterizadas por diferentes técnicas analíticas. Se cuantificó los compuestos fenólicos, azúcares reductores y proteínas previa y posteriormente a la formación de Ag-NP. Se evaluó además la actividad antibacteriana de las Ag-NP.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La deposición de Ag-NP se expresó por el cambio de color de las telas, cambiando de color blanco a tonos café o grises, indicando la presencia de Ag-NP. Las imágenes SEM muestran la presencia de nanopartículas en las fibras de tela. Los análisis EDX indican que las nanopartículas obtenidas están compuestas por Ag, C y O. La presencia de C señala la interacción de fitoquímicos con las Ag-NP. Los análisis TEM también muestran la presencia de nanopartículas de tipo esféricas, con tamaños promedios menores a 100 nm. Los estudios de difracción de electrones y difracción de rayos X muestra la presencia de nanopartículas de tipo Ag y Ag₂O. Los estudios FTIR confirman la interacción de fitoquímicos con las Ag-NP. Los análisis de fitoquímicos indican que los compuestos fenólicos y los azúcares reductores son los principales formadores de Ag-NP. Las Ag-NP mostraron una importante actividad antibacteriana.

REFERENCIAS

1. Tunable Colors and Durable Antibacterial and Self-Healing Superhydrophobic Properties. *Advanced Functional Materials* 2016, 26 (4), 569-576.
2. Balamurugan, M.; Saravanan, S., Green Synthesis of Silver Nanoparticles by using Eucalyptus Globulus Leaf Extract. *Journal of The Institution of Engineers (India): Series A* 2017, 98 (4), 461-467.
3. Xiao, Z.; Yuan, M.; Yang, B.; Liu, Z.; Huang, J.; Sun, D., Plant-mediated synthesis of highly active iron nanoparticles for Cr(VI) removal: Investigation of the leading biomolecules. *Chemosphere* 2016, 150, 357-364.

INSTITUCIONES FINANCIADORAS

Proyecto ANID código PAI77190082 y ANID/FONDAP/15130015



QUÍMICA DE PRODUCTOS NATURALES Y FARMACÉUTICOS

ILHCL-64

OPTIMIZATION OF THE ULTRASOUND ASSISTED EXTRACTION (UAE) OF *Passiflora ligularis* LEAVES FLAVONOIDS AND EVALUATION OF THEIR HYPOGLYCEMIC ACTIVITY

P. Sepúlveda¹, S. Echeverry¹, G. Costa², M. Aragón¹.

¹Universidad Nacional de Colombia, Av Cra 45 N° 30-03 Bogotá D.C, Colombia,
dmaragonn@unal.edu.co

²Pontificia Universidad Javeriana, Carrera 7 No. 43-82, Bogotá D.C, Colombia.

KEY-WORDS: Passiflora, flavonoids, optimization, ultrasound

INTRODUCTION

Multiple medicinal uses have been attributed to the genus *Passiflora*, some have been related to the presence of flavonoids (1). In this study, the ultrasound extraction conditions of *P. ligularis* (granadilla) leaves were optimized to increase the content of flavonoids, in order to increase the hypoglycemic activity of the extract.

METHODS

The effect of time, temperature, and percentage of ethanol on ultrasound extraction of flavonoids was analyzed using the Response surface methodology (Box-Behnken experimental design). Hypoglycemic activity was evaluated in an in vitro assay for antiglycation activity and an in vivo glucose tolerance test.

RESULTS AND CONCLUSIONS

Optimization of the total flavonoid content (TFC) in leaves of *P. ligularis* was achieved using UAE. The significant regression model which fits a linear model ($p < 0.01$), predicted the optimal values of the dependent variable, the process proved to be reproducible, achieving a 33% increase in TFC compared to an extract obtained by infusion (extraction method of traditional medicine).

It was evidenced by two methods, that the optimization of the TFC increased the hypoglycemic activity of the extract. First, by means of the Spearman correlation ($\rho = 0.9821$, $p < 0.0001$) found between the flavonoids and the antiglycation activity of the different extracts of the experimental design, obtaining a lower IC_{50} value for the optimized extract compared to the extract obtained by infusion. Secondly, the first one showed a higher decrease in blood glucose levels ($t = 30$ min, $p < 0.05$; Dose 250 mg/Kg) in the in vivo test.



DESIGN OF A NOVEL BIOASSAY FOR EVALUATION OF INSECTICIDAL ACTIVITY OF VOLATILE ORGANIC COMPOUNDS (VOCs) EMITTED BY BACTERIA

Albert Patiño-Restrepo¹, Diana Sinuco¹, Juliet Prieto²

¹Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Departamento de Química, Grupo de Bioprospección de compuestos volátiles, Carrera 30 # 45-03, Bogotá D.C., 111321, Colombia. ²Pontificia Universidad Javeriana, Departamento de Química, Laboratorio de fitoquímica de productos naturales, Carrera 7 # 40 – 62, Bogotá D.C. 11023, Colombia.

KEY-WORDS: T. Castaneum, Sitophilus, insecticide, SPME

INTRODUCTION

World wild grain storage has the problematic of insect's attack, that affect the sensory and nutritional grains quality. Even, insecticides are used for their control, they present high toxicity and contamination of the grains¹. Then is necessary look for compounds with insecticidal activity that specifically reduce the damage without left several residues.

METHODS

We design a bioassay to evaluate the insecticidal activity against *Tribolium castaneum* of the VOCs produced by twenty-four bacteria strains obtained from Colombian Caribbean Sea. Four bacteria strains were the most active and the VOCs were analyzed by HS-SPME and GCMS². The identified compounds were evaluated using a fumigant activity test.

RESULTS AND CONCLUSION

Our bioassay was designed in order to evaluate exclusively the insecticidal activity produced by VOCs emitted by bacteria strains. This approach was made considering just the contact between insects and VOCs. Also, the volatile compounds emitted by culture media was considering and were omitted. Twenty-four bacteria strains belong to *Streptomyces* and *Paenibacillus* genus, were evaluated with the designed bioassay.

Four strains with insecticidal activity higher than 50%, were selected for HS-SPME and GCMS analysis. VOCs were identified by retention index and mass spectra comparison using reference compounds. The most abundant VOCs were methyl benzoate, 2-heptanone, and furfuryl alcohol. These compounds were evaluated in a fumigant test against *T. castaneum*, *S. zeamais* and *S. oryzae*. Furfuryl alcohol presented the highest insecticidal activity with a LC50 near to those showed for positive control Nuvan 50 EC. Finally, in comparison between genus, VOCs emitted by *Paenibacillus* bacteria could be used as a potential biocontrol.

REFERENCES

- (1) Wang, H.; Cheng, Z.; Yuan, H.; Zhu, N.; Lou, Z.; Otieno, P. *Sci. Total Environ.* 2020, 710.
- (2) Veselova, M. A.; Plyuta, V. A.; Khmel, I. A. *Microbiology* 2019, 88 (3), 261–274.
- (3) Coconubo Guio, L. C.; Sinuco León, D. C.; Castellanos Hernández, L. *Rev. Colomb. Química*, 2020, 49 (1), 20–25.



FLAVONES ISOLATED FROM *Scutellaria incarnata* ROOTS AND THEIR NEUROPROTECTIVE EFFECTS IN SH-SY5Y AND CAD CELLS

Vásquez-Londoño, CA¹, Howes, M-JR², Arboleda, G², Rojas-Cardozo, MA¹

¹Universidad Nacional de Colombia. Faculty of Sciences - Department of Pharmacy. Bogotá, Colombia. ²Universidad Nacional de Colombia. Faculty of Medicine - Institute of Genetics Bogotá, Colombia. ³Royal Botanic Gardens, Kew, Natural Capital and Plant Health Department, Richmond, United Kingdom.

KEY-WORDS: Flavones, *Scutellaria incarnata*, neuroprotection

INTRODUCTION

Certain *Scutellaria* species are recognised for synthesising bioactive 4'-deoxyflavones¹. In Colombia, *S. incarnata* is called "alegría" signifying its traditional use for central nervous system complaints². Nevertheless, its phytochemistry and bioactivity remains unexplored. The aim of this research is to examine the chemistry and neuroprotective effects of *Scutellaria incarnata*.

METHODS

Cytotoxicity of *S. incarnata* root, stem and leaf ethanolic extracts was evaluated in SH-SY5Y and CAD cells. Extracts were chemically profiled by HPLC-UV-MSn; compounds were isolated using column chromatography; their structures elucidated by ¹H and ¹³C NMR spectroscopy. Neuroprotection against C₂-ceramide and rotenone was assessed in SH-SY5Y and CAD cells.

RESULTS AND CONCLUSIONS

S. incarnata root extract (25-200 µg/mL) did not induce cytotoxicity in SH-SY5Y and CAD cells over 24 hours. Constituents detected in the root extract were assigned as 4'-deoxyflavones and clerodane diterpenoids by accurate mass, MSn data and UV spectra interpretation. Pre-treatment for six hours with the root extract (25-100 µg/mL), and its polar fractions (25-100 µg/mL), prevented cell death induced by C₂-ceramide and rotenone over 18 hours in SH-SY5Y and CAD cells. Glycosylated and aglycone flavones and clerodane diterpenoids were isolated from the root extract and their structures elucidated by NMR spectroscopy. Some isolated compounds (12,5-50 µg/mL) were neuroprotective against C₂-ceramide and rotenone in SH-SY5Y and CAD cells, but others were cytotoxic (>12,5 µg/mL). Synergic neuroprotection and suppression of the cytotoxic effects was observed with some isolated flavones. This is the first report comprising chemical profiling, structural elucidation and evaluation of neuroprotective effects of metabolites isolated from *S. incarnata* roots.



MORPHOLOGICAL IDENTIFICATION AND CHEMICAL SCREENING OF MUSHROOMS FROM THE MADIDI NATIONAL PARK

Sergio M. Espinoza Orellana 1, Elizabeth Melgarejo Estrada 2, Sonia Torrico Vallejos 1.

1. Universidad Mayor de San Simón
2. Universidad de Buenos Aires

PALABRAS CLAVES : Madidi polypore neotropical screening

INTRODUCCIÓN

Despite continuous research in the area, most of the neotropical mushroom species are still unknown, as are all the benefits they may provide for humankind. In the present research, eleven mushroom specimens were collected from the Madidi National Park in Bolivia, a globally recognized biodiversity hot spot, and chemically explored.

MÉTODOS

Specimens were morphologically characterized and their methanolic extracts screened for the presence of secondary metabolites by means of thin-layer chromatography and precipitation reactions. Taxonomic determinations were based on specialized bibliography and taxonomic keys accompanied by a macroscopic and microscopic evaluation.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Among the collected specimens were found the species *Ganoderma citriporum* Ryvarden e Iturr., *Fulvifomes rhytiphloeus* (Mont.) Camp.-Sant. & Robledo, and *Cerrena sclerodepsis* (Berk.) Ryvarden, with the first two being recently communicated as a “first report” for Bolivia. Five specimens were tentatively identified to the same extent, and three were left at the genus level. Chemical screening of the methanolic extracts showed a wide diversity of secondary metabolites, with terpenoids/phenylpropanoids and triterpenes/steroids being the most common across specimens. Some presented an important potential regarding the presence of alkaloids and phenolic compounds, whereas flavonoids, sesquiterpene lactones and cardiac glycosides resulted negative for all collected samples. As far as the researchers are concerned, *Ganoderma citriporum*, *Fulvifomes rhytiphloeus* and *Cerrena sclerodepsis*, as well as some other collected specimens, were chemically evaluated for the first time.



RELACIÓN DE LA PRODUCCIÓN METABÓLICA DE BIOSURFACTANTES CON ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA PROVENIENTES DE BACTERIAS MARINA

Albert Patiño-Restrepo¹, Manuela Montoya-Giraldo¹, Marynés Quintero¹, Lina M. Blandón¹, Javier Gómez-León¹

¹Laboratorio de bioprospección marina, Instituto de investigaciones marinas y costeras "José Benito Vives de Andrés" INVEMAR, Santa Marta 470006, Colombia.

adpatinor@unal.edu.co

PALABRAS CLAVES: Caribe-colombiano, surfactina, péptidos, Redes-moleculares.

INTRODUCCIÓN

Los biosurfactantes son conocidos por su aplicación en biorremediación,^{1,2} además, se ha demostrado que poseen propiedades de importancia biomédica como la antimicrobiana³. Este trabajo, presenta la producción de estos compuestos a partir de bacterias marinas, la evaluación de su actividad antimicrobiana y la construcción de sus redes moleculares.

MÉTODOS

Se realizó la extracción de biosurfactantes extracelulares de 5 bacterias marinas, con HCl y una mezcla CH₂Cl₂:MeOH (65:35). Los extractos fueron caracterizados por FT-IR, TGA, CLAE-MS, se evaluó su actividad antimicrobiana (contra *Staphylococcus aureus* meticilino resistente (SARM) ATCC 43300 y *Candida albicans* ATCC 10231) y se construyeron sus redes moleculares

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En la producción de biosurfactantes se evidenciaron diferencias en cuanto a cantidad y color, características dependientes de su origen (tipo de bacteria). El mayor rendimiento se obtuvo con una cepa de *Bacillus* sp. La caracterización química mostró que los extractos poseían biosurfactantes de tipo lipopéptido por poseer bandas características en infrarrojo, y el análisis por CLAE-MS permitió identificar tentativamente algunos compuestos del extracto. El análisis de redes moleculares propuso relaciones en la producción metabólica de las bacterias y posibles derivados de surfactinas que se están produciendo en común. En la actividad antimicrobiana de los biosurfactantes contra *S. aureus* (SARM) y *C. albicans* se obtuvieron valores de MIC₅₀ entre (12,5-37,5) mg.L⁻¹ contra ambos patógenos. Los resultados obtenidos permitieron concluir que las bacterias marinas de profundidad evaluadas producen biosurfactantes de tipo lipopéptido y péptidos con actividad antimicrobiana, que producen compuestos en común y pueden estar asociados a su lugar de aislamiento.

REFERENCIAS

- (1) Mohd Isa, M. H.; Shamsudin, N. H.; Al-Shorgani, N. K. N.; Alsharjabi, F. A.; Kalil, M. S. Evaluation of Antibacterial Potential of Biosurfactant Produced by Surfactin-Producing *Bacillus* Isolated from Selected Malaysian Fermented Foods. *Food Biotechnol.* 2020, 34 (1), 1–24. <https://doi.org/10.1080/08905436.2019.1710843>.
- (2) Bracarense, A. A. P.; Takahashi, J. A. Modulation of Antimicrobial Metabolites Production by the Fungus *Aspergillus Parasiticus*. *Braz. J. Microbiol.* 2014, 45 (1), 313–321.
- (3) Yuliani, H.; Perdani, M. S.; Savitri, I.; Manurung, M.; Sahlan, M.; Wijanarko, A.; Hermansyah, H. Antimicrobial Activity of Biosurfactant Derived from *Bacillus Subtilis* C19. In *Energy Procedia*; Elsevier BV, 2018; Vol. 153, pp 274–278. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2018.10.043>.



EVALUACIÓN DE LOS EXTRACTOS DE LIPPIA ORIGANOIDES Y THYMUS VULGARIS EN MODELOS DE MEMBRANAS BACTERIANAS POR ESPECTROSCOPIA INFRARROJA

Maria Camila Klaiss Luna¹, Andrés Martínez ², Claudia Ortiz², Marcela Manrique Moreno¹.

¹Instituto de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia, Medellín, Antioquia

²Escuela de Microbiología, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Santander

marcela.manrique@udea.edu.co

PALABRAS CLAVES: Aceites Esenciales, Espectroscopia Infrarroja.

INTRODUCCIÓN:

Las infecciones bacterianas causadas por *E. coli* y *S. aureus* son la mayor causa de morbilidad y mortalidad en el mundo; por esta razón, existe un gran interés por desarrollar nuevos antibióticos. Los aceites esenciales de plantas aromáticas medicinales, han surgido como alternativa promisorias para el tratamiento de infecciones microbianas².

MÉTODOS

La determinación de la actividad antimicrobiana de los aceites esenciales se realizó mediante el método de microdilución en placa; mientras que la evaluación de la interacción de los aceites esenciales con los lípidos constituyentes de las membranas bacterianas se evaluó utilizando Espectroscopia Infrarroja.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Mediante el ensayo de actividad antimicrobiana, se alcanzaron Concentraciones Mínimas Inhibitorias (CMI₅₀) de 0.45 y 0.75 mg/ml para los aceites de *Lippia origanoides* y *Thymus vulgaris*, respectivamente, frente a *S. aureus* y *E. coli*. El análisis de las transiciones de fase utilizando Espectroscopia Infrarroja demostró que los aceites interactuaban con los lípidos constituyentes de las membranas de ambas bacterias. Sin embargo, en el modelo de membrana de *E. coli* se observó un incremento de la temperatura de transición con ambos aceites esenciales, mientras que en el caso de los modelos de membrana de *S. aureus* el efecto fue opuesto. Los cambios en la fluidez están relacionados con la desestabilización de la membrana bacteriana. Los resultados demostraron que los aceites esenciales son activos a nivel de membrana y que, por lo tanto, esta interacción puede estar relacionada con el mecanismo de acción de los aceites esenciales.

REFERENCIAS

[1] M.E. De Kraker, P.G. Davey, H. Grundmann, B.S. Group, Mortality and hospital stay associated with resistant *Staphylococcus aureus* and *Escherichia coli* bacteremia: estimating the burden of antibiotic resistance in Europe, *PLoS Med.* 8 (2011) e1001104.

[2] S. Mulyaningsih, F. Sporer, J. Reichling, M. Wink, Antibacterial activity of essential oils from *Eucalyptus* and of selected components against multidrug-resistant bacterial pathogens, *Pharm Biol* 49 (2011) 893-899.



Péptidos Derivados de Lactoferrina Bovina (LfcinB) con Actividad Anticancerígena Rápida y Selectiva contra Cáncer de Mama

Diego Sebastián Insuasty Cepeda¹, Andrea Carolina Barragán Cárdenas¹, Alejandra Ochoa Zarzosa², Joel Edmundo López Mesa², Javier Eduardo García Castañeda¹, Zuly Jenny Rivera Monroy¹.

1. Universidad Nacional de Colombia
2. Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

dsinsuastyc@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Actividad Anticancerígena, Péptidos, LfcinB

INTRODUCCIÓN

El cáncer de mama es un problema de salud pública a nivel mundial. Las cifras más recientes, indican que en el 2020 se posicionó como el más diagnosticado de todos, superando al cáncer pulmonar, y es el más mortal en mujeres. Es imperativo encontrar nuevas alternativas para combatir esta enfermedad.

MÉTODOS

Péptidos análogos a LfcinB, con modificaciones estructurales para potenciar su actividad biológica, fueron obtenidos por SPPS-Fmoc/tBu, fueron caracterizados por RP-HPLC y MS, purificados por RP-SPE y se evaluó su actividad contra líneas celulares derivadas de cáncer de mama y células normales mediante ensayos de microscopía, MTT y citometría de flujo.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se evidenció que modificaciones estructurales potenciaron considerablemente el efecto citotóxico de péptidos análogos a LfcinB; encontrando valores de IC₅₀ de hasta 6 μ M contra líneas celulares de cáncer de mama HTB-132 y MCF-7. Además, es un efecto selectivo, ya que exhiben una menor citotoxicidad contra las líneas celulares no cancerosas MCF-12, HEK-293 y fibroblastos primarios. El efecto contra las células de cáncer se genera rápidamente (menos de 90 minutos) y se mantiene en el tiempo hasta por 48 horas.

Mediante microscopía se observó que a los 5 minutos los péptidos empiezan a cambiar la morfología celular, generando que las células adquieran una forma redondeada y se encojan. Por citometría de flujo, usando kits de Anexina V, IP y JC-1, se pudo determinar que los péptidos análogos generan un tipo de muerte celular por apoptosis, que no compromete la membrana citoplasmática e involucra eventos de apoptosis intrínseca.

REFERENCIAS

- (1) Insuasty-Cepeda, D. S.; Barragán-Cárdenas, A. C.; Ochoa-Zarzosa, A.; López-Meza, J. E.; Fierro-Medina, R.; García-Castañeda, J. E.; Rivera-Monroy, Z. J. *Int. J. Mol. Sci.* 2020, 21 (12), 1–13.
- (2) Barragán-Cárdenas, A. C.; Urrea-Pelayo, M.; Niño-Ramírez, V. A.; Umaña-Pérez, A.; Vernot, J. P.; Parra-Giraldo, C. M.; Fierro-Medina, R.; Rivera-Monroy, Z.; García-Castañeda, J. *RSC Adv.* 2020, 10 (30), 17593–17601.
- (3) Guerra, J. R.; Cárdenas, A. B.; Ochoa-Zarzosa, A.; Meza, J. L.; Umaña Pérez, A.; Fierro-Medina, R.; Rivera Monroy, Z. J.; García Castañeda, J. E. *RSC Adv.* 2019, 9 (36), 20497–20504.



AGENTES CITOTÓXICOS SELECTIVOS CONTRA CÉLULAS CaCo-2 DERIVADOS DE PÉPTIDOS CORTOS ANALÓGOS DE LACTOFERRICINA

Andrea Carolina Barragán-Cárdenas¹, Diego Sebastian Insuasty Cepeda¹, Adriana Umaña Pérez¹, Joel Edmundo López Meza², Alejandra Ochoa Zarzosa², Zuly Jenny Rivera Monroy¹, Javier Eduardo García Castañeda¹.

1. Universidad Nacional de Colombia

2. Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

abarraganc@unal.edu.co

PALABRAS CLAVES: Péptidos, LfcinB, actividad anticancerosa

INTRODUCCIÓN

El carcinoma colorrectal es la segunda causa de muerte relacionada con el cáncer en el mundo. Péptidos sintéticos cortos derivados de Lactoferricina Bovina exhiben actividad anticancerosa frente a múltiples cánceres. El objetivo fue evaluar el efecto citotóxico de péptidos palindrómicos y diméricos modificados derivados de LfcinB frente células CaCo-2.

MÉTODOS

Los péptidos derivados de LfcinB se obtuvieron mediante síntesis SPPS-Fmoc/tBu, se caracterizaron por RP HPLC y MS, se purificaron mediante RP-SPE. La actividad de los péptidos frente a la línea celular Caco-2, fibroblastos normales y línea celular HEK-293 fue evaluada mediante microscopía, MTT y citometría de flujo.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Modificaciones puntuales a las secuencias LfcinB (21–25)Pal y LfcinB (20-30)2-K-Ahx permitieron obtener péptidos con un aumento en la actividad citotóxica contra las células CaCo-2 mientras mantenía o mejoraba la selectividad, ya que células normales no se vieron significativamente afectadas. En ambos casos se redujo el IC50 del compuesto, cambiando de 150 a 60 µg/mL y de 124 a 58 µg/mL para la modificación de palindrómico y dimérico, respectivamente. Se evidenció daño severo de las células CaCo-2 y se evaluó el tipo de muerte inducida, mostrando que el péptido dimérico modificado ejerce muerte principalmente por eventos apoptóticos. Con el péptido palindrómico modificado, la muerte celular fue inducida por vías necróticas y apoptóticas. Todo esto sugiere que una modificación específica en la secuencia peptídica puede mejorar la actividad anticancerígena, dando lugar a nuevas moléculas potenciales para el desarrollo futuro de fármacos para su uso contra el carcinoma colorrectal.

REFERENCIAS

1. Shapira, S.; Forka, A.; Arber, N.; Kraus, S. Peptides for Diagnosis and Treatment of Colorectal Cancer. *Curr. Med. Chem.* 2014, 21, 2410-2416.
2. Barragán-Cárdenas, A.; et al. The Nonapeptide RWQWRWQWR: A Promising Molecule for Breast Cancer Therapy. *Chem.Sel.* 2020, 5, 9691-9700.
3. Insuasty-Cepeda, D.S.; et al. Peptides derived from (Rrwqwrnkklg)2- k-ahx induce selective cellular death in breast cancer cell lines through apoptotic pathway. *Int. J. Mol. Sci.* 2020, 21, 1-13.



PURIFICACIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE LA LECTINA DEL VENENO DE CROTALUS DURISSUS CUMANENSIS

Shaha Noor Alam, Nohora Angelica Vega, Ariadna Rodriguez, Edgar Antonio Reyes
Grupo de Investigación en Proteínas, Universidad Nacional de Colombia

snalamr@unal.edu.co

PALABRAS CLAVES : Lectina, veneno, Crotalus durissus.

INTRODUCCIÓN

Del veneno de serpiente se han obtenido fármacos de gran importancia. Entre sus componentes hay péptidos y proteínas con actividad biológica, como enzimas, desintegrinas y lectinas entre otras. Las lectinas tienen la capacidad de reconocer azúcares, y por lo tanto nuestro objetivo fue aislar y caracterizar bioquímicamente la lectina (CdcL).

MÉTODO

Para purificar la lectina se llevaron a cabo diferentes métodos cromatográficos, que incluyeron cromatografía de afinidad e intercambio aniónico en un equipo FPLC ÄktaStart™ GE con una columna Hitrap™ Q Hp. La lectina pura se caracterizó bioquímicamente mediante SDS PAGE y ensayos de inhibición por carbohidratos.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La actividad aglutinante de la lectina de C. d. cumanensis fue inhibida por azúcares que tenían residuos de Galactosa (Gal); de acuerdo con lo anterior se estableció que el mejor método de purificación es primero la cromatografía de afinidad sobre Sepharosa-melibiosa (Gal α 1-6 Glc), y cromatografía de intercambio aniónico con Q-sepharosa. La lectina, mostró por SDS-PAGE, bandas en 37 kDa para el dímero en condiciones no reductoras; punto isoeléctrico (pI) mayor a 7.2 y aglutinó eritrocitos tipo A+ (3 g); la actividad fue inhibida por galactosa (Gal) y N-acetilgalactosamina (GalNAc). La presencia del grupo acetil y el 4-OH de la galactosa son importantes en el reconocimiento de la lectina promoviendo interacciones de tipo hidrofóbico y de puentes de hidrógeno respectivamente. La cantidad de lectina aislada fue baja, y corresponde con lo reportado para el proteoma, donde el 1% corresponde al contenido de lectina en el veneno de esta especie.

REFERENCIAS

Quintana-Castillo JC, Johanavargas L, Segura C, Estrada-Gómez S, Bueno-Sánchez JC, Alarcón JC. Characterization of the venom of C. d. cumanensis of Colombia: Proteomic analysis and antivenomic study. *Toxins (Basel)*. 2018;10(2):1-12. doi:10.3390/toxins10020085

Walker JR, Nagar B, Young NM, Hiram T, Rini JM. X-ray Crystal Structure of a Galactose-Specific C-Type Lectin Possessing a Novel Decameric Quaternary Structure †,‡. 2004:3783-3792

Hamako J, Suzuki Y, Hayashi N, et al. Amino acid sequence and characterization of C-type lectin purified from the snake venom of Crotalus ruber. *Comp Biochem Physiol - B Biochem Mol Biol*. 2007;146(3):299-306. doi:10.1016/j.cbpb.2006.11.022



ESTUDIO DE LAS LECTINAS PRESENTES EN EL ALGA ROJA TRICLEOCARPA CYLINDRICA

Angie Patricia Duarte Tayo, Nohora Angélica Vega Castro, Mónica Puyana Hegedus, Edgar Antonio Reyes Montaña

Universidad Nacional de Colombia

anduartet@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Lectina, algas rojas, *Tricleocarpa cylindrica*

INTRODUCCIÓN

En algas marinas las lectinas se han estudiado principalmente en los Phyla Rhodophyta y Chlorophyta. En comparación con las lectinas vegetales, las provenientes de esta fuente han sido poco estudiadas a pesar de su importancia por su variada actividad biológica en la que destacan actividad citotóxica, antiviral, antiinflamatoria, entre otras.

MÉTODOS

Para la purificación de lectinas de *T. cylindrica* se hizo eliminación de pigmentos previa extracción; para el aislamiento precipitación con sulfato de amonio, cromatografía de intercambio iónico y de afinidad. Se realizó cuantificación y detección de actividad aglutinante tras cada etapa, además de ensayos de inhibición, título y determinación de propiedades moleculares.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La purificación de lectinas de algas marinas requiere un tratamiento con acetona, para evitar hemólisis de los eritrocitos y obtener extractos sin pigmentos. Este paso es importante para llevar a cabo los ensayos de actividad y la purificación de las lectinas. La actividad aglutinante se encuentra en la fracción del 50-80%, y se aísla por cromatografía sobre DEAE-Sephadex A-50 y afinidad sobre Sepharosa 4B Glc. Por SDS-PAGE se determinó que el monómero tiene un peso molecular alrededor de 20 kDa, similar al reportado para PPL de *Ptilota plumosa* con un peso de 17,4 kDa (monómero). Aglutinó eritrocitos de humanos B>O>A. Los ensayos de inhibición mostraron especificidad por D-glucosa, y subtipos I, II, VI de eritrocitos B similar a lectinas de otras especies de algas rojas Anti-B. Discrimina los epímeros de manosa y glucosa, mostrando que es importante en el reconocimiento la posición del OH del C-2 del anillo de piranosa.

REFERENCIAS

Singh, R.S.; Walia, A.K. Lectins from red algae and their biomedical potential. *J. Appl. Phycol.*, 2017, 30 (3):1833-58. DOI: 10.1007/s10811-017-1338-5.

Sampaio, A. H.; Rogers, D.J.; Barwell, C.J.; Saker-Sampaio, S.; Nascimento, K.; Nagano, C.S.; Farias, W.R.L. New affinity procedure for the isolation and further characterization of the blood group B specific lectin from the red marine alga *Ptilota plumosa*. *J. Appl. Phycol.*, 2002, 14(6), 489-495. DOI: 10.1023/A:1022327010736.

Hori, K.; Miyazawa, K.; Ito, K. Hemagglutinins in marine algae. *Bull. Japan. Soc. Sci. Fish.*, 1981, 47 (6), 793-798. DOI: 10.2331/suisan.47.793.



DISEÑO Y SÍNTESIS DE INHIBIDORES DE LA RECAPTACIÓN DE SEROTONINA ISRS ANÁLOGOS A FÁRMACOS COMERCIALES MEDIANTE VIRTUAL SCREENING BASADO EN ESTRUCTURA Y EN LIGANDO.

James Guevara Pulido, Natalia Quintana , Herly Herrera
Universidad El Bosque

joguevara@unbosque.edu.co

PALABRAS CLAVES : Depresión, ISRS, VS, SÍNTESIS

INTRODUCCIÓN

El presente proyecto, expone el diseño y síntesis de nuevos fármacos inhibidores selectivos de la recaptación de serotonina ISRS, para el tratamiento de la depresión, buscando generar moléculas capaces de producir una disminución en los efectos secundarios de los mismos.

MÉTODOS

Para esto se utilizó un modelo QSAR basado en redes neuronales artificiales para la predicción de la concentración inhibitoria media (IC50), cálculos de afinidad por la proteína de membrana SERT, mediante docking molecular y predicción de toxicidad; Para esto se utilizaron los softwares, Matlab, Autodock Vina y PreADMET, respectivamente.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se modelaron 113 moléculas basadas en parámetros de modificación de volumen, adición de grupos funcionales, cambios en la estereoquímica de las moléculas, adición de halógenos y evaluación de isómeros estructurales. Finalmente, a partir de los resultados de IC50, afinidad y toxicidad se presentaron dos moléculas promisorias de alto interés, siendo estas, análogos a los fármacos Paroxetina y Vilazodona. Se proponen dos candidatos, el primero análogo de la Paroxetina por modificaciones de tamaño, resaltando el resultado no mutágeno en la prueba “Ames_test” de toxicidad, un resultado de IC50 menor al de la molécula original y una buena energía de afinidad por SERT. Adicionalmente se presenta como segundo potencial fármaco ISRS un análogo de la Vilazodona por adición de grupos funcionales, resaltando un IC50 menor y una afinidad más alta con respecto a la molécula original. Por último se sintetizó el análogo a la paroxetina con un buen rendimiento.

REFERENCIAS

- Coleman, J. A., Green, E. M., & Gouaux, E. (2016). X-ray structures and mechanism of the human serotonin transporter. *Nature*, 532(7599), 334–339.
- Danishuddin, & Khan, A. U. (2016). Descriptors and their selection methods in QSAR analysis: paradigm for drug design. *Drug Discovery Today*, 21(8), 1291–1302.
- Kiralj, R., & Ferreira, M. M. C. (2009). Basic validation procedures for regression models in QSAR and QSPR studies: Theory and application. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, 20(4), 770–787.



DIFERENCIACIÓN DE ESPECIES Y CEPAS DE PHYTOPHTHORA DE AMÉRICA CAUSANTES DEL TIZÓN TARDÍO: DETECCIÓN RÁPIDA MEDIANTE PERFILES DE LÍPIDOS Y PÉPTIDOS/PROTEÍNAS POR MALDI-MS

Paula Galeano García^{1,2,3*}, Fábio Neves dos Santos³, Natalia Guayazán^{4,5}, Silvia Restrepo⁶, Edna Dora Martins Newman Luz⁷, Marcos Eberlin⁸ and Chiara Carazzone⁹

¹Laboratory of Advanced Analytical Techniques in Natural Products, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia,

²Grupo de Investigación en Productos Naturales Amazónicos, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia, ³ThoMSon Mass Spectrometry Laboratory, University of Campinas, Institute of Chemistry, Campinas, Brazil.

⁴Laboratorio de Micología y Fitopatología, Departamento de Ingeniería Química, Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia, ⁵Department of Biology, University of Washington, Life Sciences Building, Seattle, Washington, USA. ⁶Cacao Research Center, CEPLAC/CEPEC, Ilhéus, BA, Brazil

p.galeano@udla.edu.co

INTRODUCCIÓN:

La rápida y confiable detección/identificación de fitopatógenos es fundamental, principalmente previa aparición de los síntomas en las plantaciones. En este sentido, la espectrometría de masas basada en los perfiles de péptidos/proteínas y/o lípidos característicos de cada microorganismo es una herramienta muy útil en su detección e identificación ¹⁻⁴.

MÉTODOS:

Las cepas de *P.infestans*; *P.betacei*; *P.andina*; *P.ipomoeae*; *P.palmivora*; *P.heveae*; *P.citrophthora* y *P.capsici* fueron cultivadas en medios de tomate de árbol y V8 clarificados. El micelio se extrajo usando Bligh/Dyer para lípidos y 80% de TFA para péptidos/proteínas. Para el análisis MALDI-TOF-MS se empleó como matrices DHB y CHCA ⁵.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

Los resultados MALDI-MS de los perfiles lipídicos extraídos de las cepas de especies del género *Phytophthora* son claramente diferentes indicando la viabilidad de la caracterización e identificación de estas especies de fitopatógenos por espectrometría de masas. Los resultados son aún más relevantes ya que corresponden a la diferenciación de cepas de una misma especie provenientes de distintos hospederos; se evidencia la relación hospedero/patógeno y se observa el fenómeno de la similitud de los perfiles de lípidos de acuerdo con el origen geográfico específico. En conclusión, los perfiles lipídicos obtenidos mediante MALDI-MS mostraron una gran diferenciación de cepas de Brasil y de origen Andino. El perfil lipídico también permitió diferenciar las cepas en términos de hospederos y lugares de colecta. Además, los perfiles individuales de péptidos/proteínas son visiblemente diferentes, sin embargo, el análisis multivariado de los perfiles MALDI-MS no mostró una diferenciación similar a lo observado en los perfiles lipídicos.

REFERENCIAS

- (1) Fernández-Álvarez, C. Et al. MALDI-TOF Mass Spectrometry for Rapid Differentiation of *Tenacibaculum* Species Pathogenic for Fish. *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 2017, 101 (13), 5377–5390.
- (2) dos Santos, F. N. Et al. Major Phytopathogens and Strains from Cocoa (*Theobroma Cacao* L.) Are Differentiated by MALDI-MS Lipid and/or Peptide/Protein Profiles. *Anal. Bioanal. Chem.* 2017, 409 (7), 1765–1777.
- (3) Dingle, T. C. Et al. MALDI-TOF Mass Spectrometry for Microorganism Identification. *Clin. Lab. Med.* 2013, 33 (3), 589–609.
- (4) Fong, P. Et al. Identification and Diversity of *Actinomyces* Species in a Clinical Microbiology Laboratory in the MALDI-TOF MS Era. *Anaerobe* 2018, 54, 151–158.



SLHCL-181

EFFECTO ANTIMICROBIANO, ANTIBIOFILM Y ANTIQUORUM SENSING DE ACEITES ESENCIALES DE PLANTAS COLOMBIANAS FRENTE A *E. coli*, *P. aeruginosa* Y *Salmonella Typhimurium*

Ruiz J.¹, Cáceres M.¹ y Ortiz C.^{2*}

¹Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología, Universidad Industrial de Santander, Colombia.

²Escuela de Microbiología, Universidad industrial de Santander, Colombia

ortizc@uis.edu.co; jennifer.ruiz@correo.uis.edu.co

PALABRAS CLAVE: aceites esenciales, antimicrobiano, antibiofilm y antiquorum sensing

INTRODUCCIÓN:

El incremento de microorganismos patógenos resistentes a antimicrobianos, ha promovido la búsqueda de nuevas alternativas con actividad biológica. Entre estas, los Aceites Esenciales (AE) de plantas colombianas constituyen una fuente promisoría de compuestos bioactivos con actividad antimicrobiana, antibiofilm y antiquorum sensing.

MÉTODOS:

Se evaluó la actividad antibacteriana, antibiofilm y antiquorum sensing de 20 AE utilizando el ensayo de microdilución en caldo, semicuantificación del biofilm por cristal violeta y la inhibición de violaceína, respectivamente, frente a dos cepas de *E. coli*, *P. aeruginosa* ATCC 27853, *S. Typhimurium* ATCC 14028 y *C. violaceum* CV026.

RESULTADOS Y CONCLUSIÓN:

Entre los AE evaluados, cinco presentaron actividad antimicrobiana o antibiofilm frente a las cepas de estudio. Entre estos se destacaron diferentes quimiotipos del AE de *Lippia origanoides*, los cuales mostraron actividad antibacteriana frente a las cuatro cepas de estudio, alcanzando concentraciones mínimas inhibitorias de 0.19 mg/mL para las cepas de *E.coli*; y de 0.38 mg/mL para *P. aeruginosa* y *Salmonella Typhimurium*. Adicionalmente, el AE de *L. origanoides* quimiotipo Timol Carvacrol (Bio-Reto019) presentó actividad antibiofilm a concentraciones subinhibitorias y actividad antiquorum sensing frente a la bacteria biosensora *C. violaceum* en concentraciones de 0.15 mg/mL. Los resultados sugieren que el Bio-Reto019 afecta posiblemente la comunicación celular y la capacidad de adhesión a superficies, evidenciando el potencial antimicrobiano, antibiofilm y antiquorum Sensing de los AE de plantas.

REFERENCIAS

Cáceres, M., Hidalgo, W., Stashenko, E., Torres, R., & Ortiz, C. (2020). Essential oils of aromatic plants with antibacterial, anti-biofilm and anti-quorum sensing activities against pathogenic bacteria. *Antibiotics*, 9(4).

Merritt, J. H., Kadouri, D. E., & O'Toole, G. A. (2005). Growing and Analyzing Static Biofilms. In *Current Protocols in Microbiology* (pp. 1-29).



ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA, ANTI-BIOFILM Y ANTI-QUORUM SENSING DE EXTRACTOS VEGETALES FRENTE A BACTERIAS PATÓGENAS

Cáceres M.¹, Stashenko E.² y Ortiz C.^{3*}

¹Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología, Universidad Industrial de Santander, Colombia.

²Escuela de Química, Laboratorio de Cromatografía, Centro de Excelencia CENIVAM, Universidad industrial de Santander, Colombia

³Escuela de Microbiología, Universidad Industrial de Santander, Colombia.

E-mail: marlon_caceres08@hotmail.com; ortizc@uis.edu.co

PALABRAS CLAVES: ANTIBACTERIANO ANTIBIOFILM EXTRACTO VEGETAL

INTRODUCCIÓN

La capacidad de las bacterias para formar biofilm mediante el mecanismo de comunicación quorum-sensing, entre otros, favorece el incremento en la virulencia y resistencia antibacteriana. Actualmente, se están adelantando diversas investigaciones sobre la búsqueda de nuevas opciones antimicrobianas. En este sentido, surgen los Extractos Vegetales (EV) como una alternativa prometedora.

MÉTODOS

Se evaluó la actividad antibacteriana, anti-biofilm y anti-quorum sensing usando los métodos de microdilución en placa, tinción en cristal violeta y producción de violaceína en *Chromobacterium violaceum* CV026, respectivamente. Se evaluaron 25 EV suministrados y caracterizados por el CENIVAM, contra las cepas patógenas *Staphylococcus aureus* ATCC 29213, *Salmonella Enteritidis* ATCC 13076.

RESULTADOS Y CONCLUSIÓN

Entre los EV evaluados, el obtenido de *Hyptis dilatata* exhibió la mayor actividad inhibitoria de la formación del biofilm en concentraciones mínimas inhibitorias de 0.37 frente a *S. Enteritidis*, y 1 mg/mL frente a *S. aureus*. Adicionalmente, los EV hidroalcohólicos de *Hyptis* sp y *Varronia curassavica* ocasionaron una inhibición de la violaceína mayor del 80% a una concentración de 0.37 mg/mL; lo cual indica que estos EV actúan bloqueando el mecanismo de comunicación celular quorum-sensing. Los resultados obtenidos sugieren que los componentes de los EV que presentan actividad biológica actúan inhibiendo mecanismos de adhesión celular y comunicación bacteriana, sin afectar la viabilidad celular; lo anteriorse evidencia debido a que, en las concentraciones evaluadas, los EV no tuvieron actividad antimicrobiana, pero en cambio presentaron actividades antibiofilm y antiquorum sensing. Estos resultados permiten concluir que los EV constituyen una alternativa promisoriosa para ser utilizados como compuestos inhibidores de la virulencia bacteriana.

REFERENCIAS

Dugassa, J., & Shukuri, N. (2017). Review on antibiotic resistance and its mechanism of development. *Journal of Health, Health, Medicine and Nursing*, 1(3), 1–17.

Cáceres, M., Hidalgo, W., Stashenko, E., Torres, R., & Ortiz, C. (2020). Essential oils of aromatic plants with antibacterial, anti-biofilm and anti-quorum sensing activities against pathogenic bacteria. *Antibiotics*, 9(4).



Evaluación de péptidos en lesiones de leishmaniasis cutánea fijadas con formalina e incluidas en parafina (FFPE) utilizando Espectrometría De Masas De Imágenes (MALDI-MSI)

Betsy Muñoz-Serrano,¹ Eduardo Chicano-Galvez,² Enrique Mejía-Ospino,³ Patricia Escobar-Rivero.¹

¹Centro de Investigaciones en Enfermedades Tropicales (CINTROP), Unidad de Quimioterapia, Universidad Industrial de Santander, 680002-Bucaramanga, Colombia.

²Instituto Maimónides de Investigación Biomédica de Córdoba (IMIBIC), Unidad de Proteómica, 14004-Córdoba, España,

³Laboratorio de Espectrometría de Masas (LEM), Universidad Industrial de Santander, 680002- Bucaramanga, Colombia.

*betsy2158819@correo.uis.edu.co.

PALABRAS CLAVES: Leishmaniasis cutánea, MALDI-MSI, Tópico.

INTRODUCCIÓN

La leishmaniasis cutánea (CL) es una enfermedad transmitida por vectores producida por la infección de los parásitos *Leishmania* [1]. Las lesiones se caracterizan por nódulos y úlceras cutáneas con bordes elevados y varias alteraciones epidérmicas y dérmicas con intensa reacción celular inflamatoria y macrófagos dérmicos infectados [2, 3]. No existe un tratamiento ideal y la búsqueda de nuevas alternativas farmacológicas es una prioridad. El tratamiento tópico constituye un enfoque disponible; sin embargo, su efectividad podría verse afectada por interacciones fármaco: lesiones CL [4]. Con el fin de explorar la distribución espacial de las moléculas de CL [5], el objetivo de este trabajo fue estandarizar un flujo de trabajo de imágenes de espectrometría de masas (MS-Imaging) en biopsias fijadas con formalina e incluidas en parafina (FFPE) con el fin de establecer y para comparar (con piel no infectada) cambios en la distribución de péptidos.

MÉTODOS

Se sacrificaron ratones BALB / c infectados con *L. (Viannia) braziliensis* y se procesaron las biopsias mediante FFPE. Se realizaron diferentes secciones, se desparafinaron y se montaron en portaobjetos de óxido de indio y estaño (ITO). Se probaron dos tipos diferentes de matrices: ácido α -ciano-4- hidroxicinámico (CHCA) y ácido 2,5-dihidroxibenzoico (DHB). También se sugirieron los parámetros utilizados para la adquisición y las posibles aplicaciones de este flujo de trabajo.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

El protocolo utilizado en este estudio mostró algunos perfiles de péptidos interesantes en secciones de piel FFPE de lesiones CL producidas por *L. (V.) braziliensis* con alta reproducibilidad y resolución lateral (espacial).

REFERENCIAS

- [1] Burza, S., et al (2018) *The Lancet*. 392: 951-970.
- [2] Williams, AC., et al (2004) *Adv Drug Deliv Rev*. 56(5):603-18.
- [3] Herman, A y Herman, AP. (2015) *J Pharm Pharmacol*. 67 (4): 473-85.
- [4] Muñoz, B., et al (2019) *Memórias do Instituto Oswaldo Cruz*, 114(0): 1-7.
- [5] Leinweber, B., et al (2010) *J Am Soc Mass Spectrom*, 20(1): 89-95.

EVALUACIÓN DE LA CAPACIDAD ANTIOXIDANTE Y CITOTÓXICA DE EXTRACTOS OBTENIDOS A PARTIR DE BASIDIOMAS DE TRAMETES VERSICOLOR.

Juan Carlos Quitian Romero¹, Sergio A. Loza-Rosas¹, Juan Pablo Ortiz-Rosas¹ Sandra Montoya Barreto²
1. Departamento de Química y Bioquímica, Grupo Investigación Núcleo, Universidad de Boyacá. Tunja, Boyacá, Colombia.
2. Planta de Bioprocesos y Agroindustria, Universidad de Caldas

jportiz@uniboyaca.edu.co

PALABRAS CLAVE: Hongos-silvestres Boyacá alimentos-funcionales nutraceuticos

INTRODUCCIÓN

Trametes versicolor, es un hongo que se ha destacado porque los extractos de sus cuerpos fructíferos presentan actividad antitumoral, antiinflamatoria, entre otras. Además, son utilizados en Asia para la elaboración de té, en donde su consumo está asociado a beneficios a la salud. Esta especie puede asimilar sustratos lignocelulósicos presentes en diversos residuos agroindustriales, lo cual implica que puede ser producido bajo los preceptos del desarrollo sostenible para su aprovechamiento en la elaboración de alimentos funcionales y productos nutraceuticos. Por lo cual, en una etapa previa se realizó una colecta en bosques del departamento de Boyacá (Colombia), obteniéndose dos cepas silvestres de *T. versicolor*, de las cuales fue posible producir cuerpos fructíferos (basidiomas) mediante cultivo sólido sobre residuos agroindustriales. En este reporte se presentan los principales resultados alcanzados para la obtención de extractos acuosos y etanólicos de los hongos producidos, así como la evaluación de su capacidad antioxidante y citotóxica.

MATERIALES Y MÉTODOS

Los cuerpos fructíferos de las dos cepas silvestres estudiadas (22.1 y 21.63) fueron producidos en la Planta de Bioprocesos y Agroindustria de la Universidad de Caldas, estos fueron deshidratados, molidos y tamizados. Los extractos acuosos fueron obtenidos por reflujo y fueron deshidratados por liofilización. Los extractos etanólicos fueron obtenidos tanto por reflujo como por maceración, posteriormente fueron llevados a sequedad por rotaevaporación. La evaluación de la capacidad antioxidante se realizó mediante el ensayo de DPPH, reportado como equivalentes Trolox (TEAC), asimismo, se determinó el contenido de polifenoles totales a través del ensayo Folin-Ciocalteu, reportado como equivalentes de ácido gálico (EAG). La evaluación de la capacidad antiproliferativa se realizó frente a la línea celular de cáncer gástrico AGS, mediante el ensayo colorimétrico con bromuro de 3-(4,5-dimetiltiazol-2-il)-2,5-difenil tetrazolio (MTT). Los resultados se expresaron en términos de IC50 ($\mu\text{g ES/mL}$; ES: extracto seco).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

El rendimiento más alto fue obtenido para la cepa 22.1, utilizando agua como extractante, con 25.52 ± 0.99 g de ES por cada 100 gramos de hongo seco (HS), con un contenido de polifenoles totales de 6.90 mgEAG/gHS y con una capacidad antioxidante de 4.69mgTEAC. Los extractos etanólicos de la cepa 22.1 fueron los únicos en mostrar un comportamiento antiproliferativo sobre la línea celular AGS, con un IC50 de 244 ± 15 $\mu\text{g ES/mL}$. Estos resultados demuestran el potencial de las cepas silvestres para la generación de productos con atributos funcionales.

REFERENCIAS

- Kamiyama, M.; Horiuchi, M.; Umamo, K.; Kondo, K.; Otsuka, Y.; Shibamoto, T. Antioxidant/anti-inflammatory activities and chemical composition of extracts from the mushroom *Trametes versicolor*. *Int. J. Nutrition and Food Sci.* 2013, 2, 85-91
- Thaipong, K.; Boonprakob, U.; Crosby, K.; Cisneros-Zevallos, L.; Byrne, D. Comparison of ABTS, DPPH, FRAP, and ORAC assays for estimating antioxidant activity from guava fruit extracts. *J. Food Compos. Anal.* 2006. 19(6-7), 669-675
- Zengin, G.; Karanfil, A.; Uren, M. C.; Kocak, M. S.; Sarikurkcu, C.; Gungor, H.; Phenolic content, antioxidant and enzyme inhibitory capacity of two *Trametes* species. *RSC advances.* 2016. 6(77), 73351-73357



Glicolípidos: Aislamiento, Diversidad Química y Potencial biológico

Jhon Fredy Castañeda Gómez,¹ Rogelio Pereda Miranda,² Mabel Clara Frago Serrano,² Eunice Ríos

Vásquez,³ Paula Charry Sánchez.³

¹Universidad Surcolombiana

²Universidad Nacional Autónoma de México

³Universidad del Quindío

*jhon.castaneda@usco.edu.co

PALABRAS CLAVES: Convolvulaceae, HPLC, reciclaje

INTRODUCCIÓN

Los glicolípidos se presentan como resinas en la naturaleza, formando en la mayoría de los casos, una macrolactona con ácidos grasos desde C14 hasta C18. El potencial biológico de estas sustancias ha mostrado el gran alcance en la terapéutica como antimicrobianos, citotóxicos y moduladores de citotoxicidad en células tumorales humanas.

MÉTODOS

Los glicolípidos se purifican mediante extracción con diversos disolventes, Cromatografía en columna, Cromatografía de líquidos por Reciclaje, y la identificación se realiza a través de la técnica de espectrometría de masas FAB, ESI, MALDI-TOF y Resonancia Magnética Nuclear de ¹H, ¹³C, COSY, TOCSY, HSQC y HMBC.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los purginosidos I-IV y las purginas I-III fueron obtenidos de *Ipomoea purga* como pentasacáridos, los albinosidos I-XI de *Ipomoea alba* como tetrasacáridos; el wolcottinosido I (tetrasacárido) y los wolcotinosidos II-IV (pentasacáridos) y la wolcotina I (dímero de pentasacáridos) de *Ipomoea wolcottiana*. De las semillas de *Ipomoea tricolor* se obtuvieron las tricolorinas A, K y M como tetrasacáridos, mientras que de la especie *Ipomoea hederifolia* se caracterizaron dos ácidos hexaglicosídicos y dos heptaglicosídicos. Todos los compuestos fueron evaluados para determinar su potencial como inhibidores en células resistentes a diversos fármacos empleados en la quimioterapia contra el cáncer. Los resultados permitieron determinar que la mayoría de los lipooligosacáridos inhiben o modulan la resistencia de células de cáncer de mama a la Vinblastina, presentándose mayor inhibición en la tricolorina A (FR MCF-7/Vin+cells 2164-fold a 25 µg/mL; murucoidina V (RFMCF-7/Vin+>255-veces), jalapinosidos I and II, purgina II, y el albinosido III, todos con RFMCF-7/Vin+>2000).

REFERENCIAS

- [1] Castaneda-Gómez, J., Figueroa-González, G., Jacobo, N., Pereda-Miranda, R., 2013. *J. Nat. Prod.* 76, 64–71.
- [2] Castaneda-Gómez, J., Rosas-Ramírez, D., Cruz-Morales, S., Frago Serrano, M., Pereda-Miranda, R., 2017. *Rev. Bras. Farmacogn.* 27, 434–439.
- [3] Castaneda-Gómez, J., Laviás-Hernández P., Frago Serrano M, Lorence, A., Pereda-Miranda R. *Phytochem. Lett.* 32, 77-82



COMPARACIÓN DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DE TRES VARIEDADES DE CANNABIS NO PSICOACTIVO DEL CAUCA Y SU POSIBLE APLICACIÓN MÉDICA

Paola Arango Romero , Ricardo Benítez Benítez , Jaime Martín
Universidad del Cauca

parango@unicauca.edu.co

PALABRAS CLAVES : Cannabis tetrahidrocannabinol cannabinol fitoterapéutico.

INTRODUCCIÓN

Colombia es uno de los países con mayor diversidad de plantas y un referente en el tema cannabis en el mundo, en el 2015 reglamentó el cultivo y transformación de esta planta, resulta importante identificar la composición de tres variedades de Cannabis no psicoactivo que se cultivan en el Cauca.

MÉTODOS

Se analizaron las flores y extractos etanólicos de tres variedades de cannabis cultivadas en el departamento del Cauca, mediante técnicas analíticas; las flores por cromatografía líquida de alta eficiencia acoplada a detector ultravioleta (HPLC-UV) y los extractos por cromatografía de gases acoplado a masas (CG-EM).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos confirmaron que las tres variedades denominadas en este escrito como variedades A, B y C, tienen un porcentaje de THC total; inferior al 1%; Δ^9 tetrahidrocannabinol (THC) y ácido tetrahidrocannabinólico (THCA), considerando estas variedades como cannabis no psicoactivo según el decreto 613 del 2017. Son variedades con porcentajes de CBD total; cannabidiol (CBD) y ácido cannabidiólico (CBDA) de 13, 60%, 15,12% y 16,98% respectivamente. Se encontraron otros cannabinoides como el cannabinol, el cannabicromeno, entre otros en menor proporción. El análisis permitió además de la caracterización de los cannabinoides, relacionarlos con la actividad biológica reportada en la literatura, antioxidante, antiinflamatoria (1), anti-tumoral (2) y el posible uso terapéutico relacionado con enfermedades como alzheimer, parkinson, epilepsia, tratamiento de diferentes tipos de cáncer (3), entre otras enfermedades. Las variedades de cannabis no psicoactivo cultivadas en el norte del Cauca pueden ser consideradas en la formulación de productos fitoterapéuticos.

REFERENCIAS

1. Pellati F.; Borgonetti V.; Brighenti V.; Biagi M.; Benvenuti S.; Corsi L. (2018). Cannabis sativa L. and Nonpsychoactive Cannabinoids: Their Chemistry and Role against Oxidative Stress, Inflammation, and Cancer. *Biomed Res Int*.
2. Tomko, A. M.; Whynot, E. G.; Ellis, L. D.; & Dupré, D. J. (2020). Anti-Cancer Potential of Cannabinoids, Terpenes, and Flavonoids Present in Cannabis. *Cancers*, 12(7).
3. Berman P.; Sulimani L.; Gelfand A.; Amsalem K.; Lewitus GM.; Meiri D. (2020). Cannabinoidomics - An analytical approach to understand the effect of medical Cannabis treatment on the endocannabinoid metabolome. *Talanta*.1;219:121336.



ACTIVIDADES BIOLÓGICAS Y CARACTERIZACIÓN QUÍMICA, POR UHPLC-ESI- Orbitrap-MS, DEL EXTRACTO DE LA FLOR DE *Posoqueria latifolia*

Lady J. Sierra¹, Raquel E. Ocazonez², Elizabeth Quintero², Jairo R. Martínez¹, Elena E. Stashenko^{1*}

¹Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, ²Laboratorio de Arbovirus, Centro de Investigaciones en Enfermedades Tropicales. Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

PALABRAS CLAVE: *Posoqueria latifolia*, flores, antioxidantes, fotoprotectores.

INTRODUCCIÓN

Posoqueria latifolia (Rubiaceae), originaria del Neotrópico, se utiliza en aplicaciones ornamentales o cosméticas (1). En este trabajo se obtuvieron fragancias y extractos florales de *P. latifolia* y se realizó su caracterización química por GC/MSy LC/MS, respectivamente. También se evaluaron las actividades antioxidante, citotóxica, sensibilizante y fotoprotectora.

MÉTODOS

La fracción volátil se obtuvo por el método HS-SPME y se analizó por GC/MS. El extracto se analizó por LC/MS. La actividad antioxidante se evaluó por ORAC y HPLC-ABTS⁻. Las actividades citotóxica y sensibilizante se determinaron por MTT y ELISA. También, se determinaron el factor de protección solar (FPS) y la longitud de onda crítica (λ_c).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los componentes principales de la fracción volátil de la flor de *P. latifolia* fueron salicilato de metilo (29%), acetato de (Z)-hex-3-en-ilo (20%) y (E)- β -ocimeno (12%). Los ácidos clorogénico y rosmarínico, quercetina-glucósidos, kaempferol-glucósidos y resveratrol-glucósidos se identificaron por LC/MS. El extracto de la flor de *P. latifolia* tuvo una actividad antioxidante alta ($1410 \pm 36 \mu\text{mol Trolox}^{\text{e/g}} \text{ ES}$) y, según el método HPLC-ABTS⁻, los ácidos clorogénico (29%) y rosmarínico (28%) mostraron la mayor contribución a la actividad antioxidante. El extracto tuvo la citotoxicidad baja ($\text{CC}_{50} > 330 \mu\text{g/mL}$) en células de riñón, hígado, monocitos y fibroblastos, y presentó actividad sensibilizante en monocitos (IL-8: $1010 \pm 80 \text{ pg/mL}$, $p < 0.05$ con respecto al control). Según COLIPA y FDA, el extracto de la flor de *P. latifolia* tiene un factor de protección solar alto ($\text{SPF} = 76 \pm 6$) y podría considerarse como un protector de amplio espectro ($\lambda_c = 382 \text{ nm}$).

REFERENCIAS

1. Taylor, C.; Hammel, B.; Gereau, R. Rubiacearum americanarum magna hama pars XXVII: six new species and a new taxonomic view of *Posoqueria*. Novon. 2011, 21, 118-132.



DESARROLLO DE FOTOPROTECTORES SOLARES CON BASE EN EXTRACTOS AISLADOS DE BIOMASA RESIDUAL DE *L. origanoides*

Jesica J. Mejía Medina¹, Raquel E. Ocazionez², Elizabeth Quintero³, Eduardo Ricci³, Jairo R. Martínez-Morales¹ y Elena E. Stashenko^{1*}

¹Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, ²Laboratorio de Arbovirus, Centro de Investigaciones en Enfermedades Tropicales. Universidad Industrial de Santander, ³Laboratorio de Desarrollo Galénico, Centro de Ciencias de la Salud, Universidad Federal de Rio de Janeiro, Brasil. * E-mail: elena@tucan.uis.edu.co

PALABRAS CLAVE: protector solar, antioxidantes, biomasa residual, *L. origanoides*.

INTRODUCCIÓN

Algunos fotoprotectores que existen en el mercado contienen mezclas de filtros sintéticos que presentan inconvenientes por la incompatibilidad o por generar efectos secundarios como alergias en sus usuarios (1). En esta investigación se estudiaron extractos hidroalcohólicos y los obtenidos con CO₂ supercrítico de biomasa residual de *L. origanoides* (fam. Verbenácea), como ingredientes activos en prototipos fotoprotectores.

MÉTODOS

Se desarrolló un prototipo de protector solar al cual se le incorporó el extracto de *L. origanoides* que presentó las mejores propiedades biológicas, viz. antioxidante, fotoprotectora, citotóxica y sensibilizante. El prototipo cosmético fue sometido a pruebas de estabilidad acelerada durante 90 días. Se evaluaron pH, color, viscosidad, separación de fases, FPS y foto estabilidad.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

A partir de la caracterización química por UHPLC-ESI-Orbitrap MS de los extractos de *L. origanoides*, se detectaron 28 compuestos fenólicos (12 flavonas, 8 flavanonas, 5 flavonoles, 2 flavanonoles y 2 chalconas) y algunos de sus hexósidos. Los extractos hidroalcohólicos de *L. origanoides* de los quimiotipos timol y felandreno, presentaron alta capacidad antioxidante y baja actividad citotóxica y sensibilizante en las líneas celulares evaluadas (HEK-293, riñón embrionario), (HEPG-2, hígado), (THP-1, monocitos de sangre periférica), (MRC-5, fibroblastos de pulmón), (XP4PA-SV y XP12RO-SV, fibroblastos dérmicos obtenidos de un paciente portador de mutación homocigótica) y se incorporaron como principios activos. Los dos prototipos diseñados, presentaron factor de protección solar de 45 y 38. Ambos fueron fisicoquímicamente estables bajo las condiciones evaluadas, con propiedades pseudoplásticas, característica favorable para los productos tópicos, ya que se facilita su aplicación sobre la piel (2).

REFERENCIAS

1. Mendonça F.; Silva, K.; Santos, K.; Nichols, H.; Katiyar, S. Skin photoprotection by natural polyphenols: anti-inflammatory, antioxidant and DNA repair mechanisms. Arch. Dermatol. Res. 2010, 302, 71-83.
2. Shin, S.; Cho, J.; Kim, S.; Shear thinning behavior of calcium silicate-based mold fluxes at 1623 K. J. Am. Ceram. Soc. 2014, 97, 3263-3269.



Acoplamiento molecular de derivados pirazoloisoquinolinicos dirigidos al receptor GABAA y el receptor 5HT1A

Estefany Arias*

Universidad Nacional de Colombia

*esariasq@unal.edu.co

PALABRAS CLAVES: Pirazoloisoquinolina, GABAA, 5HT1A

INTRODUCCIÓN

La OMS en 2016 reportó que, cerca del 10% de la población mundial padece de trastorno de ansiedad, sin embargo, estas cifras han aumentado debido a la pandemia por COVID 19. En este estudio se proponen derivados pirazoloisoquinolinicos como potenciales compuestos ansiolíticos al ser acoplados al receptor GABAA y 5HT1A.

MÉTODOS

Se usaron los programas AutoDock 4.2.6, AutoDock Vina y Dock6 para el acoplamiento molecular con el receptor GABAA (código: 6HUO) [1], Alprazolam como referencia. Se realizó un consenso de puntuación con el modelo de escalado [2]. Se seleccionaron dos compuestos que se acoplaron al receptor 5HT1A (7E2X) [3], fármacos Bupiriona, y Aripiprazol como referencias.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los compuestos TPI-4(3-(4-metoxifenil-1,5-dimetil-6,7,8,9-tetrahidro-3H-pirazolo[3,4- C]isoquinolina) y TPI-5(3-(4-fluorofenil-1,5-dimetil-6,7,8,9-tetrahidro-3H-pirazolo[3,4- C]isoquinolina) presentaron interacciones con HIS102 y con otros residuos que se encuentran en el bolsillo de benzodiazepinas del receptor GABAA y que se relacionan con las presentadas por alprazolam, TPI-5, obtuvo interacciones de tipo halógeno adicionales, las interacciones con HIS102 les permite una mayor afinidad por los receptores GABAA que tienen las subunidades $\alpha 1$ $\alpha 2$ $\alpha 3$ y $\alpha 5.1$. Al ser acoplados al receptor 5HT1A, los compuestos obtuvieron energías de afinidad parecidas a las del fármaco aripiprazol adicionalmente comparten la interacción por puente de hidrógeno con el aminoácido LYS191. Aunque los compuestos en el consenso de puntuación realizado para el acoplamiento del receptor GABAA, obtuvieron un score de puntuación menor que el fármaco de referencia, es probable que estos compuestos compartan el mecanismo de acción de aripiprazol, el cual es un agonista parcial del receptor 5HT1A y los compuestos seleccionados traten la ansiedad por las ambas vías.

REFERENCIAS

- (1) Masiulis, S.; Desai, R.; Uchański, T.; Martin, I. S.; Karia, D.; Malinauskas, T.; Zivanov, J.; Pardon, E. GABA A Receptor Signalling Mechanisms Revealed by Structural Pharmacology. 2019, 565 (7740), 454–459. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0832-5>.GABA.
- (2) Oda, A.; Tsuchida, K.; Takakura, T.; Yamaotsu, N.; Hirono, S. Comparison of Consensus Scoring Strategies for Evaluating Computational Models of Protein-Ligand Complexes. J Chem. Inf. Model. 2006, 46 (1), 380–391. <https://doi.org/10.1021/ci050283k>.
- (3) Xu, P.; Huang, S.; Zhang, H.; Mao, C.; Zhou, X. E.; Cheng, X.; Simon, I. A.; Shen, D. D.; Yen, H. Y.; Robinson, C. V.; Harpsøe, K.; Svensson, B.; Guo, J.; Jiang, H.; Gloriam, D. E.; Melcher, K.; Jiang, Y.; Zhang, Y.; Xu, H. E. Structural Insights into the Lipid and Ligand Regulation of Serotonin Receptors. Nature 2021, 592 (7854), 469–473. <https://doi.org/10.1038/s41586-021-03376-8>



Estudio de la capacidad de extractos vegetales para potenciar el efecto antifúngico de lipopéptidos de *Bacillus tequilensis* EA-CB0015 contra *Fusarium oxysporum* y *Colletotrichum acutatum*

Julieta M Ramírez-Mejía¹, Valeska Villegas-Escobar¹, Luis A Gómez¹, Fernando Echeverri²

1. Grupo CIBIOP, Departamento de Ciencias Biológicas, Universidad EAFIT. Carrera 49, #7 sur 50, Medellín, Antioquia, Colombia. 2. Grupo Química Orgánica de Productos Naturales, Instituto de Química, Universidad de Antioquia. Calle 67, #53- 108, Medellín, Antioquia, Colombia.

jmramirez2@eafit.edu.co

PALABRAS CLAVE: Lipopéptidos, Extractos vegetales, *Fusarium oxysporum*, *Colletotrichum acutatum*.

INTRODUCCIÓN

El control de fitopatógenos fúngicos es esencial para el desarrollo actual de la agricultura mundial. En este sentido, avanzar en el uso de metabolitos secundarios provenientes del género *Bacillus* y fuentes vegetales alternas, constituye una estrategia altamente promisorio para el control de los principales fitopatógenos de relevancia científica y agrícola.

MÉTODOS

Se investigó el efecto antifúngico de extractos vegetales; tanto comerciales, como propios, contra *F. oxysporum* y *C. acutatum*; además de la capacidad de estos para potenciar el efecto de los lipopéptidos de *B. tequilensis*. De otro lado, se realizaron estudios metabólicos de micelio intacto, mediante respirometría de alta resolución.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Nuestros resultados indican una inhibición en el crecimiento de los hongos en los cultivos tratados con aceites comerciales de menta, té y canela; además de un extracto vegetal de obtención propia, actualmente en proceso de caracterización fisicoquímica. Específicamente, se observó una reducción de hasta el 73% y el 41%, en la producción de biomasa en cultivos de *F. oxysporum* y *C. acutatum*, respectivamente. De otro lado, una evaluación de la capacidad respiratoria del micelio tratado, sugiere una alteración significativa de la respuesta bioenergética del hongo, por lo que nuestros resultados podrían estar revelando un novedoso blanco celular para el tratamiento de fitopatógenos de interés agrícola. Estudios adicionales se llevan a cabo con el fin de avanzar en el entendimiento de los mecanismos que median la respuesta celular de fitopatógenos a productos naturales con capacidad antifúngica.

REFERENCIAS

Arroyave-Toro, J. J., Mosquera, S., & Villegas-Escobar, V. Biocontrol activity of *Bacillus subtilis* EA-CB0015 cells and lipopeptides against postharvest fungal pathogens. *Biol. Control*. 2017, 114, 195-200.

Peipei An, Xingbin Yang, Jia Yu, Jianrui Qi, Xueyan Ren, Qingjun Kong. α -terpineol and terpen-4 ol, the critical components of tea tree oil, exert antifungal activities in vitro and in vivo against *Aspergillus niger* in grapes by inducing morphous damage and metabolic changes of fungus. *Food Control*. 2019, 98, 42-53.

Dean, R., Van Kan, J. A., et al. The Top 10 fungal pathogens in molecular plant pathology. *Mol. Plant. Pathol.* 2012, 13, 414-430.



DETERMINACIÓN DE PARÁMETROS DE EXTRACCIÓN Y CARACTERIZACIÓN POR HPLC Y LC/MS DE EXTRACTOS HIDROETANÓLICOS DE *Scutellaria incarnata* (LAMIACEAE)

Silvia M. Porras, Lady J. Sierra, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko*

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-
CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

*E-mail: elena@tucan.uis.edu.co

PALABRAS CLAVE: *Scutellaria incarnata*, extracto hidroetanólico, HPLC/DAD, LC/MS.

INTRODUCCIÓN

El género *Scutellaria* (Lamiaceae) posee más de 350 especies vegetales distribuidas en regiones templadas y montañas tropicales de todo el mundo; posee una gran variedad de compuestos bioactivos del tipo flavonoide (1). En la medicina popular, estas sustancias se emplean para controlar diversas afecciones como gripe, asma y neumonía (2).

METODOLOGÍA

Tallos y hojas de *S. incarnata* (100 g) se recolectaron en el Complejo Piloto CENIVAM (Bucaramanga, Colombia), y se secaron y molieron. Se realizó una doble extracción asistida con ultrasonido, y como variables de estudio se emplearon el tiempo de extracción, la relación solvente-agua y la temperatura, en un diseño factorial 2^3 con punto central.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Las siguientes fueron las mejores condiciones, con las cuales se obtuvieron los rendimientos de extracción más altos: temperatura de 30 °C, tiempo de 15 min, solución etanólica 50:50 y relación material vegetal-solvente (mv-ste) 1:20 y 1:10 para la primera y segunda extracción, respectivamente. Para la caracterización química por HPLC/DAD de los extractos, se emplearon como criterios de identificación los tiempos de retención (t_r), los espectros ultravioleta visible (UV-Vis) y patrones certificados; los espectros de masas y patrones de fragmentación de patrones certificados, para los cromatogramas obtenidos por LC/MS. Las flavonas fueron los principales metabolitos secundarios presentes en el extracto, la baicalina y la oroxilina A fueron los compuestos mayoritarios.

REFERENCIAS

- (1) Shang, X.; He, X.; He, X.; Li, M.; Zhang, R.; Fan, P.; Jia, Z. The genus *Scutellaria* an ethnopharmacological and phytochemical review. *J. Ethnopharmacol.* 2010, 128, 2, 279-313.
- (2) Sonoda, M.; Nishiyama, T.; Matsukawa, Y.; Moriyasu, M. Cytotoxic activities of flavonoids from two *Scutellaria* plants in Chinese medicine. *J. of Ethnopharmacol.* 2004, 91, 1, 65-68.



SLHCL-364

AISLAMIENTO, CARACTERIZACIÓN, CUANTIFICACIÓN Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE LOS FLAVONOIDES DE LA ESPECIE VEGETAL *Heliotropium Angiospermum Murray*

Arlen Camilo Ceballos Vargas*

Universidad Surcolombiana

*arlenceballos@hotmail.com

PALABRAS CLAVES: Heliotropium, Flavonoides, antioxidantes.

INTRODUCCIÓN

Los flavonoides son compuestos producidos por algunas plantas importantes, entre otras cosas porque, algunos presentan actividad antioxidante interviniendo en los procesos de oxidación, disminuyendo o retardando los daños oxidativos de una molécula. Con esta investigación se espera aislar y caracterizar los flavonoides de la especie *Heliotropium angiospermum Murray*.

MÉTODOS

Aislar los flavonoides de esta especie vegetal por técnicas cromatográficas, caracterizar sus estructuras químicas mediante pruebas colorimétricas y por técnicas espectroscópicas y espectrométricas; cuantificar el contenido en los extractos y fracciones por el método de Folin-Ciocalteu y Espectroscopía UV-VIS. Evaluar el efecto antioxidante mediante la prueba TEAC y DPPH.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Resultados parciales de la investigación. Se obtuvo 3,86 kg de material vegetal pulverizado, se emplearon 800 g para la extracción por la técnica de reflujo (1,25L EtOH/200g de material vegetal). Luego de concentrar mediante rota evaporación, la cantidad de extracto obtenido fue de 125g. Para la determinación preliminar de flavonoides, la reacción de Shinoda arrojó un resultado positivo, en tanto que, la prueba de Rosenheim (presencia de leucoantocianidinas), fue negativa. Una vez realizado el fraccionamiento primario por cromatografía en columna, se obtuvieron 70 fracciones en viales de 50ml. las cuales fueron reagrupadas en 11 fracciones, de acuerdo con los resultados obtenidos una vez realizada la cromatografía en capa fina. Las placas fueron reveladas a luz UV y las fracciones fueron reunidas en función de la similitud del factor de retención (Rf). Se espera continuar con la identificación de los componentes por métodos espectroscópicos y la evaluación de los efectos antioxidantes del extracto.

REFERENCIAS

- [1] Ávalos García, A., & Pérez Urria, E. Metabolismo secundario de plantas. *Reduca*, 2009, 2(3), 119-145. Melo, J. I., & Semir, J. Taxonomía del género *Heliotropium* L. (*Heliotropiaceae*) en Brasil. *Acta Bot. Bras.* 2008, 22(3), 754-770.
- [2] Valenzuela Montenegro, B. d., Espinosa, D., Modak, B., Rodríguez, F., & Imarai, M. Evaluación del Efecto Inmunoestimulante del Flavonoide Alpinona en Salmónidos. *Elsevier*. 2018, 74, 76-83.



QUÍMICA INORGÁNICA

SLDCL-19

SELF-ASSEMBLY AND SUPRAMOLECULAR ISOMERISM IN 1D METAL-ORGANOMETALLIC NETWORKS BASED ON TRANSITION METAL ASSEMBLIES FROM 1,1'-FERROCENE-DICARBOXYLIC ACID AND ANCILLARY NITROGEN HETEROCYCLE LIGANDS

María L. Ospina-Castro,^{a,b,c} Edward E. Ávila,^{a,c} Alexander Briceño,^{a,c} Andreas Reiber,^b Leonardo Pacheco-Londoño^a and Nataly J. Galán-Freyle^a

Universidad del Atlántico, IVIC, Universidad Simón Bolívar, Universidad YachayTech Universidad de los Andes

mariaospina@mail.uniatlantico.edu.co

KEY-WORDSS: ferrocenyl dicarboxylate, metal-organometallic networks

INTRODUCTION

The MOMNs based on ferrocenyl ligands has attracted a special interest, because of their intrinsic electrochemical properties (1). Likewise, the use of ferrocenyl units allows the possibility of metal metal interactions within resulting heterometallic assemblies. This approach provides new possibilities to modulate and a better performance as sensors and electrochemical (2).

METHODS

Hydrothermal synthesis using appropriate metal precursors and chelate ligands has aorded seven D arrays with dierent structural features: {[Cu(, '-phen)(Fdc)]·HO}n (1), {[Cu(, 'diMe-, '-bipy) (Fdc)]·HO}n (2), {[Co(, 'diMe-, '-bipy)(Fdc)]·HO}n (3), {[Cd(, 'diMe-, '-bipy) (Fdc)(HO)]}n (4), {[Co(-Stb)(Fdc)(OH)]}n (5), {[Zn(-Stb)(Fdc)(OH)]}n (6) and {[Cu(-Stb)(Fdc)]}n (7).

RESULTS AND CONCLUSIONS

The crystal structures comprise D chains built-up from the self-assembly of metal centres, chelate or monodentate nitrogen ligands and bridging, '-ferrocenedicarboxylate anion. Such arrangements contain similar building block units, resulting D arrays display dierent structural topologies. The major dierence in these structures is determined from the dierent conformations of the exible ferrocenyl or by the relative orientation of such units in the resulting MOMNs. Structures 1, 2 and 4 have zig-zag type D chains. In contrast, the molecular assembly of 3 comprises a D-helical chain related by a 21 screw-axis. When bidentate ligands is replaced by terminal ligand stepped chains are aorded for isomorphous phases of Co(II)/Zn(II)-derivatives (5 and 6), whereas 7 displays a double chain from bridging dicarboxylate showing a syn-anti coordination mode to adjacent metallic centres. A further characterization by Powder X-ray diraction reveals the presence of concomitantformation of conformational supramolecular isomers in the Co(II)/Fdc/, '-diMe-, '-bipy system (3).

REFERENCIAS

1. P. Kumar, A. Deep and K.-H. Kim, Trends Anal. Chem., 2015, ./j.trac...; (b) S. Jung, Y. Kim, S.-J. Kim, T.-H. Kwon, S. Huh and S. Park, Chem. Commun., 2011, 47, 2904-2906.
2. X. Meng, W. Cheng, L. Mi, M. Tang, H. Hou. "A nano-scale double-wheel-like framework: A novel assembly of six ferrocenedicarboxylate units with unusual coordination modes". Inorganic Chemistry Communications 2006. 9(6): 662-665.
3. P. J. Hagrman, J. Zubieta. "Structural Inuences of Organonitrogen Ligands on Vanadium Oxide Solids. Hydrothermal Syntheses and Structures of the Terpyridine Vanadates [VO(Terpy)][VO], [VO(Terpy)][VO], and [VO(Terpy)]". Inorganic Chemistry 2000. 39(15): 3252-3260.



SLDCL-96

LA PRIMERA FAMILIA DE MODELOS ESTRUCTURALES Y FUNCIONALES DEL SITIO ACTIVO DE UNA OXIGENASA MUY PARTICULAR: ACIREDUCTONE DIOXIGENASA (ARD)

Santiago A. Toledo^a, Glenn A. Blade,^a Jennifer L. Jaimes,^a Riffat Parveen,^a Wrenell Illustre,^a Diego Saldaña,^a Denisa A. Ivan,^a Vincent M. Lynch,^b Thomas R. Cundari,^c

- Department of Chemistry, St. Edward's University, 3001 South Congress Ave, Austin, Texas 78704, United States of America.
- Department of Chemistry, The University of Texas at Austin, 120 Inner Campus Dr Stop G2500, Austin, Texas 78712, United States of America.
- Department of Chemistry, CASCaM, University of North Texas, 1508 W. Mulberry Street . Denton, TX 76203, United States of America.

stoledoc@stedwards.edu

INTRODUCCIÓN:

En esta charla reportamos la síntesis, caracterización, y actividad biomimética de la primera familia de complejos modelo del sitio activo de la oxigenasa: Acireductone Dioxigenasa (ARD). Los complejos tienen patrones estructurales derivados de ligandos que contienen piridinas, fenolatos, y bases de Schiff.

MÉTODOS:

Química sintética, inorgánica, biomimética de coordinación. Compuestos de Níquel y Manganeso. Síntesis anaeróbica de compuestos y pruebas de reactividad de oxidación monitoreadas por RMN. Química computacional métodos DFT para cálculos de reactividad.

RESULTADOS:

- La primera familia de complejos modelo de la estructura y reactividad del sitio activo de Acireductone dioxigenasa fueron caracterizados y sintetizados
- Reactividad biomimética preliminar fue analizada con respecto a la oxidación de modelos de sustrato. Evidencia existe sobre la ruptura de enlaces de carbono mediados por oxígeno y el complejo metálico .
- Resultados de química computacional sugieren que el trayecto de reactividad propuesto es de hecho factible y tiene similitudes a cálculos hechos a nivel enzimático.



THIN FILMS OF TRANSITION METAL OXYNITRIDES: AN EXCELLENT ALTERNATIVE TO INCREASE THE CORROSION RESISTANCE OF STAINLESS STEELS.

B.F. Méndez, N.C. López, G.I. Cubillos.*

Grupo de Materiales y Procesos Químicos, Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

*gcubillos@unal.edu.co

KEY-WORDS: Oxynitride, sputtering, corrosion resistance.

INTRODUCTION

Thin films of transition metal oxynitrides (TMeOxNy) increase the corrosion resistance of stainless steel by one or two orders of magnitude, compared to uncoated steel and are an alternative to improve the service time of steels in environments highly corrosive.

METHODS

Films are deposited using the radio frequency (RF) sputtering technique. Its morphology was evaluated by scanning electron microscopy (SEM) and atomic force microscopy (AFM). The crystal structure was determined by (XRD) and the corrosion resistance from the potentiodynamic polarization curves.

RESULTS AND CONCLUSIONS

The results show, from the linear polarization curves, that the corrosion resistance of steels coated with thin films of zinc, nickel-copper, zirconium or cerium oxynitrides, increase the corrosion resistance of stainless steel by one or two orders of magnitude, compared to bare steel.

This behavior is directly associated with the change in surface morphology that induces the presence of a nitrogen concentration of less than 1%, within the crystal structure of the TM oxide. Despite the low nitrogen concentration and the oxide being thermodynamically more stable against oxynitride; this chemical composition of nitrogen is sufficient to generate morphologically dense coatings, with few micro-pore type surface imperfections and / or micro-cracks. The structure in the deposited transition metal (TM) oxynitrides is predominantly cubic, where oxygen atoms have been replaced by nitrogen atoms.

REFERENCIAS

[1] Cappello, A; Mirengi, L; Rizzo, A; Signore, M.A; Tagliente, M.A. Characterization of zirconium oxynitride films obtained by radio frequency magnetron reactive sputtering. *Thin Solid Films*. 2005, 515, 17, 6798–6804.

[2] Alfonso J.E; Bethencourt, M; Blanco, G; Cubillos, G.I; Mendoza, M.E. Chemical composition and microstructure of zirconium oxynitride thin layers from the surface to the substrate-coating interface. *Materials Characterization*. 2017. 131, 20, 450-



SÍNTESIS Y RESISTENCIA A LA CORROSIÓN DE OXINITRUIROS DE ZIRCONIO-CERIO

Brian Felipe Mendez Bazurto , Gloria Carolina Numpaque , Gloria Ivonne Cubillos González
Universidad Nacional de Colombia

bfmendezb@unal.edu.co

PALABRAS CLAVES: Cerium-zirconium oxynitride, sputtering, corrosion

INTRODUCCIÓN

Películas delgadas de oxinitruros de cerio-zirconio (Ce-ZrOxNy) incrementan la resistencia a la corrosión del acero inoxidable 316L en uno o dos órdenes de magnitud, en función del flujo de nitrógeno empleado como gas reactivo en la síntesis de la película.

MÉTODOS

A partir de un blanco concéntrico de Ce-Zr se depositaron sobre AISI 316L películas de CeOxNy-ZrOxNy mediante sputtering (RF). Su morfología se evaluó por microscopía electrónica de barrido (SEM), la estructura por difracción de rayos x (DRX) y la resistencia a la corrosión mediante las curvas polarización potenciodinámica.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Dada la diferencia de potencial y la presencia de oxígeno en la cámara de sputtering, por ser el cerio un metal pirofórico, el blanco entra en ignición y se forma óxido de cerio en el perímetro del mismo. La formación de óxido, trae como consecuencia la baja adherencia y posterior delaminación de las películas de CeOxNy depositadas sobre AISI 316L. Películas delgadas de CeOxNy-ZrOxNy con buena adherencia al sustrato y escasas imperfecciones, se depositaron sobre una capa buffer Ni-ZrO2 previo al depósito de la película delgada y una configuración de blanco constituida por un anillo de zirconio alrededor de un disco de cerio. La evaluación de la resistencia a la corrosión de las películas así depositadas sobre acero inoxidable AISI 316L, de acuerdo a las condiciones de depósito incrementa la resistencia a la corrosión del acero en uno o dos órdenes de magnitud, en comparación con el acero desnudo.

REFERENCIAS

Li, S.J; Lin, B.X; Yan, C.H; Zhang, Y.W. Urea-based hydrothermally derived homogeneous nanostructured Ce_{1-x}Zr_xO₂ (x = 0–0.8) solid solutions: a strong correlation between oxygen storage capacity and lattice strain. J Phys Chem B. 2004. 108, 33. 12481–12488

Alfonso J.E; Bethencourt, M; Cubillos G.I; Marco J.F; Olaya J.J. The influence of deposition temperature on microstructure and corrosion resistance of ZrOxNy/ZrO2 coatings deposited using RF sputtering. Applied Surface Science. 2014. 309. 181–187

Hu, Y; Huang, J.H; Yu, G. Structure evolution and mechanical properties of ZrN_xO_y thin film deposited on Si by magnetron sputtering. Surface & Coatings Technology. 2011. 205. 5093–5102



MODIFICACIÓN DE POLIETILENIMINA RAMIFICADA CON GOMA DE MESQUITE PARA MEJORAR SU BIOCAMPATIBILIDAD Y PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS

Ana María Pinilla Torres 1, Hugo Gallardo Blanco 2, Celia Sánchez Dominguez 3, Margarita Sánchez -Dominguez 1

1. Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C. (CIMAV, S.C.), Unidad Monterrey, Apodaca
2. Departamento de Genética, Facultad de Medicina, Universidad Autónoma de Nuevo León, Monterrey
3. Departamento de Bioquímica y Medicina Molecular, Facultad de Medicina, Universidad Autónoma de Nuevo León, Monterrey

ana.pinilla@cimav.edu.mx

PALABRAS CLAVES: Polietilenimina goma de mesquite

INTRODUCCIÓN

La polietilenimina ramificada (R-PEI) se ha utilizado ampliamente como vector de transfección. Sin embargo, su uso se ha visto limitado debido a su citotoxicidad y poca biodegradabilidad. En el presente estudio se realizó la modificación de la R-PEI usando goma de mesquite (GM) para mejorar su biocompatibilidad.

MÉTODOS

Para realizar el proceso de síntesis del copolímero (GM-CBX-PEI), se realizó la funcionalización entre la GM y la R-PEI utilizando como agentes entrecruzantes EDC /NHS. Los productos de la síntesis se caracterizaron por medio de FT-IR, XPS y TGA y se determinó la capacidad buffer por medio de curvas de titulación.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos a través de las caracterizaciones realizadas por medio de FT-IR y XPS, mostraron la presencia de las bandas asociadas al enlace amida que resulta de la funcionalización de la R-PEI y la MG. Por otro lado, a través del análisis termogravimétrico se evidenció que la GM-CBX y la GM-CBX-PEI presentaron una menor temperatura de descomposición que la GM. Finalmente, a través de la evaluación de la capacidad buffer se evidenció que el copolímero GM-CBX-PEI tiene una alta capacidad buffer en el rango de pH de 4 a 7, en comparación con el control negativo (agua). En conclusión, el copolímero sintetizado fue obtenido de manera satisfactoria, evidenciando así la formación del enlace amida, entre los grupos hidroxilo de la GM-CBX y R-PEI. Estos resultados permiten proponer este copolímero para ser utilizado como vector de transfección en terapia génica.

REFERENCIAS

- Remant Bahadur, K. C.; Uludağ, H. PEI and Its Derivatives for Gene Therapy. In *Polymers and Nanomaterials for Gene Therapy*; Elsevier, 2016; pp 29–54. <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-100520-0.00002-3>.
- Goyal, R.; Tripathi, S. K.; Tyagi, S.; Ram, K. R.; Ansari, K. M.; Kumar, P.; Shukla, Y.; Chowdhuri, D. K.; Gupta, K. C. Gellan Gum-PEI Nanocomposites as Efficient Gene Delivery Agents. *J. Biomed. Nanotechnol.* 2011, 7 (1), 38–39. <https://doi.org/10.1166/jbn.2011.1190>.
- Wen, Y.; Pan, S.; Luo, X.; Zhang, W.; Shen, Y.; Feng, M. PEG- and PDMAEG-Graft-Modified Branched PEI as Novel Gene Vector: Synthesis, Characterization and Gene Transfection. *J. Biomater. Sci. Polym. Ed.* 2010, 21 (8–9), 1103–1126. <https://doi.org/10.1163/092050609X12459295750316>.



Síntesis hidrotermal de un material compuesto a partir de desechos de yuca (Manihot esculenta Crantz), poliestireno, papel aluminio y aceite esencial derivado conchas de naranja.

Vivian Montañez Valderrama, Roiner E. Ruidiaz, José H. Quintana Mendoza, Diana Alexandra Torres Sanchez.

Grupo de Investigación Biocalorimetría, Semillero SeBioca, Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Pamplona Km 1 vía Bucaramanga.

roiner.ruidiaz@unipamplona.edu.co

PALABRAS CLAVES: Material compuesto, Residuos, biochar.

INTRODUCCIÓN

Un material compuesto comprende dominios de fases múltiples, en la que al menos un tipo de dominio es una fase continua, la fase continua es el soporte del material y la otra u otras fases se integran con el objeto de fortalecer una propiedad específica de la matriz.

MÉTODOS

Se empleó la pirólisis hidrotermal oxidativa integrando una solución de poliestireno con aceite esencial de naranja (Extraído por arrastre de vapor con microondas), harina de yuca y zeolita LTA sintetizada, la mezcla, fue sometida a tratamiento térmico para obtener el material que se caracterizó por TGA/DSC, ATR-FTIR, SEM y DRX.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

A partir de los desechos de yuca, naranja, papel aluminio y vasos de poliestireno recolectados en la plaza central La Mostazen de Pamplona, Colombia, se logró obtener un material compuesto con una morfología esférica (10um de diámetro para el biochar), con grupos funcionales fenólicos, ácidos carboxílicos, aminas terciarias, cadenas alifáticas y condensadas del tipo grafeno, al cual, se le integró cadenas de poliestireno, aceite esencial y como fase dispersa cristales cúbicos de zeolita LTA. Los resultados térmicos muestran que el material obtenido es estable a los 400°C, con una capacidad de absorción del 20%. Para los resultados estructurales, se evidenció que el biochar presenta una estructura cristalina de almidón tipo A y la fase de la zeolita LTA cúbica con buena cristalinidad, la cual, al dispersarse en la fase continua reduce su tamaño de cristalito. Lo anterior demuestra la facilidad de emplear desechos orgánicos e inorgánicos para generar nuevos materiales.

REFERENCIAS

- Zhang Chenting et al., 2020, Evolution of the functionalities and structures of biochar in pyrolysis of poplar in a wide temperature range, *Bioresource Technology*, Volume 304, 123002.
- Akhtar, A. & Sarmah, A. K. Novel biochar-concrete composites : Manufacturing , characterization and evaluation of the mechanical properties *Science of the Total Environment* Novel biochar-concrete composites : Manufacturing , characterization and evaluation of the mechanical properties. *Sci. Total Environ.* 616–617, 408–416 (2018).



FOTOOXIDACIÓN SELECTIVA DE VALENCENO Y TIMOL POR EL COMPLEJO DIOXO-MOLIBDENO^{VI}BIPYRIDINA ANCLADO EN TiO₂

Neira, J^a; Martínez, H^a; Páez-Mozo, E^a; Martínez, F^a

^aCentro de Investigaciones en Catálisis (CICAT), Parque Tecnológico Guatiguará, km 2 vía El Refugio, Piedecuesta, (Santander), 681011, Colombia.

fmartine@uis.edu.co

PALABRAS CLAVE: fotooxidación, complejos de molibdeno, Transferencia de Átomos de Oxígeno, terpenos.

INTRODUCCIÓN

La oxidación selectiva de terpenos en productos de alto valor agregado es relevante en las industrias alimentaria, farmacéutica, cosmética y agrícola. Ejemplo particular es la oxidación alílica de valenceno y timol en nootkatona (usada en aromatizantes y repelentes de garrapatas) y timoquinona (sustancias con actividad antitumoral y hepatoprotector), respectivamente.

MÉTODOS

Para la fotooxidación selectiva de valenceno y timol se usó el complejo de dioxo-dicloro (4,4'-dicarboxilato 2,2'-bipiridina) molibdeno(VI) anclado en nanotubos de dióxido de titanio (NTsTiO₂), O₂ y radiación UV-Vis. La reacción se realizó en un microreactor de cuarzo (batch) a 19 °C, presión atmosférica y acetonitrilo como disolvente durante 18 horas.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La fotooxidación de valenceno y timol permite conversiones del 50% en ambos casos. Para el valenceno, la selectividad fue del 50% hacia 1,10-epóxido de valenceno y 50% nootkatona, evidenciando la foto-TAO. Pero para el timol, la selectividad hacia timoquinona fue 95%, indicando reacción vía alílica porque no hay formación de epóxido. Para explicar la diferencia de selectividades se usó AgNO₃ para capturar electrones, obteniéndose conversiones bajas (5%) en ambos casos, indicando que se requiere foto-generación de electrones. Al usar 1,4-benzoquinona para capturar aniones radicales superóxidos, la conversión de timol disminuyó al 5%, mostrando que la formación del superóxido puede ser responsable de la formación de timoquinona. Pero para la fotooxidación de valenceno la conversión cayó al 25%. En conclusión, la fotooxidación de valenceno a nootkatona se obtiene por proceso TAO-fotoinducido. Mientras en la fotooxidación de timol, el TiO₂ es responsable de la formación de timoquinona debido al anión superóxido formado.

REFERENCES

- DeMelo,C; Moreira-Meireles,A; DaSilva,V; Robles-Azocar,P; DeFreitas-Silva,G. Manganese Complex Catalyst For Valencene Oxidation: The First Use Of Metalloporphyrins For The Selective Production Of Nootkatone. *Inorganica Chimica Acta*. 2021, 515, 120031.
- Martínez,H; Cáceres,M; Martínez,F; Páez-Mozo,E; Valange,S; Castellanos,N; Molina,D; Barrault,J; Arzoumanian,H. Photo-Epoxidation Of Cyclohexene, Cyclooctene And 1-Octene With Molecular Oxygen Catalyzed By Dichloro Dioxo-(4,4'-Dicarboxylato-2,2'-Bipyridine) Molybdenum(VI) Grafted On Mesoporous TiO₂. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*. 2016, 423, 248-255.
- Naghdi,H; Abdollahi,M; Mehrafarin,A; Ghorbanpour,M; Tolyat,M; Qaderi,A; Ghiaci,Y. An Overview on Two Valuable Natural and Bioactive Compounds, Thymol and Carvacrol, in Medicinal Plants. *Journal of Medicinal Plants*. 2017, 16, 1-32.



DESARROLLO DE UNA METODOLOGÍA PARA MAPEO DE LA PARTÍCULA DE ORO MEDIANTE MICRO FLUORESCENCIA DE RAYOS X (μ -FRX)

Ruiz, J., Gonzalez, O., Vélez, J.
Servicio Geológico Colombiano, Cali, Colombia

ogonzalezv@sgc.gov.co

PALABRAS CLAVES: oro, aluvial, traza, spot

INTRODUCCIÓN

El oro aluvial de Cértégui en el Chocó se caracteriza por presentar ferret máximos de hasta 700 μm , con coronas (tonalidades intensas) y generalmente hojelares. También por contener trazas cuya abundancia relativa determina su firma geoquímica³. La μ -FRX es una técnica elemental, no destructiva ni invasiva que permite identificar elementos mayores, menores y traza presentes en una muestra¹, resultando efectiva cuando se utiliza el método de mapeo sobre granos de oro con gran resolución, debido a que se cuenta con un tamaño de spot fino.

MÉTODO

Se realizó un estudio descriptivo de granos de oro aluvial de Cértégui, Chocó que fueron extraídos mediante “picking” y ordenados sobre moldes para fundir briquetas, realizar fotografías y observar características y pulido de las mismas. Estas briquetas se analizaron por μ -FRX en el equipo Bruker M4 Tornado Plus mediante el procedimiento de mapeo utilizando el tubo de Rodio con una potencia de 30W, un tamaño de píxel de 20 μm y un tiempo de exposición de 20 ms/píxel. Para este estudio se optó por la representación del mapa en escala de calor la cual muestra la concentración por elemento² como se ve en la fig 1. La identificación y cuantificación de los elementos presentes se basa en el análisis del espectro generado por el equipo para cada mapeo.

RESULTADOS

De acuerdo a la metodología, el oro estudiado presenta una pureza de 80.430%, con impurezas de plata de 7.320% y paladio de 10.920% como elementos mayores, Al 0.441%, Mn 0.207%, Fe 0.145%, V 0.143% como elementos menores y Zn 0.095%, Cr 0.057%, Ni 0.024%, Hg 0.036% y Cu 0.004% como elementos traza, ver fig 2. La distribución y/o zonificación de cada elemento se puede apreciar en los mapas de los granos, encontrando que el oro se concentra principalmente en el centro para la mayoría de los granos.

CONCLUSIONES

Los parámetros usados para el mapeo nos permiten imágenes de alta resolución y detalles precisos de las zonas de concentración para el elemento seleccionado, tal y como se observa en la fig 1, donde las máximas concentraciones de oro están mayormente asociadas a las zonas altas del grano debido a que son las más pulidas y se muestran más intensas hacia el centro de los granos, por otra parte, se logra identificar elementos menores de Al, Mn, Fe y V así como trazas de Zn, Cr, Ni, Hg y Cu.

REFERENCIAS

1. Tagle et al (2019). A deeper insight into materials: potentials and limitations of μ -XRF. Bruker Nano GmbH, Am Studio 2D, 12489 Berlin, Germany
2. Liu, H., & Beaudoin, G. (2021). Geochemical signatures in native gold derived from Au-bearing ore deposits. *Ore Geology Reviews*, 132(February), 104066. <https://doi.org/10.1016/j.oregeorev.2021.104066>
3. Velasquez, A. (2014). Trace element analysis of native gold by laser ablation ICP-MS: A case study in greenstone-hosted quartz-carbonate vein ore deposits, Timmins, Ontario. The University of British Columbia. Okanagan, Canadá



QUÍMICA ORGÁNICA

SLCCL-8

PLATOS BIODEGRADABLES A BASE DE NOPAL.

Martha Vázquez Briones, Maria del Carmen Vázquez Briones, Moisés Mata García, Beda Luz Caporal Sayavedra, Eric Ceballos Palmeros, Jazmín Itzel Pacheco López.

Universidad Tecnológica del Sureste de Veracruz.

marthavaz.bri@hotmail.com

PALABRAS CLAVES: Contaminación, biodegradación, nopal, chia.

INTRODUCCIÓN

Los nopales son originarios de América tropical y subtropical, en la actualidad se puede encontrar en una gran variedad en todo el continente americano.

En el género *Opuntia* se clasifican 377 especies, todas endémicas del continente americano de las cuales México cuenta con 104 silvestres y 60 endémicas.

MÉTODOS

El nopal pasa por procesos de lavado, licuado y filtrado, la mezcla se somete a baño maría durante min a una temperatura de °C, posteriormente dejar enfriar. Crear otra mezcla licuando, semillas de chía y cartón de huevo, unir ambas mezclas hasta homogeneizar, secar durante 3 h a °C.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos fueron un pH de entre 8 y 9 aproximadamente de las soluciones formuladoras de platos, del análisis sensorial se contó con un 74% en aceptación, los platos resultaron ser biodegradables a la semana cuatro. Los resultados obtenidos demostraron que el mucilago de nopal puede ser utilizado como materia prima para la elaboración de los platos y vasos de desechable sustituyendo a los plásticos convencionales, y por sus propiedades biodegradables podríamos contribuir a remediar los daños que han causado el uso excesivo de plásticos desechables.

REFERENCIAS

GREENPEACE. (2017). Datos sobre la producción de plásticos. Obtenido de <https://es.greenpeace.org/es/trabajamos-en/consumismo/plasticos/datos-sobre-la-produccion-de-plasticos/>

Jiménez, B. (2001). *La Contaminación Ambiental en México*. México: Limusa.

Santillán, L. (27 de Julio de 2018). *Ciencia UNAM*. Obtenido de <http://ciencia.unam.mx/leer/766/una-vida-de-plastico>



SÍNTESIS DE ALCALOIDES AZA-BICÍCLICOS POR ACTIVACIÓN DE IMIDAS

Yovanny Quevedo-Acosta,^{1,2} Igor Días-Jurberg² y Diego Gamba-Sánchez¹

¹Laboratorio de Síntesis Orgánica Bio y Organocatálisis, Departamento de Química, Universidad de los Andes, Cra 1. No. 18^a-12, Bogotá D.C, Colombia.

²Instituto de Química, Universidad Estadual de Campinas, Rua Monteiro Lobato 270, Campinas, SP, Brasil.

da.gamba1361@uniandes.edu.co

PALABRAS CLAVES : Síntesis Total, Alcaloides, Anulación aza-Robinson

INTRODUCCION

Los alcaloides aza-bicíclicos hacen parte de los metabolitos secundarios de mayor importancia a causa de su reconocida actividad.[1] En este trabajo, se presenta una estrategia que permite acceder a estos sistemas a partir de imidas cíclicas y compuestos carbonílicos a través de una reacción de aldolización intramolecular.[2]

MÉTODOS

Los sustratos necesarios para el estudio de la reacción de ciclación fueron preparados a través de adiciones de Michael sobre metilvinocetona o una secuencia Mitsunobu/ Ozonólisis/ Protección. La reacción de ciclación se realizó en tolueno a 90 °C.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se encontró que la reacción de ciclación intramolecular procede con eficiencia cuando se emplean cetonas y aldehídos en como acetal. A través de esta metodología fue posible completar la síntesis total de (±) Coniceina, (±) Tashiromina, (±) Epilupinina, en la síntesis del sistema cíclico de las Valmerinas y la síntesis total de Magallanesina.

REFERENCIAS

1. Seigler, D. S. Plant Secondary Metabolism. 1998; p 506.
2. Quevedo-Acosta, Y.; Jurberg, I. D.; Gamba-Sánchez, D., Activating Imides with Triflic Acid: A General Intramolecular Aldol Condensation Strategy Toward Indolizidine, Quinolizidine, and Valmerin Alkaloids. Organic Letters 2020, 22 (1), 239-243.



SLCCL-121

SISTEMA PIRAZOLO[1,5-A]PIRIMIDÍNICO: UN FLUORÓFORO EMERGENTE PARA APLICACIONES FOTOFÍSICAS

Alexis Tigreros, Jaime Portilla

Universidad de Los Andes

a.tigreros@uniandes.edu.co**PALABRAS CLAVE:** pirazolo[1,5-a]pirimidinas, emisión, cianuro, etanol.

INTRODUCCIÓN

Varios derivados de pirazolo[1,5-a]pirimidina han emergido como fluoróforos funcionales debido a que su versatilidad sintética y excepcionales propiedades ópticas favorecen su aplicación para detectar sustancias de interés como cianuro y etanol. Aquí se presentan los resultados exploratorios de las aplicaciones de estos compuestos en quimiosensores.

MÉTODOS

La síntesis y funcionalización de las pirazolo[1,5-a]pirimidinas se llevó a cabo utilizando procedimientos conocidos y desarrollados en nuestro grupo,^{2,3} mientras que las propiedades fotofísicas y los estudios de detección, se realizaron de acuerdo con protocolos reportados en literatura (concentraciones 5-20 μ M, disolventes grado UV-Vis, etc.).^{1,3}

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

De acuerdo con los resultados de nuestras investigaciones, las pirazolo[1,5-a]pirimidinas adecuadamente funcionalizadas permiten detectar selectivamente, y a concentraciones muy bajas, iones de interés como el cianuro. Además, el interesante solvatofluorocromismo que exhiben ciertos derivados de este pirazol fusionado, permite la detección de trazas de agua en disolventes orgánicos y la cuantificación de etanol en bebidas alcohólicas, esto último gracias a una extracción líquido-líquido. Cabe señalar que a diferencia de los fluoróforos tradicionales, las propiedades ópticas de esta familia de compuestos se pueden modular de acuerdo con el patrón de sustitución y tipo de sustituyente en su periferia, como resultado, se pueden diseñar compuestos que emiten en disolución o en estado sólido con altos rendimientos cuánticos de fluorescencia y buenas propiedades de solubilidad.

REFERENCIAS

1. Tigreros, A., Aranzazu, S.-L., Bravo, N.-F., Zapata-Rivera, J. & Portilla, J. Pyrazolo[1,5-a]pyrimidines-based fluorophores: A comprehensive theoretical-experimental study. *RSC Adv.* 2020, 10, 39542–39552.
2. Castillo, J.-C.; Rosero, H.-A.; Portilla, J. Simple Access toward 3-Halo- and 3-Nitro-Pyrazolo[1,5-a]pyrimidines through a One-Pot Sequence. *RSC Adv.* 2017, 7 (45), 28483–28488.
3. J.-C. Castillo, A. Tigreros and J. Portilla, 3-Formylpyrazolo[1,5-a]pyrimidines as Key Intermediates for the Preparation of Functional Fluorophores. *J. Org. Chem.* 2018, 83, 10887–10897.



SÍNTESIS Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIFÚNGICA PARA DERIVADOS DE 2-(N-AZOLIL)-1-(4-PIRAZOLIL)ETANOL

Sandra Lorena Aranzazu Giraldo, Jaime Antonio Portilla Salinas

Universidad de los Andes

sl.aranzazu@uniandes.edu.co

PALABRAS CLAVES: Azoles, actividad antifúngica, 2-(N-azolil)-1-(4-pirazolil)etanol

INTRODUCCIÓN

Anualmente 1.6 millones de personas mueren por infecciones fúngicas. Uno de los tratamientos más eficientes para este tipo de infecciones se basa en azoles antifúngicos, que son compuestos aza-heterocíclicos que han demostrado ser efectivos contra un amplio rango de hongos patógenos. Sin embargo, estos tratamientos han disminuido su efectividad.

MÉTODOS

La síntesis de 2-(N-azolil)-1-pirazoliletanol se llevó a cabo en 5 pasos de reacción. Con este método se obtuvieron precursores interesantes como pirazonas, 4-formilpirazoles, 4-vinilpirazoles y 4-oxiranpirazoles, así como los productos finales 2-(N-azolil)-1-pirazoliletanol. Todos estos compuestos fueron caracterizados y sometidos a pruebas de actividad antifúngica.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Mediante 5 etapas de reacción se obtuvieron 12 nuevos derivados de 2-(1H-azolil)-1-pirazoliletanol con rendimientos de moderados a buenos. Posteriormente, se evaluó su actividad antifúngica frente a *Cryptococcus neoformans* y *Aspergillus fumigatus* utilizando econazol y anfotericina B como patrones. Finalmente, su relación con la presencia de grupos de diversa naturaleza electrónica fue estudiada y como era de esperarse, los compuestos mayormente halogenados presentaron resultados muy interesantes.

REFERENCIAS

1. Cortes, J.C.G.; Curto, M.A.; Carvalho, V.S.D.; Perez, P.; Ribas, J.C. *Biotechnol Adv.* 2019, 37, 107352.
2. Berger, S.; El Chazli, Y.; Babu, A. F.; Coste, A. T. *Front Microbiol* 2017, 8, 1-6.
3. Emami, S.; Ghobadi, E.; Saednia, S.; Hashemi, S. M. *Eur J Med Chem* 2019, 170, 173-194.



Síntesis de alcaloides Aza-Bicíclicos por activación electrofílica de imidas

Yovanny Quevedo-Acosta 1, Igor D. Jurberg², Diego Gamba-Sánchez 3

1. Universidad de los Andes - Unicamp
2. Unicamp
3. Universidad de los Andes

ey.quevedo10@uniandes.edu.co

PALABRAS CLAVES: Síntesis-Total, Alcaloides, Anulación aza-Robinson

INTRODUCCIÓN

Los alcaloides izidínicos pertenecen a los metabolitos secundarios de mayor importancia a causa de su reconocida actividad biológica, entre ellas se cuenta antitumoral, antibacterial, antifúngica, antiviral, entre otras.[1] En este trabajo, se presenta una estrategia que permite acceder a estos sistemas a partir de imidas cíclicas y aldehídos o cetonas.[2]

MÉTODOS

Los sustratos necesarios para el estudio de la reacción de ciclación fueron preparados a través de adiciones de Michael sobre metilvinilcetona o sustituciones sencillas. La reacción de ciclación se realizó en tolueno a 90 °C en presencia de ácido trifílico.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se encontró que la reacción de ciclación intramolecular procede con eficiencia cuando se emplean cetonas y aldehídos protegidos en forma de acetal. A través de esta metodología fue posible completar la síntesis total de (±)-Coniceína, Quinolizidina, (±)-Tashiromina y (±)-Epilupinina, además de la construcción del sistema cíclico de metabolitos no izidínicos como las Valmerinas y Magallanesina.

REFERENCIAS

1. Michael, J. P., Simple indolizidine and quinolizidine alkaloids. In *The alkaloids: chemistry and biology*, Elsevier: 2016; Vol. 75, 1-498.
2. Quevedo-Acosta, Y.; Jurberg, I. D.; Gamba-Sánchez, D., Activating Imides with Triflic Acid: A General Intramolecular Aldol Condensation Strategy Toward Indolizidine, Quinolizidine, and Valmerin Alkaloids. *Organic Letters* 2020, 22 (1), 239-243.



SLCCL-166

N-ALQUILACIÓN DE 3-CIANO-2(1H)-PIRIDONAS: SÍNTESIS REGIOSELECTIVA Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTITUMORAL

Kevin Salamanca Perdigón,¹ Hugo Rojas Sarmiento,¹ Jaime Portilla Salinas,² Diana Becerra Córdoba,^{1*} Juan Castillo Millán.^{1,2*}

¹Grupo de Catálisis de la UPTC, Escuela de Ciencias Química, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia.

²Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos, Departamento de Química, Universidad de los Andes, Bogotá D. C., Colombia.

diana.becerra08@uptc.edu.co, juan.castillo06@uptc.edu.co

PALABRAS CLAVE: 2(1H)-Piridona, regioselectividad, N-alquilación, cáncer.

INTRODUCCIÓN

El núcleo de 2(1H)-piridona está presente en medicamentos comercialmente disponibles utilizados en el tratamiento de la insuficiencia cardíaca, antibióticos y antiepilépticos [1-3]. Por este motivo, se plantea la síntesis de 3-ciano-2(1H)-piridonas y su N-alquilación regioselectiva mediada por Cs_2CO_3 , así como la evaluación de la actividad antitumoral in vitro.

MÉTODOS

Una mezcla de 3-ciano-2(1H)-piridona 3, haluro de alquilo 4 y Cs_2CO_3 en dimetilsulfóxido se agitó a temperatura ambiente por 24 horas. Posteriormente, se efectuó una extracción, evaporación del disolvente a presión reducida y purificación del crudo de reacción por cromatografía flash para obtener los productos 5 y 6.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La condensación Guareschi-Thorpe catalizada por piperidina entre compuestos 1,3-dicarbonílicos 1a-c y cianoacetamida 2 generó las 3-ciano-2(1H)-piridonas 3a-c en buenos rendimientos (Esquema 1). Posteriormente, la alquilación regioselectiva de 3-ciano-2(1H)-piridonas 3a-b con haluros de alquilo 4 en presencia de Cs_2CO_3 generó las 2-piridonas N-alquiladas 5a-i (35-79%) y 2-hidroxipiridinas O-alquiladas 6a-i (16-60%) como subproductos. Sin embargo, la 2(1H)-piridona 3c ($\text{R}_1 = \text{R}_2 = \text{Ph}$) condujo mayoritariamente al producto O-alquilado 6j (81%) en lugar del N alquilado 5j (13%). Todos los productos fueron seleccionados por el National Cancer Institute (U.S.A) para una evaluación in vitro frente a 60 líneas celulares a una dosis única de 10 μM . En conclusión, la 2-piridona N-alquilada 5d ($\text{R}_1 = \text{R}_2 = \text{Me}$, $\text{R}_3 = 3,5$ -di-tert-butilfenilo) presentó la mejor actividad en las líneas UACC-62 (melanoma), MOLT-4 (leucemia) y PC-3 (cáncer de próstata) con una inhibición de crecimiento del 27.2%, 23.4% y 21.0%, respectivamente.

REFERENCIAS

[1] Abadi, A. H.; Abouel-Ella, D. A.; Lehmann, J.; Tinsley, H. N.; Gary, B. D.; Piazza, G. A.; Abdel-Fattah, M. A. O. *Eur. J. Med. Chem.* 2010, 45, 90-97.

[2] Yang, X.; Li, F.; Konze, K. D.; Meslamani, J.; Ma, A.; Brown, P. J.; Zhou, M.-M.; Arrowsmith, C. H.; Kaniskan, H. U.; Vedadi, M.; Jin, J. J. *Med. Chem.* 2016, 59, 7617-7633. [3] Castillo, J.-C.; Quiroga, J.; Rodriguez, J.; Coquerel, Y. *Eur. J. Org. Chem.* 2016, 1994-1999.



SLCCL-175

AMIDACIÓN DIRECTA DE ÁCIDOS CARBOXÍLICOS NO ACTIVADOS CON AMINAS

Angélica Salinas Torres¹, Hugo Rojas Sarmiento¹, José Martínez Zambrano¹, Jaime Portilla Salinas², Diana Becerra Córdoba^{1,*} y Juan Castillo Millán^{1,2,*}

¹ Grupo de Catálisis de la UPTC, Escuela de Ciencias Química, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja 150003, Colombia.

² Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos, Departamento de Química, Universidad de los Andes, Bogotá D. C., Colombia.

Autores de correspondencia: diana.becerra08@uptc.edu.co, juan.castillo06@uptc.edu.co

PALABRAS CLAVE: Amina, ácido carboxílico, amidación

INTRODUCCIÓN

El desarrollo de nuevas y eficientes metodologías para la obtención de amidas con una alta economía atómica es de gran interés para la industria farmacéutica y la química medicinal [1-4]. Por este motivo, se plantea la amidación directa de ácidos carboxílicos no activados con aminas empleando una catálisis heterogénea.

MÉTODOS

Una mezcla del ácido carboxílico 1, amina 2 y cloruro de niobio (V) en tolueno se calentó a 110°C por 12–24 horas. Posteriormente, se efectuó una filtración, evaporación del disolvente a presión reducida y purificación del crudo de reacción por cromatografía flash para obtener la amida 3.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Inicialmente, se estudiaron las condiciones óptimas de la reacción de amidación directa catalizada por un ácido de Lewis. Posteriormente, el protocolo se extendió con éxito a la amidación directa de ácidos alifáticos de cadena larga, aromáticos y (hetero)aromáticos 1a–h con aminas alifáticas y (hetero)aromáticas 2a–f en tolueno como disolvente y cloruro de niobio (V) como catalizador a 110°C por 12–24 h, obteniéndose las amidas 3a–n en buenos a excelentes rendimientos (56–98%) (Esquema 1). En conclusión, se desarrolló un nuevo y eficiente protocolo de amidación directa que presenta importantes ventajas frente a las metodologías ya reportadas, tales como (a) la utilización de un catalizador de baja toxicidad y comercialmente disponible, (b) el alcance del ácido carboxílico y la amina es muy amplio, (c) no se requiere de una atmósfera inerte y condiciones anhidras y (d) el agua es el único subproducto de la reacción.

REFERENCIAS

- [1] Pattabiraman, V. R.; Bode, J. W. *Nature* 2011, 480, 471–479.
- [2] Ojeda-Porras, A.; Gamba-Sánchez, D. J. *Org. Chem.* 2016, 81, 11548–11555.
- [3] Krause, T.; Baader, S.; Erb, B.; Gooßen, L. J. *Nat. Commun.* 2016, 7, 11732–11739.
- [4] Moreno-Fuquen, R. M.; Hincapié-Otero, M. M.; Becerra, D.; Castillo, J.-C.; Portilla, J.; Macías, M. A. *J. Mol. Struct.* 2021, 1226, 129317.



HÍBRIDOS MOLECULARES INSPIRADOS EN RIVASTIGMINA Y ÁCIDOS CINÁMICOS COMO POTENCIALES AGENTES MULTITARGET CONTRA LA ENFERMEDAD DE ALZHEIMER: DISEÑO, SÍNTESIS Y EVALUACIÓN BIOLÓGICA.

Marlyn Rada¹, Wilson Cardona¹, Karina Sierra², Edison Osorio², Luis Alfonso Gonzales Molina³, Rafael Posada Duque³, Andrés Yepes¹

1. Grupo de Química de Plantas Colombianas, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia
2. Grupo de Investigación en Sustancias Bioactivas, Facultad de Ciencias Farmacéuticas y Alimentarias Universidad de Antioquia
3. Área de Neurobiología Celular y molecular, Grupo de Neurociencias de Antioquia. Universidad de Antioquia

marlyn.rada@udea.edu.co

PALABRAS CLAVES: alzheimer, compuestos híbridos, síntesis

INTRODUCCIÓN

Debido al alto impacto social y económico de la enfermedad de Alzheimer, el desarrollo de nuevos fármacos para su tratamiento ha adquirido una gran relevancia en los últimos años. El diseño de potenciales fármacos requiere considerar el carácter multifactorial que exhibe esta patología.

MÉTODOS

Síntesis de siete compuestos utilizando reacciones clásicas en una estrategia convergente. Evaluación de la capacidad inhibitoria en enzimas colinesterasas, método de Ellman. Evaluación capacidad antioxidante por las metodologías ORAC y FRAP y determinación de ROS. Evaluación de la neurotoxicidad y capacidad neuroprotectora de LDH en neuronas corticales de ratas Wistar.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se sintetizaron siete nuevos compuestos híbridos inspirados en el farmacóforo del medicamento rivastigmina y en la estructura de los ácidos cinámicos, utilizando metodologías clásicas. Se realizó la caracterización de los nuevos híbridos por ¹H-NMR, ¹³C-NMR y espectrometría de masas. Se determinó la capacidad inhibitoria sobre colinesterasas por el método de Ellman, encontrando que los compuestos presentaban actividad selectiva sobre butirilcolinesterasa. Se determinó la capacidad antioxidante de los compuestos por las metodologías FRAP y ORAC, encontrando actividades superiores o comparables con la referencia (Trolox). Se determinó la concentración citotóxica en neuronas. Ésta concentración se utilizó para orientar el ensayo de neuroprotección, donde se encontró que algunos compuestos de la serie presentaban actividad neuroprotectora en procesos de estrés celular mediados por glutamato y estrés celular en presencia de ROS.

Se concluye que a nivel in-vitro los compuestos obtenidos poseen potencial multitarget frente a blancos relacionados con la enfermedad de Alzheimer.

REFERENCIAS

Zhang X., et al., A review on the hybrids of hydrox.cinnamic acid as multi-target-directed ligands against Alzheimer's disease. *Bioorganic & Medicinal chemistry*, Vol. 26, Issue 3, 2018, 543-550.

Simone C., Días T., Viegas C., "Multi-Target Directed Drugs: A Modern Approach for Design of New Drugs for the treatment of Alzheimer's Disease", *Current Neuropharmacology* (2014) 12: 239.

Zheng H, Amit T, Bar-Am O, Fridkin M, Youdim MB, Mandel SA. From anti-Parkinson's drug rasagiline to novel multitarget iron chelators with acetylcholinesterase and monoamine oxidase inhibitory and neuroprotective properties for Alzheimer's disease. *J Alzheimers Dis*. 2012; 30(1):1-16.



SÍNTESIS DE CHALCONAS HÍBRIDAS Y SU POTENCIAL APLICACIÓN COMO INHIBIDORES DE CORROSIÓN

Carlos Andrés Coy-Barrera*, Inti Monge, Tatiana Bolaños, Diego Cárdenas, Diego Quiroga
Universidad Militar Nueva
Granada

carlos.coy@unimilitar.edu.co

PALABRAS CLAVES: Reacción de Claisen-Schmidt, chalcona, espectroscopía de impedancia, polarización, corrosión, índice de Fukui, HOMO-LUMO gap.

INTRODUCCIÓN

Los compuestos de tipo chalcona son moléculas atractivas para el desarrollo de nuevos materiales. Recientemente, se investiga su uso como inhibidor de la corrosión del acero empleando técnicas como la polarización potenciodinámica (PDP) y la espectroscopia de impedancia electroquímica (EIS) (1), a través de su adhesión sobre superficies en acero (2)(3).

MÉTODOS

Las chalconas de interés se sintetizaron empleando la reacción de Claisen-Schmidt (Esquema 1) con dos formas de calentamiento. Posteriormente, se realizaron cálculos computacionales para determinar la energía total, el índice de Fukui y el HOMO-LUMO gap. El efecto anticorrosivo se evaluó sobre piezas en acero en ácido clorhídrico al 1,0M.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La síntesis de las chalconas 2b, 2g, 2i, 2o y 2p se realizó a temperatura ambiente, y sus porcentajes de rendimiento fueron considerablemente mejor comparado con el método por irradiación de microondas. Además, el análisis de los descriptores calculados permitió concluir que los átomos más propensos a sufrir reacciones polares corresponden a los carbonos en el anillo aromático derivado de acetofenona. Por otro lado, la chalcona 2k mostró el menor valor de HOMO-LUMO gap, lo que sugiere una alta capacidad de absorción de radiación electromagnética, explicada por la presencia de un sistema pi extendido altamente conjugado. Las chalconas 2o y 2p, mostraron los mayores valores de HOMO-LUMO gap, podrían sufrir ataque radicalario en los átomos de carbono del sistema heterocíclico, según los valores de índices de Fukui. Por último, solamente las chalconas 2d, 2k y 2o presentaron una disminución de la corrosión en los análisis por PDP y por EIS.

REFERENCIAS

1. Kumar, B.; Vashisht, H.; Goyal, M.; Kumar, A.; Benhiba, F.; Prasad, A.K.; Kumar, S.; Bahadur, I.; Zarrouk, A. Study of adsorption mechanism of chalcone derivatives on mild steel-sulfuric acid interface (2020), *Journal of Molecular Liquids*, 318, 113890.
2. Slobodinyuk, D.G.; Shklyayeva, E.V.; Abashev, G.G. Electrochemical oxidation of asymmetric chalcones containing two terminal electroactive moieties (2020), *Journal of Applied Electrochemistry*, 50, 7, 757-766.
3. Messaoudi, I.; Aribi, I.; Zaaboub, Z.; Ayachi, S.; Othman, M.; Said, A.H. Electrosynthesis and characterization of a new semi-conducting oligomer deriving from a disubstituted chalcone: 4-dimethylamino-4'-methoxychalcone (2021), *Journal of Molecular Structure*, 1231, 129810.



SÍNTESIS DE 3-HIDROXI-2,3-DIHIROBENZO[b]FURANOS ANÁLOGOS DE COMBRETASTATINA A-4 CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTITUMORAL

Cristian Tocancipá Manrique¹, Hugo Rojas Sarmiento¹, Jaime Portilla Salinas², Juan Castillo Millán^{1,2,*} y Diana Becerra Córdoba^{1,*}

¹Grupo de Catálisis de la UPTC, Escuela de Ciencias Química, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja 150003, Colombia.

²Grupo de Investigación en Compuestos Bio-orgánicos, Departamento de Química, Universidad de los Andes, Bogotá D. C., Colombia.

Autores de correspondencia: juan.castillo06@uptc.edu.co, diana.becerra08@uptc.edu.co

PALABRAS CLAVE: 3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[b]furano, aldeos, condensación Rap-Stoermer.

INTRODUCCIÓN

Diversos benzo[b]furanos análogos de Combretastatina A-4 (CA-4) han mostrado interesantes resultados de inhibición de tubulina y actividad antiproliferativa [1-4]. Sin embargo, no existen reportes de actividad citotóxica de los derivados 3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[b]furánicos dada su rápida deshidratación hacia benzo[b]furanos. Por ello, se plantea la síntesis de nuevos 3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[b]furanos y sus correspondientes benzo[b]furanos.

MÉTODOS

Los 3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[b]furanos **3** se obtuvieron desde 2-hidroxibenzoil derivados **1** y compuestos α bromocarbonílicos **2** en presencia de DBU como base y acetona como disolvente bajo agitación a temperatura ambiente por 8 h. Los benzo[b]furanos **4** se obtuvieron con Cs₂CO₃ como base y acetona como disolvente a reflujo por 8 h.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La síntesis de 3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[b]furanos **3** y benzo[b]furanos **4** se realizó empleando una condensación de Rap-Stoermer mediada por base entre 2-hidroxibenzoil derivados **1** y compuestos α bromocarbonílicos **2** (Esquema 1). Para la síntesis de 3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[b]furanos **3** se empleó DBU como base, con rendimientos entre moderados a buenos (18-74%) y con relación diastereomérica (1.0:1.6- 1:0:4.0). Por otra parte, la síntesis de los benzo[b]furanos **4** se realizó empleando Cs₂CO₃ como base con rendimientos de buenos a excelentes (74-96%). Los protocolos empleados muestran alta conversión, selectividad y tiempos de reacción cortos. Cabe destacar que el fragmento 1,2,3-trimetoxibencénico de la Combretastatina A-4 (CA-4) también fue incorporado en el diseño sintético de los benzo[b]furanos para potenciar la bioactividad. Los 3-hidroxi-2,3-dihidrobenzo[b]furanos **3** y 2-benzoilbenzo[b]furanos **4** sintetizados fueron seleccionados para estudios de actividad antitumoral in vitro frente a 60 líneas celulares tumorales humanas a una dosis (10 μ M) en el National Cancer Institute (NCI) de los Estados Unidos.

REFERENCIAS

- [1] Romagnoli, R.; Baraldi, P.; Lopez-Cara, C.; Lopez, O.; Carrion, M.; Kimatrai, M.; Bermejo, J.; Estévez, S.; Estévez, F.; Balzarini, J.; Brancale, A.; Ricci, A.; Chen, L.; Kim, J.; Hamel, E. *ChemMedChem* 2011, 6, 1841–1853.
- [2] Gao, H.; Zhang, X.; Pu, X.-J.; Zheng, X.; Liu, B.; Rao, G.-X.; Wan, C.-H.; Mao, Z.-W. *Bioorg. Med. Chem. Lett.* 2019, 29, 806–810
- [3] Bazin, M. A.; Boder, L.; Tomasoni, C.; Rousseau, B.; Roussakis, C.; Marchand, P. *Eur. J. Med. Chem.* 2013, 69, 823–832.
- [4] Becerra, D.; Raimondi, W.; Dauzonne, D.; Constantieux, T.; Bonne, D.; Rodriguez, J. *Synthesis* 2017, 49, 195–201.



RUTAS ALTERNATIVAS PARA LA SÍNTESIS DEL PRECURSOR DE ANÁLOGOS DE BRASINOESTEROIDES (20S)-6-OXO-5 α -PREGN-2-ENO-20-CARBOXILATO DE METILO

María Nuñez Gutierrez maria.nunezg@sansano.usm.cl, Luis Espinoza Catalán luis.espinozac@usm.cl, Cesar González cesar.gonzalez@usm.cl, Paula Droguett paula.droguettp@usmcl.onmicrosoft.com, Departamento de Química, Universidad Federico Santa María. Avda. España 1680, Valparaíso-Chile.

PALABRAS CLAVES: Síntesis, Brasinoesteroides, Espectroscopía.

INTRODUCCIÓN

Los Brasinoesteroides (BRs) son un grupo de hormonas encargadas de controlar el crecimiento y desarrollo vegetal. La dificultad de síntesis y alto costos de estas moléculas ha impulsado la búsqueda de análogos con eficacia sobre la promoción de crecimiento vegetal superior o similar a los compuestos de origen natural [1].

MÉTODOS

Se presentan dos rutas para sintetizar el precursor de análogos de BRS (20S)-6-Oxo-5 α -Pregn-2-eno 20-carboxilato de metilo partiendo del Ácido 3 β -acetil-23,24-Bisnor-5-cólenico el cual es transformado para introducir funciones oxigenadas en C6 del anillo B y posterior eliminación entre C2-C3 del anillo A en el esteroide. Se incluye caracterización espectroscópica de los compuestos.

RESULTADOS Y CONCLUSIÓN

Luego de someter el ácido de partida a una reacción de metilación con diazometano se realizan dos rutas alternativas para obtener el (20S)-6-Oxo-5 α -Pregn-2-eno-20-carboxilato de metilo. La primera consistió en una saponificación selectiva en C3 del anillo A y posterior tosilación del mismo grupo, seguida de la introducción de funciones oxigenadas en el anillo B mediante una reacción de adición al alqueno entre C5-C6 y posterior oxidación del alcohol, culminando con una reacción de eliminación entre C2-C3 para dar el compuesto deseado [2]. La segunda ruta consistió en una epoxidación del alqueno entre C5-C6 seguido de la apertura de epóxido en medio ácido y luego una oxidación de la bromohidrina, continuando con una reducción sobre C5 y una saponificación selectiva en el acetilo en C3, finalizando con una reacción de eliminación para obtener el compuesto deseado [3-4]. Todos los compuestos fueron caracterizados por técnicas espectroscópicas de IR y RMN 1D y 2D.

REFERENCIAS

1. L. Kohout, H. Chodoundká, T. Macek, and M. Strnad. *Steroids*, 2000, 65: 1754–1761.
2. M. Iglesias, E. Símuta, S. Xochihua, O. Viñas, S. Montiel, S. Meza, and J. Sandoval. *J. Mex. Chem. Soc.*, 2005, 49: 143-147.
3. Duran, M.; González, C.; Acosta, A.; Olea, A.; Katy, D.; and Espinoza, L.; Synthesis of Five Known Brassinosteroid Analogs from Hyodeoxycholic Acid and Their Activities as Plant-Growth Regulators, *Int. J. Mol. Sci.*, 2017, 18, 516.



OBTENCIÓN DE ALIL-FENOLES ASISTIDO POR MICROONDAS

Manuel Diaz, Lautaro Taborga, Susana Restrepo, Ligia Llovera.
Universidad Técnica Federico Santa María

PALABRAS CLAVE: Friedel-Crafts, síntesis, microondas, alilfenol

INTRODUCCIÓN

Dentro de las causas de pérdida en la producción frutícola se encuentran como responsables las plagas (1). El control de plagas se realiza con pesticidas, y está limitado por la toxicidad y la resistencia (2). Buscando nuevas alternativas (3) seguras y eficaces para el control de plagas se sintetizaron una serie de alil-fenoles.

MÉTODOS

La síntesis se llevó a cabo usando como reactivos el 2-alil-alcohol y el polifenol correspondiente disueltos en acetonitrilo y BF₃ como catalizador. La reacción de Friedel-Crafts fue asistida por microondas usando distintas condiciones de temperatura y tiempo. Finalmente, los compuestos se purificaron mediante cromatografía Flash y fueron identificados por RMN.

RESULTADOS Y CONCLUSIÓN

Recientemente logramos sintetizar el compuesto 2-alil-floroglucinol a través de la reacción de acoplamiento de Friedel-Crafts, acelerada por el reactor de microondas. Para esto realizamos una serie de 9 experimentos a distintas temperaturas (80-160 °C) y tiempo (15-60 min), observamos que las condiciones menos energéticas (80 °C y 15 min) producían el compuesto esperado (Rendimiento 10%). Mientras que en las otras condiciones de reacción predominaba la formación de productos secundarios como el 5-(aliloxi)-1,3-bencenodiol, al acoplarse la cadena alílica a uno de los grupos hidroxilo del floroglucinol. Purificamos el 2-alil-floroglucinol de la mezcla de reacción aplicando cromatografía Flash preparativa, usando un cartucho desechable de sílica y gradiente de hexano/acetato de etilo, elucidamos su estructura por resonancia magnética nuclear. Esperamos aplicar el mismo procedimiento experimental para sintetizar los otros 10 alil-fenoles, además de hidratar los alil-fenoles sintetizados. Finalmente evaluaremos la actividad inhibitoria contra *B. cinerea* y *P. cinnamomi* de todos los compuestos sintetizados.

REFERENCIAS

- (1) Scholthof, K.-B. G. An Introduction to Arthropod Pest Control. *Agric. Hist.* 2003, 77 (4), 623–626. <https://doi.org/10.1525/ah.2003.77.4.623.2>.
- (2) Williamson, B.; Tudzynski, B.; Tudzynski, P.; Van Kan, J. A. L. *Botrytis Cinerea: The Cause of Grey Mould Disease.* *Mol. Plant Pathol.* 2007, 8 (5), 561–580. <https://doi.org/10.1111/j.1364-3703.2007.00417.x>.
- (3) Qu, T.; Gao, S.; Li, J.; Hao, J. J.; Ji, P. Synthesis and Antifungal Activity of 2-Allylphenol Derivatives against Fungal Plant Pathogens. *Pestic. Biochem. Physiol.* 2017, 135, 47–51. <https://doi.org/10.1016/j.pestbp.2016.06.006>.



SLCCL-340

EVIDENCIA DE QUIRALIDAD PUNTUAL DEPOSITADA EN NITRÓGENO NO CUATERNIZADO EN SISTEMAS HETEROCÍCLICOS DE TIPO N-ALQUIL-ESPIRO[CICLOHEXANO-1,4-PIRAZOLO][1,4]TIAZEPINONICOS.

Christian Becerra Rivas, Fabian Orozco Lopez, Paola Cuervo Prado

Universidad Nacional de Colombia.

chabecerrari@unal.edu.co

PALABRAS CLAVES: Espirociclos, restricción conformacional, tiazepinonas.

INTRODUCCIÓN

La quiralidad sobre nitrógeno se observa usualmente en especies cuaternarias de amonio o en compuestos restringidos conformacionalmente como las aziridinas y las bases de Tröger. En este trabajo se presentará la síntesis y estudios espectroscópicos de 5 derivados pirazolotiazepinónicos que resultan un nuevo ejemplo de quiralidad tipo base de Tröger.

MÉTODOS

La síntesis de los compuestos de interés se llevó a cabo a través de una estrategia a dos pasos. Iniciando con una ciclocondensación tricompente, seguida por una reacción S_N2 para obtener los productos (5), que fueron caracterizados mediante RMN lo que reveló la quiralidad sobre el nitrógeno lactámico de estos compuestos.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se realizó la derivatización del sistema tiazepinónico de una espiro[ciclohexano-1,4-pirazolo][1,4]tiazepinona (4) que fue sintetizada mediante una estrategia multicomponente. A partir de esta, se realizó la monoalquilación del nitrógeno mediante una reacción S_N2 inducida por base, para tal fin se emplearon diversos halogenuros de alquilo. En los espectros de ¹H-RMN se observaron desdoblamientos típicos de protones quirotópicos en posiciones cercanas al nuevo centro quiral formado y mediante experimentos bidimensionales se descartó la formación de isómeros de posición que pudieran dar lugar a la aparición de señales diastereotópicas como las observadas y por tanto, se logró corroborar una estructura asimétrica debido al impedimento presente durante la inversión de Walden del par electrónico del nitrógeno lactámico.

REFERENCIAS

- Michon, C.; Goncalves-Farbos, M.H., Lacour, J. NMR enantiodifferentiation of quaternary ammonium salts of Tröger base. *Chirality* 2014, 21, 809 – 817.
- Becerra-Rivas C.; Cuervo-Prado, P.; Orozco-Lopez, F. Efficient catalyst-free tricomponent synthesis of new spiro[cyclohexane-1,4'-pyrazolo[3,4-e][1,4]thiazepin]-7'(6'H)-ones. *Synth. Commun.* 2019, 49, 367 – 376.
- Yu, M.; Stevenson, K.; Zhou, G. N-alkylation of lactams with secondary heterobenzylic bromides. *Tetrahedron Lett.* 2014, 55, 5591 – 5594.



ESTUDIO EN EL ESTADO SÓLIDO DE LA INTERACCIÓN ARENO/PERFLUOROARENO PRESENTE EN MOLÉCULAS HÍBRIDAS TRIAZOL-CUMARINA PARA LA SÍNTESIS DE COMPUESTOS ORGÁNICOS CON PROPIEDADES METÁLICAS

RIGOBERTO BARRIOS-FRANCISCO¹, ABRAHAM COLÍN MOLINA², DAVID CORONA BECERRIL³, JANETH CRUZ DE LA CRUZ³

1. TECNOLÓGICO DE ESTUDIOS SUPERIORES DE SAN FELIPE DEL PROGRESO

2. INSTITUTO DE QUÍMICA-UNAM

3. CENTRO CONJUNTO DE INVESTIGACIÓN EN QUÍMICA SUSTENTABLE UNAM/UAEMEX

barrios.tessfp@gmail.com

PALABRAS CLAVE: interacciones CTC areno perfluoroareno

INTRODUCCIÓN

Los compuestos orgánicos pueden experimentar propiedades metálicas mediante la formación intermolecular de compuestos de transferencia de carga (CTC). Dichos CTC se pueden generar mediante interacciones areno/perfluoroareno a través de la síntesis de moléculas que contengan estos grupos funcionales cuidadosamente colocados en posiciones adecuadas en la estructura final de los compuestos.

MÉTODOS

Para la síntesis de moléculas híbridas se emplearon diferentes estrategias tales como la síntesis de Pechmann, SN₂, acoplamiento Azidas/fenilacetileno mediante catálisis con cobre, para obtener sistemas perfluoroareno/cumarina/1,2,3-triazol/areno. A partir de estos compuestos se obtienen monocristales para realizar estudios de difracción de rayos X de monocristal y observar la interacción areno/perfluoroareno.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se sintetizaron tres compuestos diferentes que contienen cada uno de los sistemas areno/cumarina/1,2,3-triazol/areno (1), perfluoroareno/cumarina/1,2,3-triazol/areno, y perfluoroareno/cumarina/perfluoroareno/1,2,3-triazol/areno (3). En el caso del compuesto (1), al carecer del sistema areno/perfluoroareno no fue posible obtener cristales apropiados para su difracción, lo que es congruente con que no exista en este sistema la formación del CTC que brindaría estabilidad a la supraestructura. Para el compuesto (2) fue posible obtener el correspondiente monocristal el cual muestra que la molécula presenta dos juegos de apilamiento π (areno/perfluoroareno) mediante un arreglo cabeza-cola. Dos importantes diferencias entre los compuestos (1) y (2) radica en que en el segundo compuesto contiene el sintón areno/perfluoroareno que permite el apilamiento en la supraestructura, y que permitió la obtención del monocristal para su estudio en estado sólido, además que el punto de fusión del compuesto (2) es mayor que el observado en (1) y que coincide con la conclusión anterior.

REFERENCIAS

- [1] Hori, A. Arene-Perfluoroarene Interactions in Coordination Architectures. The Importance of π -Interactions in Crystal Engineering 2012, 163–185.
- [2] Kishikawa, K.; Oda, K.; Aikyo, S.; Kohmoto, S. Columnar Superstructures of Non-Disc-Shaped Molecules Generated by Arene-Perfluoroarene Face-to-Face Interactions. *Angewandte Chemie* 2007, 119 (5), 778–782.
- [3] Saunders, G. C.; Wehr-Candler, T. T. Solvent-Free Mechanochemical Synthesis of π - π Stacked Arene-Perfluoroarene Co-Crystals. *Journal of Fluorine Chemistry* 2013, 153, 162–164.



QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

ILECL-279

ACETOPHENONE ADSORPTION ON MONOMETALLIC AND BIMETALLIC Pt-Co MODEL CATALYST SURFACES: A DFT STUDY

Santiago Gómez Jaramillo¹, Juan F. Espinal¹, Alejandro Montoya², Diana López¹

1. Química de Recursos Energéticos y Medio Ambiente, Instituto de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia UdeA, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia
2. The University of Sydney, School of Chemical and Biomolecular Engineering, Sydney, New South Wales 2006 Australia

PALABRAS CLAVES : hydrodeoxygenation, DFT, computational chemistry

INTRODUCCIÓN

Pt-Co bimetallic and monometallic catalysts are of great interest for the hydrodeoxygenation of organic molecules obtained from biomass pyrolysis, aiming to achieve transportation fuels with high heating value. Acetophenone is chosen as a model compound because it contains two functional groups frequently present in bio-oils, namely: carbonyl and phenyl.

MÉTODOS

The face-centered-tetragonal (fct) phase of PtCo and the face-centered-cubic (fcc) phases of Co, Pt, and Pt₃Co were used to create slab models that were subsequently used to evaluate the adsorption of acetophenone on the catalyst surface. Self-consistent periodic DFT calculations were used for analyzing the electronic properties using VASP(V5.4).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

The interaction of acetophenone with surfaces of Pt(111), Co(111), PtCo(001), and Pt₃Co(111) was explored by determining the most stable binding configurations. The adsorption modes were characterized by the adsorbate-surface binding energy, and various geometric parameters like metal-oxygen (acetophenone) distance and deformation of carbonyl or phenyl groups. This analysis shows that all adsorption modes led to chemisorption interactions, involving the aromatic ring for all surfaces, and the carbonyl group for surfaces containing cobalt atoms. Oxygen atoms (acetophenone) are closer to cobalt atoms at the surface, and the C=O bond show a significant elongation, suggesting a chemical activation towards deoxygenation. Further analysis of charge density difference were performed, obtaining results that support what was inferred from the geometric parameters. It is concluded that the oxophilic character of cobalt atoms is the main reason for the chemical activation of the carbonyl group on the surface.



MECHANISTIC INSIGHTS INTO THE BPO₂-DRIVEN CATALYTIC FORMATION OF CYCLIC CARBONATES FROM CO₂ AND EPOXIDES

Fernando Castro-Gómez,, Anderson Gonzalez-Vargas, and Pedro J. Castro

Universidad del Atlántico, Colombia

fernandocastro@mail.uniatlantico.edu.co

KEY-WORDS: DFT Calculations, Binary Catalyst, CO₂ Capture, Computational Catalysis

INTRODUCTION

The growing concern about climate change has aroused great interest in the scientific community to carry out several investigations aimed to find new strategies of using CO₂ to produce useful molecules. A computational study on the conversion of CO₂ into cyclic carbonates activated by BPO₂/halide binary catalyst is presented herein.

METHODS

The reaction mechanisms have been rationalized based on density functional theory (DFT) energies and the polarizable continuum model (PCM) to simulate different solvent effects. The ωB97XD and B3LYP-D3 functionals, in combination with 6-311+G(d,p) basis set, were used for this study.

RESULTS AND CONCLUSIONS

A possible mechanism for the formation of cyclic carbonates from CO₂ and different epoxides mediated by an BPO₂/KX (X=halide) binary system was studied using DFT methods. The theoretical outcome illustrates the stationary points involved along the different reaction routes and offers a deeper understanding of the role of the BPO₂/KX catalytic system on the CO₂ conversion based on thermodynamic and structural information. The catalyzed reaction involving the BPO₂ compound can be started by different initial coordination sites (ICs), depending on the interaction of the epoxide with four different Brønsted sites on BPO₂ (Site-A, Site B, Site-C and Site-D), leading to the formation of several hydrogen bonding. Three main steps are described for the reaction catalyzed by the BPO₂/KI binary system: the epoxide ring-opening, the CO₂ insertion, and the ring-closing process. A reasonable qualitative description of the reaction mechanism operating for the BPO₂/KX-catalyzed CO₂ conversion into cyclic carbonates was theoretically achieved.

REFERENCES

- [1] A. Gonzalez-Vargas, F. Castro-Gómez, P. J. Castro, *ChemistrySelect* **2021**, Accepted Manuscript. DOI 10.1002/slct.202101272.
- [2] F. Della Monica, A. W. Kleij, *Catal. Sci. Technol.*, **2020**, 10, 3483-3501.
- [3] J. González-Fabra, F. Castro-Gómez, W. M. C. Sameera, Gunnar Nyman, AW Kleij, *Catal. Sci. Technol.* **2019**, 9, 5433-5440.



EFFECTO SOLVATOCRÓMICO DE (E)-4-HIDROXI-N'-(1-(P-TOLIL)ETILIDEN)BENZOHIIDRAZIDA: UN ESTUDIO TEÓRICO.

ALISSON INES RODELO HENRIQUEZ , ALFREDO PEREZ GAMBOA

UNIVERSIDAD DEL ATLANTICO

arodelo@mail.uniatlantico.edu.co

PALABRAS CLAVES : Solvatocromismo ONL Benzohidracida Absorción

INTRODUCCIÓN

Una investigación teórica sobre el espectro UV-vis y efecto solvatocrómico de (E)-4-hidroxi-N'-(1-(p-tolil)etiliden)benzohidrazida. (E4ABTEBH), una molécula conjugada de tipo donador-puente-receptor, ha sido caracterizada computacionalmente en solventes polares próticos, apróticos y no polares.). La estabilidad de la molécula y propiedades optoelectrónicas también se investigaron.

MÉTODOS

Para la caracterización computacional el modelo empleado fue : DFT/cam-B3LYP/6-311++G(d,p). Para el cálculo de los espectros de absorción el modelo empleado fue: (TD-CAM B3LYP)

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En el desarrollo de esta investigación la molécula en cuestión ha mostrado un comportamientos particulares en términos de propiedades de ONL que van de la mano del medio solvente donde se han calculado las mismas, dejando claro que los efectos dados por el solvente son un factor determinante a tener en cuenta en las propiedades ópticas que puede presentar un compuesto.

REFERENCIAS

- Balanay, M. P.; Kim, D. H. . Optical properties of porphyrin analogues for solar cells: An NLO approach. Current Applied Physics, 2011, 11, 109-11.
- Akelah A, Kenawy ER, Sherrington DC. Agricultural polymers with herbicide/fertilizer function-III. Polyureas and poly(Schiff base)s based systems. European Polymer Journal, 1993, 29, 1041-1045.
- Panicker, C.Y. Solvatochromic study of coumarin 545 in alcohols for the determination of ground and excited state dipole moments. International Journal of Advanced Research, 2013 1(8), 616-626.



"DISEÑO DE MOLÉCULAS CON ACTIVIDAD ANTI-TOXOPLASMA GONDII DERIVADAS DEL NÚCLEO 4-TIAZOLIDINONA BASADA EN UN MODELO DE PREDICCIÓN QSAR"

Lina Marcela Pedraza Castillo¹, Edwar Cortés González¹, Gladys Elena Salcedo Echeverry¹, Cristian Rocha², Diego A. Molina¹, Gerardo Ramos¹, Jorge Enrique Gómez Marín³.

1. UNIVERSIDAD DEL QUINDÍO
2. UNIVERSIDAD DE ANTIOQUIA
3. CENTRO DE INVESTIGACIONES BIOMÉDICAS DE LA UNIVERSIDAD DEL QUINDÍO

lmpedrazac@uqvirtual.edu.co

PALABRAS CLAVES: QSAR Toxoplasmosis 4-tiazolidinona eco-amigable

INTRODUCCIÓN

Parásitos como *Toxoplasma gondii* afectan significativamente la población humana, principalmente individuos inmunocomprometidos o por infección congénita. Actualmente su tratamiento es poco eficaz y tóxico. La búsqueda y desarrollo de compuestos con mayor especificidad, es indispensable. QSAR ha demostrado ser de gran ayuda en el diseño racional de estos compuestos.

MÉTODOS

Se ajustaron 4 modelos QSAR usando los datos experimentales de derivados 4-tiazolidinona, publicados y evaluados in vitro. Se calcularon descriptores moleculares relacionando estructura – actividad anti toxoplasma. Se dibujaron y calcularon descriptores moleculares para nuevos diseños derivados de 4-tiazolidinona. Se sintetizaron y evaluaron ligandos in vitro usando métodos eco-amigables.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Según los cuatro modelos QSAR, seis descriptores moleculares relacionan IC50 con su actividad anti toxoplasma. De las moléculas evaluadas con resultados ADME, IC50, Toxicidad predicha y acoplamiento moleculares, por medio del método QSAR, se observó que el grupo funcional hidroxilo (- OH) en un anillo fenilo, en cualquier posición, acompañado siempre de grupos sustituyentes alquilo en la posición N- del anillo tiazol, presentan las más bajas energías de afinidad, nula toxicidad y un IC50 entre 9 y 30 μ M, predichos.

Estas predicciones podrían indicar un resultado favorable en su actividad anti-toxoplasma. Se realizó la síntesis de 11 de estas moléculas, de las cuales se confirmó su estructura por métodos IR y espectrometría de masas, para su posterior evaluación in vitro en células HFF, que arroja resultados prometedores en valores de su Concentración Mínima Inhibitoria sobre los procesos de invasión, replicación y supervivencia del parásito.

REFERENCIAS

- (1) Montoya, J.; Liesenfeld, O. Toxoplasmosis. *Lancet* 2004, 363 (9425), 1965–1976. [https://doi.org/10.1016/S0140-6736\(04\)16412-X](https://doi.org/10.1016/S0140-6736(04)16412-X).
- (2) D'Ascenzio, M.; Bizzarri, B.; De Monte, C.; Carradori, S.; Bolasco, A.; Secci, D.; Rivanera, D.; Faulhaber, N.; Bordón, C.; Jones-Brando, L. Design, Synthesis and Biological Characterization of Thiazolidin-4-One Derivatives as Promising Inhibitors of *Toxoplasma Gondii*. *Eur. J. Med. Chem.* 2014, 86, 17–30. <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2014.08.046>.
- (3) Akbari, S.; Zebardast, T.; Zarghi, A.; Hajimahdi, Z. QSAR Modeling of COX -2 Inhibitory Activity of Some Dihydropyridine and Hydroquinoline Derivatives Using Multiple Linear Regression (MLR) Method. *Iran. J. Pharm. Res.* 2017, 16 (2), 525–532.



SLECL-191

ANÁLISIS ESTRUCTURAL DE PROTEÍNAS CARBONILADAS CON ALDEHÍDOS REACTIVOS DERIVADOS DE PRODUCTOS FINALES DE LIPOXIDACIÓN AVANZADA MEDIANTE SIMULACIÓN POR DINÁMICA MOLECULAR

Rafael Pineda-Alemán, Antistio Alviz-Amador, Humberto Pérez-González, Erika Rodríguez-Cavallo y Darío Méndez-Cuadro

Grupo de Química Analítica y Biomedicina.

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Facultad de Ciencias Farmacéuticas. Universidad de Cartagena

dmendezc@unicartagena.edu.co

PALABRAS CLAVES : Carbonilación, SDM, ALEs, Estructura

INTRODUCCIÓN

Los residuos de Cisteína, Histidina, Lisina y Arginina han sido identificados como los principales blancos de formación de aductos de Michael y bases de Schiff de los ALEs 4-HNE, 4-ONE, 4-HHE y MDA [1, 2]. Sus efectos estructurales y funcionales han sido descritos de manera parcial.

MÉTODOS

Construcción y optimización de parámetros de aminoácidos ALEs-modificados con HF (6-31G) en Gaussian 09. Validación de enlaces, ángulos y diedros por comparación con estructuras electrónicas optimizadas con el funcional de DFT (m062x/6-31G). Proteínas BSA y TRX fueron simuladas con AmberTools16 [3]. Análisis RMSD, RMSF y PCA fueron aplicados

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

12 nuevos residuos de aminoácidos ALEs-modificados compatibles con AmberTools16 fueron construidos y validados. En TRX, se observó un ligero cambio en la estabilidad conformacional global de Trx modificado con 4-HNE y MDA junto con fluctuaciones locales de alta movilidad en el sitio catalítico y cambios en la flexibilidad conformacional para todos los casos modificados. Alteraciones que refuerzan actividad enzimática inhibitoria de los ALEs sobre TRX. En la BSA se observó un aumento en la estabilidad conformacional en todos los sistemas modificados analizados con cuatro regiones de alta fluctuación atómica, siendo los subdominios IA y IIIB los más afectados. En conclusión, la carbonilación indirecta causada por los ALEs indujeron cambios conformacionales locales en las proteínas TRX y BSA mono-modificadas.

REFERENCIAS

1. Alviz-Amador, A.; Galindo-Murillo, R.; Pineda-Aleman, R.; Perez-Gonzalez, H.; Rodriguez-Cavallo, E.; Vivas- Reyes, R.; Mendez-Cuadro, D., 4-HNE carbonylation induces local conformational changes on bovine serum albumin and thioredoxin. A molecular dynamics study. *J Mol Graph Model* 2019, 86, 298-307.
2. Bachi, A.; Dalle-Donne, I.; Scaloni, A., Redox proteomics: chemical principles, methodological approaches and biological/biomedical promises. *Chem Rev* 2013, 113 (1), 596-698.
3. Case, D. A.; Cheatham, T. E., 3rd; Darden, T.; Gohlke, H.; Luo, R.; Merz, K. M., Jr.; Onufriev, A.; Simmerling, C.; Wang, B.; Woods, R. J., The Amber biomolecular simulation programs. *J Comput Chem* 2005, 26 (16), 1668-88



EVALUACIÓN IN SILICO DE DERIVADOS DE NAFTOQUINONA CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTICHAGAS

Prieto, Lina Sofía^a. Gómez Jovanny Arlés^a. Duchowics, Pablo^b. Nossa, Diana^c. Cárdenas-Chaparro, Agobardo^c.

^aGrupo Química-Física Molecular y Modelamiento Computacional (QUIMOL) UPTC, Colombia.

^bInstituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) / Universidad Nacional de la Plata, Argentina. ^cCentro de Química Inorgánica (CEQUINOR) / Universidad Nacional de la Plata, Argentina.

lina.prieto02@uptc.edu.co

PALABRAS CLAVE: Benzanilidas; DRX; Enlaces de halógeno; Docking molecular.

INTRODUCCIÓN

Las metodologías computacionales brindan un medio efectivo, de menor tiempo y costo para evaluar ligandos frente a determinadas patologías clínicas, cómo la enfermedad de Chagas, la cual es abordada en el presente trabajo a través de QSAR y docking molecular para probar la actividad teórica de derivados de naftoquinonas.

MÉTODOS

Usando el método de regresión lineal se construyó un modelo QSAR para la actividad antichagas de derivados de naftoquinona. Después, se evaluó la afinidad con la enzima trypanotona reductasa en el software MVD. Finalmente, se verificó que las moléculas con potencial antichagas cumplieran con los postulados de Lipinski.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

El modelo QSAR obtenido fue validado, indicando que es robusto, confiable y con buena capacidad predictiva. Según los resultados, 10 de las 68 moléculas probadas mostraron mejor actividad teórica frente a la actividad real del nifurtimox (IC₅₀=21,05 μM), fármaco que se utiliza actualmente en el tratamiento de la enfermedad, con baja efectividad y un amplio espectro de efectos secundarios. Por otra parte, a través del docking molecular se observaron las interacciones y energías de enlace de los ligandos con la trypanotona reductasa. Finalmente, todas las moléculas que exhibieron alta actividad teórica cumplen con los parámetros de Lipinski asociados a la permeabilidad de membranas biológicas.

Se puede concluir que el modelamiento in silico permitió seleccionar ligandos con potencial actividad, los cuales podrían convertirse en candidatos a fármacos antichagas. De esta manera se espera contribuir a la investigación preliminar en desarrollo de fármacos para enfermedades desatendidas, que tanto aquejan a nuestra sociedad.

REFERENCIAS

Prieto-Martínez, F.; López-López, E.; Eurídice Juárez-Mercado, K.; Medina-Franco, J. Computational Drug Design Methods—Current and Future Perspectives. In *Silico Drug Design*; Elsevier, 2019; pp 19–44. <https://doi.org/10.1016/b978-0-12-816125-8.00002-x>.

Urbina, A.; Docampo, R. Specific Chemotherapy of Chagas Disease: Controversies and Advances. *Trends in Parasitology*. Elsevier Ltd November 1, 2003, pp 495–501. <https://doi.org/10.1016/j.pt.2003.09.001>.

Sieveling, I.; Thomas, P.; Estévez, C.; Quiñones, N.; Cuéllar, M. A.; Villena, J.; Espinosa-Bustos, C.; Fierro, A.; Tapia, R. A.; Maya, J. D.; López-Muñoz, R.; Cassels, B. K.; Estévez, R. J.; Salas, C. O. 2-Phenylaminonaphthoquinones and Related Compounds: Synthesis, Trypanocidal and Cytotoxic Activities. *Bioorganic Med. Chem.* 2014, 22 (17), 4609–4620. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2014.07.030>.



ESPECTROSCOPIA COMPUTACIONAL DE IONES EN SOLUCIÓN

Lina Uribe,[†]Sara Gómez,[†]Tommaso Giovannini,[‡]Franco Egidi,[‡]and Albeiro Restrepo[†]

[†]Instituto de Química, Universidad de Antioquia UdeA, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia [‡]Scuola Normale Superiore, Classe di Scienze, Piazza dei Cavalieri 7, 56126, Pisa, Italy

lmarcela.uribe@udea.edu.co

PALABRAS CLAVES: Espectroscopía computacional, muestreo conformacional

INTRODUCCIÓN

En este trabajo se desarrolla un nuevo método computacional de aplicación general que sirve como guía preliminar de protocolos experimentales para la detección de iones en solución. Se discutirá como aplicación específica la espectroscopia de absorción del ion nitrito.

MÉTODOS

Se estudió el nitrito acuoso con tres modelos de solvatación, PCM¹, Cluster^{2,3} y QM/MM⁴ y dos métodos de muestreo ASCEC y Dinámica Molecular. Se realizó un estudio de la naturaleza de las interacciones soluto-solvente por medio de QTAIM y NBO. Finalmente se calcularon los espectros de absorción usando TD-DFT.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Para reproducir con precisión los espectros de absorción experimentales reportados para el nitrito es necesario realizar un exhaustivo muestreo de la superficie de energía potencial por lo menos con 5 aguas explícitas y luego calcular el espectro de absorción agregando más solvente bajo el modelo PCM y teniendo en cuenta la contribución estadística ponderada de cada isómero al espectro total. Un procedimiento alternativo es utilizar los resultados obtenidos del muestreo con dinámica molecular con grandes cantidades de moléculas de agua explícitas y luego calcular el espectro QM/MM teniendo en cuenta en la región QM el nitrito y hasta la tercera capa de solvatación. Con QM/MM también se reprodujeron de forma adecuada los espectros experimentales, pero se necesitaron 16 moléculas de agua en la región QM para lograrlo.

REFERENCIAS

- C. Gonzalez, A. Restrepo, M. Marquez, and K. B. Wiberg, *JACS*, 1996, 118, 23, 5408–5411.
Florez, E.; Acelas, N.; Ramírez, F.; Hadad, C.; Restrepo, A. *PCCP*, 2018, 20, 8909–8916.
Hadad, C.; Florez, E.; Acelas, N.; Merino, G.; Restrepo, A. *IJQC*, 2019, 119, e25766.
Giovannini, T.; Egidi, F.; Cappelli, C. *Chem. Soc. Rev.* 2020, 49, 5664–5677.



Análisis del efecto de variaciones en el grado de insaturación de las cadenas carbonadas de glicerofosfolípidos sobre el comportamiento elástico y de fase de bicapas lipídicas mediante Dinámica Molecular

Maria Clara Quintero Gómez , Jorge David , Luis Alejandro Gómez
Universidad EAFIT

mcquinterg@eafit.edu.co

PALABRAS CLAVES: Dinámica Molecular Bicapa Lipídica

INTRODUCCIÓN

Las bicapas lipídicas constituyen la unidad estructural fundamental de las membranas biológicas, las cuales están involucradas en numerosos procesos celulares fundamentales para la vida. Por tanto, el estudio de la estructura y dinámica de estos sistemas ha ganado gran interés en los últimos años mediante métodos experimentales y computacionales.

MÉTODOS

A través de CHARMM-GUI se ensamblaron sistemas multicomponentes de lípidos: DSPC, DOPC y DUPC, que contienen 18 carbonos en cada cadena y presentan una variación en el grado de insaturación. Mediante Dinámica molecular con Gromacs y el campo de Fuerzas CHARMM-36, se evaluó su comportamiento de fase y propiedades elásticas.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Se evaluaron 5 composiciones diferentes de los lípidos, aumentando progresivamente la composición porcentual de lípidos con una y dos insaturaciones. Tales sistemas fueron simulados a diferentes temperaturas en el rango comprendido entre -87°C y 85°C se identificó el comportamiento de fase dichos sistemas multicomponentes. Además de las propiedades estructurales más importantes como el área por lípido, parámetro de orden y espesor de las bicapas; también se evaluaron las propiedades mecánicas: módulo de compresibilidad y módulo de rigidez. La validación de las simulaciones se llevó a cabo mediante comparación con los sistemas monocomponentes.

REFERENCIAS

- Khakbaz, P., & Klauda, J. B. (2018). Investigation of phase transitions of saturated phosphocholine lipid bilayers via molecular dynamics simulations. *Biochim. Biophys. Acta, Biomembr.*, 1860(8), 1489-1501.
- O.G. Mouritsen, A. Boothroyd, R. Harris, N. Jan, T. Lookman, L. MacDonald, D.A. Pink, M.J. Zuckermann, Computer simulation of the main gel–fluid phase transition of lipid bilayers, *J. Chem. Phys.* 79 (1983) 2027–2041.
- T.R. Stouch, Lipid membrane structure and dynamics studied by all-atom molecular dynamics simulations of hydrated phospholipid bilayers, *Mol. Simul.* 10 (1993) 335–362



SLECL-390

ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA INSERCIÓN DEL NAPROXENO ANIÓNICO EN UNA BICAPA FOSFOLIPÍDICA

Natalia Andrea Rojas Valencia¹, Sara Gómez², Francisco Núñez¹, Chiara Cappelli², Albeiro Restrepo³.

1. Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Medellín, Carrera 87 No 30-65, 050026, Medellín, Colombia
2. Scuola Normale Superiore, Classe di Scienze, Piazza dei Cavalieri 7, 56126, Pisa, Italy
3. Instituto de Química, Universidad de Antioquia UdeA, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia

nataliar8907@gmail.com

PALABRAS CLAVES: Simulación Naproxeno Fosfolípido Agua

INTRODUCCIÓN:

El naproxeno aniónico es un fármaco de amplio consumo. Sin embargo, diversas investigaciones llevadas a cabo en células y modelos fosfolipídicos sugieren que estos fármacos pueden alterar localmente la estructura lipídica, lo cual puede influir en el correcto funcionamiento de la membrana celular y por ende en la célula.

MÉTODOS:

Se realizaron simulaciones de dinámica molecular acopladas con el método umbrella sampling. El sistema de estudio consistió en una molécula de naproxeno aniónico y una bicapa fosfolipídica formada por lípidos de DMPC (dimyristoyl fosfatidilcolina) en ambiente acuoso. Para estudiar las interacciones se empleó la mecánica cuántica.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

A partir de las dinámicas moleculares calculamos energía libre, entropía y entalpía como una función de la posición del naproxeno a lo largo de la bicapa de DMPC. Como resultados, encontramos que la posición más favorable del fármaco es la región entre la parte polar y no polar de la membrana y que la entropía es quien conduce su inserción. Adicionalmente, empleando mecánica cuántica estudiamos las interacciones responsables de la localización del fármaco en la región del mínimo de energía. Específicamente, aplicamos la teoría cuántica de átomos en moléculas, orbitales naturales de enlace e interacciones no covalentes en un conjunto de configuraciones no correlacionadas extraídas de las trayectorias de dinámica molecular. Desde el análisis de las interacciones, encontramos que el fármaco forma una pared de interacciones no covalentes con el ambiente lipídico que da cuenta de su estabilidad en el mínimo de energía libre.

REFERENCIAS

Manrique-Moreno, Garidel, P.; Suwalsky, M.; Howe, J.; Brandenburg, K. The membrane-activity of Ibuprofen, Diclofenac, and Naproxen: A physico-chemical study with lecithin phospholipids, *Biochim. Biophys. Acta* 2009 1788 1296-1303



ANÁLISIS ESTRUCTURAL Y DE DOCKING MOLECULAR PARA COMPUESTOS TIPO BENZAMIDA; IMPLICACIONES DEL ENLACE DE HALÓGENO

K. Arango-Daraviña^{1*}, R. Moreno-Fuquen¹; E. García¹; Juan C. Tenorio².

¹ Department of Chemistry, Universidad del Valle. Calle 13 Carrera 100-00. Apartado 25360, Cali,

Colombia

kevin.arango@correounivalle.edu.co

PALABRAS CLAVES: Simulación Naproxeno Fosfolípido Agua

INTRODUCCIÓN:

Los enlaces de halógeno han mostrado un papel importante en el área de la química estructural; contribuyendo directamente en el ordenamiento cristalino [1], ingeniería biomolecular y la medicina (la incorporación de halógenos en la estructura de diversos fármacos ha llevado a una mejora significativa de su actividad)[2].

MÉTODOS:

Los compuestos obtenidos se sintetizaron por métodos de reacción convencionales utilizando cantidades equimolares de p-metoxianilina y el cloruro de benzoilo correspondiente en cloroformo, el sólido blanco obtenido se recrystalizó con metanol y caracterizó por difracción de rayos X. Los cálculos computacionales se realizaron con el software Gaussian 09.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

Se logró sintetizar y caracterizar dos compuestos de tipo metoxibenzamida (2BrMPB y 3BrMPB), ambos cristalizados en metanol con grupos espaciales P21/n y P21/c. El estudio supramolecular del arreglo cristalino mostró la formación directa de enlaces de hidrogeno y de halógeno.

El estudio supramolecular del compuesto 2BrMPB reveló la presencia de enlaces de halógeno C-Br...Br y Br...Br...Br la estructura 3BrMPB presentó interacciones muy inusuales con enlaces de halógeno menos favorecidos por la geometría.

Un estudio detallado de estos enlaces de halógeno mediante cálculos computacionales permitió cuantificar de forma directa el potencial electrostático en las zonas cercanas al Sigma-Hole mostrando un aumento al pasar del halógeno en posición orto (9.22 Kcal/mol) a la posición para (15.07 Kcal/mol).

Los estudios de acoplamiento molecular Docking de los compuestos sintetizados frente a la ciclooxigenasa (COX) mostraron una participación directa del átomo halógeno con el residuo de serina de la COX.

REFERENCIAS

- [1] Politzer, P.; Murray, J.; Clark, T. Sigma-Hole Bonding: A Physical Interpretation. Topics in Current Chemistry 2014, 19-42.
- [2] Kellett, C.; Kennepohl, P.; Berlinguette, C. II Covalency In The Halogen Bond. Nature Communications 2020, 11.
- [3] Shetye, G.; Franzblau, S.; Cho, S. New Tuberculosis Drug Targets, Their Inhibitors, And Potential Therapeutic Impact. Translational Research 2020, 220, 68-97.

SÍNTESIS, ESTRUCTURA CRISTALINA, SUPERFICIES DE HIRSHFELD, POTENCIAL ELECTROSTÁTICO Y DOCKING MOLECULAR DEL COMPUESTO (5-AMINO-3-(METILTIO)-1H-1,2,4-TRIAZOL-1-IL)(TIOFEN-2-IL)METANONA

K. Arango-Daraviña^{1*}, R. Moreno-Fuquen¹; A. Kennedy².

¹ Department of Chemistry, Universidad del Valle. Calle 13 Carrera 100-00. Apartado 25360, Cali,

Colombia ²Department of Pure and Applied Chemistry, University of Strathclyde, 295 Cathedral

Street, Glasgow G1 1XL, Scotland.

kevin.arango@correounivalle.edu.co

PALABRAS CLAVES: Benzanilidas; DRX; Enlaces de halógeno; Docking molecular.

INTRODUCCIÓN:

El surgimiento de bacterias resistentes a los medicamentos es un problema que ha ido creciendo globalmente y exige la búsqueda de nuevos agentes antimicrobianos seguros y efectivos. El núcleo heterocíclico 1,2,4-triazol, que se encuentra en la estructura de diversos compuestos, ha mostrado una diversa actividad biológica, entre las cuales destaca su actividad antibacteriana. Distintos autores reportan la potencial actividad de estos compuestos frente a diversos tipos de bacteria, Gram-positiva y Gram-negativa.[1]

MÉTODOS:

Dando continuidad a la síntesis racional de nuevos compuestos que contienen el grupo 1,2,4-triazol que realiza nuestro grupo de investigación, [2] apoyados en cálculos MC y simulación molecular se logró la obtención, estudio computacional y cristalización del compuesto (5-amino-3-(metiltio)-1H-1,2,4-triazol-1-il)(tiofen-2-il)metanona.[3]

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

El estudio por difracción de rayos X mostró que la molécula cristalizó en un sistema ortorrómbico con grupo espacial Pca2₁, la estructura presenta dos moléculas por unidad asimétrica y cada una posee geometría casi plana con todos sus átomos (excepto hidrógenos del grupo metilo) dentro del mismo plano, se presenta además un enlace de hidrogeno intramolecular entre el N-H de la amina y el oxígeno del grupo carbonilo, todo este comportamiento arroja evidencia de un sistema π altamente conjugado.

El estudio supramolecular mediante superficies de Hirshfeld evidenció la formación de dímeros R²₂(8) paralelos al plano (15 3 2), que de acuerdo con el análisis de la huella dactilar se originan por interacciones tipo N---H/H---N que comprenden el 14.6% de la superficie de contacto. La conformación dimérica puede probablemente aumentar los puntos potenciales de anclaje en el bolsillo activo y su actividad como fármaco inhibidor.

Los cálculos de potencial electrostático respaldan los resultados anteriores revelando que las zonas más electropositivas se encuentran en los hidrógenos del anillo de tiofeno (24.04 y 23.70 Kcal/mol), mientras que las zonas con un potencial electrostático más negativo se encuentran sobre los grupos carbonilo correspondientes (-30.53 y -27.71 Kcal/mol). El estudio de Docking molecular realizado en la enzima dihidrofolato reductasa (DHFR) PDB ID: 2W9S arrojó un valor de energía de afinidad de -5.7 Kcal/mol, cuyo valor no supera el del fármaco de control Trimetoprim (-6.8 Kcal/mol).

Se estudió por Docking su efecto inhibidor en una proteína de membrana de salmonella (PDB ID: 4KRA) hallando una energía de afinidad de -6.1 Kcal/mol frente a (-7.1 Kcal/mol) correspondiente al fármaco Ciprofloxacina.

REFERENCIAS

- [1] Aggarwal, N.; Kumar, R.; Dureja, P.; Khurana, J.M. Synthesis, Antimicrobial Evaluation and QSAR Analysis of Novel Nalidixic Acid Based 1,2,4-Triazole Derivatives. *Eur. J. Med. Chem.* 2011, 46, 4089–4099.
- [2] Moreno_Fuquen, R. Arango-Daraviña, K., Becerra, D., Castillo, J. C., Kennedy, A. R. and Macias, M. (2019). Catalyst and solvent-free synthesis of 2-fluoro-N-(3-methylsulfanyl-1H-1,2,4-triazol-5-yl)benzamide through a microwave-assisted Fries rearrangement: X-ray structural and theoretical studies. *Acta Cryst.* (2019). C75,359–371.
- [3] Sahoo, P.K.; Sharma, R.; Pattanayak, P. Synthesis and Evaluation of 4-Amino-5-Phenyl-4H-[1,2,4]-Triazole-3-Thiol Derivatives as Antimicrobial Agents. *Med. Chem. Res.* 2010, 19, 127–135.



SLECL-686

ANÁLISIS FÍSICOQUÍMICO DE LA INTERACCIÓN ENTRE ÓXIDO DE GRAFENO FUNCIONALIZADO Y POLISULFUROS DE LITIO EN CÁTODOS DE BATERÍAS DE LITIO-AZUFRE A PARTIR DE CÁLCULOS DE TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD

Arnovis Enrique Yepes Payares
Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia
ayepesp1@unicartagena.edu.co

PALABRAS CLAVES: DFT, Funcionalización, adsorción, polisulfuros

INTRODUCCIÓN:

Las baterías de litio-azufre constituyen una mejor alternativa de almacenamiento de energía en capacidad y densidad de energía a las tradicionales baterías de ion de litio. Sin embargo, la formación de polisulfuros durante la descarga, y su difusión a través del solvente orgánico hacia el ánodo, impiden su desarrollo tecnológico.

MÉTODOS:

Se implementó la Teoría del Funcional de la densidad, para estudiar la adsorción de 8 tipo de polisulfuros, sobre óxido de grafeno funcionalizado, de igual modo, se realizaron cálculos de post-procesamiento con el fin de determinar DOS, distribución de cargas de Bader, entre otros.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

Los resultados demostraron que la fuerza de interacción entre el azufre y el grafeno se ve afectada por el tamaño de poro, la longitud de las cadenas de polisulfuro, y la presencia de los grupos funcionales presentes en la matriz del grafeno. Las interacciones más fuertes se encontraron para polisulfuros de cadena larga S8²⁻ y S6²⁻ y poros más pequeños en el orden de 1nm. Simulaciones de dinámica molecular ab-initio demostraron que la cinética y los mecanismos de reducción se ven afectados por el tamaño de poro y la presencia de defectos debido a interacciones específicas debido a acumulaciones de litio en determinadas zonas del cátodo.

REFERENCIAS

1. J. Liu , T. Yang , D.-W. Wang , G. Q. Lu , D. Zhao and S. Z. Qiao , Nat. Commun., 2013, 4 , 2798.
2. M. Yu , R. Li , M. Wu and G. Shi , Energy Storage Materials, 2015, 1 , 51 —73.
3. C. Zu and A. Manthiram , Adv. Energy Mater., 2013, 3 , 1008 —1012.



34°

CLAQ

20
20

CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA
CARTAGENA DE INDIAS - COLOMBIA

COMUNICACIONES ORAL PÓSTER



QUÍMICA ANALÍTICA

ILACL-76

Depth-dependent pigment profiles in phytoplankton samples from the Caribbean Ocean using MALDI-MS
Luis M. Diaz-Sanchez¹; Milena Benavides², María I. Criales¹, Cristian Blanco-Tirado¹; Marianny Y. Combariza¹

¹Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

²Parque Nacional Natural Corales de Profundidad, Cartagena, Colombia

marianny@uis.edu.co

INTRODUCTION: Phytoplankton is a community of organisms present in water that varies due to the conditions of their environment. We reported that electron transfer-ET-MS-MALDI allow analyzing phytoplankton pigments. Here we explore the use of MALDI for monitoring changes in pigment composition, at different depth zones, associated with fluctuations in the organisms.

KEY-WORDS: Pigment, MALDI, Depth-dependent, Phytoplankton

METHODS: Seawater samples were collected and filtered in the Deep-Sea Corals National Park-(PNNCPR), the Colombian Caribbean at depths of 0,15, and 35 m. Filters were mixed with THF:EtOH and placed on an ultrasound bath (10 min). The samples were analyzed by LDI-MS and MALDI-MS using DCTB and α -CNPV-OCH₃ as ET matrices.

PRELIMINARY DATA: LDI analysis shows pigment artifacts and abundant fragmentation (e.g., phytol loss). When using α -CNPV-OCH₃ (8.19 eV) and DCTB (8.54 eV) as matrices, we observed abundant signals corresponding mainly to radical cations of phytoplankton pigments (chlorophylls and carotenoids). Interestingly, only with α -CNPV-OCH₃, we found signals corresponding to protonated molecules [M + H]⁺ of chlorophyll a. α -CNPV-OCH₃ afforded clean mass spectra with no interferences in the mass region corresponding to phytoplankton signals. Pigment profiles vary, in number and types of signals, according to sample depth zone. In the sample of seawater collected at greater depth (35 m), fewer phytoplankton pigments were identified compared to samples of water collected at 0 m. Changes in the number of phytoplankton pigments and pigment profiles are related to the amount of biomass in the sample, physicochemical conditions of the water, nutrient availability, and solar radiation index, as established by PCA analysis.

REFERENCES: Marrugo-Pascuales M, Martinez-Ledesma C. Plan de Manejo del Parque Nacional Natural Corales de Profundidad 2016 – 2021. Parques Nacionales Naturales de Colombia, Cartagena. Chem Commun 2016;23:852–4.

Jeffrey S, Mantoura R, Wright S. Phytoplankton pigments in oceanography: guidelines to modern methods. Vol. 48. Primera. Paris: 1997.

Suzuki T, Midonoya H, Shioi Y. Analysis of chlorophylls and their derivatives by matrix-assisted laser desorption/ionization–time-of-flight mass spectrometry. Anal Biochem 2009;390:57–62.

Ramirez-pradilla J, Blanco-tirado C, Combariza M. Electron-transfer ionization of nanoparticles, polymers, porphyrins, and fullerenes using synthetically tunable α -cyanophenylenevinyls as UV MALDI-MS matrices. ACS, Appl. Mater. Interfaces, 2019;11:10975–10987.

ACKNOWLEDGMENTS: We thank Guatiguara Technology Park at Universidad Industrial de Santander for infrastructural support. We also acknowledge a graduate fellowship from COLCIENCIAS, Grant Number BPIN-2019000100020, and financial support from VIE-UIS, Grant Number: 2420 of 2018.



EVALUACIÓN DEL EFECTO DEL USO ENCAPSULADOS SOBRE LA ESTABILIDAD DE MATERIALES DE REFERENCIA DE PLAGUICIDAS EN AGUACATE

Laura V. Morales E^{a,b}., Andrés S. Salinasa, Ivonne A. Gonzaleza., Diana C. Sinuco L^b., Diego A. Ahumada F.

^aGrupo de Investigación en metrología química y biomedicina (GIMQB), Instituto Nacional de Metrología de Colombia

^bDepartamento de Química, facultad de ciencias, Universidad Nacional de Colombia

lmoralese@unal.edu.co

INTRODUCCIÓN: Un material de referencia (MR) se define 1 como un material, suficientemente homogéneo y estable con respecto a una o más propiedades, el cual se ha establecido como adecuado para su uso previsto. Por lo que, la estabilidad del material representa un desafío en el desarrollo de estos MR debido a que algunos compuestos pueden sufrir reacciones indeseables debido a diversos factores que causan cambios en el valor de la propiedad durante su almacenamiento o producción, requiriendo condiciones extremas de almacenamiento, dando cortos periodos de vigencia o, impidiendo su certificación; esta situación se refleja en la baja oferta de MR de algunos analitos 2. Un ejemplo de analitos inestables son algunos plaguicidas, los cuales pueden ser sensibles a la degradación por temperatura, luz, pH, actividad microbiana, etc., disminuyendo la posibilidad de certificar los valores de propiedad.

METODOLOGÍA: Con el propósito de desarrollar un MR de plaguicidas en aguacate, se evaluó el uso de encapsulados y su efecto sobre la estabilidad del material. Para ello, se partió de aguacates frescos, los cuales fueron procesados y fortificados con una mezcla de plaguicidas. El material se encapsuló empleando una mezcla de maltodextrina y goma arábiga y otra parte del material no se encapsuló; posteriormente los materiales fueron liofilizados, homogeneizados y envasados en botellas de 20g. La estabilidad de los materiales se evaluó mediante un diseño isócrono 3, sometiendo el material a condiciones aceleradas de 40 °C durante 4 semanas. Finalmente, se realizó la extracción empleando QuEChERS y la determinación instrumental se llevó a cabo a través de cromatografía líquida y cromatografía de gases (LC-MS/MS y GCMS). Todas las mediciones se realizaron bajo condiciones de repetibilidad (n=7). La estabilidad de los materiales fue evaluada a través de ANOVA de regresión lineal. La incertidumbre fue calculada acorde con la guía ISO35.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: En este estudio, se encontró que los plaguicidas presentes en el material encapsulado no presentaron regresión significativa para las cinéticas de orden 0, 1 y 2 ($p < 0.05$), mientras que para el caso del material sin encapsular se obtuvo una regresión significativa para un poco más del 60% de los plaguicidas. Por otro lado, se estimó la incertidumbre debida a la estabilidad del material obteniendo incertidumbres entre 1.0 % y 9.0% para el material encapsulado y entre 6.5% y 25% para el material sin encapsular. Se concluyó que el uso de encapsulados es una estrategia adecuada para proveer mayor estabilidad a MR de plaguicidas en aguacate, permitiendo mejorar las incertidumbres asociadas a la estabilidad de los materiales hasta 25 veces y con ello viabilizando la producción de nuevos materiales.

BIBLIOGRAFÍA:

- (1) International Organization for Standardization (ISO). ISO Guide 30:2015, Reference Materials — Selected Terms and Definitions. Geneva 2015.
- (2) Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM). Certified Reference Materials COMAR Database https://www.comar.bam.de/home/search_applic.php.
- (3) International Organization for Standardization (ISO). ISO GUIDE 35:2017 Reference Materials — Guidance for the Characterization and the Assessment of the Homogeneity and Stability of the Material. Geneva, Switzerland 2017.



Biosensor amperométrico basado en la inmovilización de Acetilcolinesterasa en organoarcillas aplicado a la detección de Clorpirifos.

¹Sergio Andrés Ospina Rodríguez; ²Natalia Prieto Castañeda; ³Milton Hernando Rosero Moreno
Universidad de Caldas; Universidad Nacional

INTRODUCCIÓN:

Los biosensores son dispositivos de carácter analítico conformados por un elemento de reconocimiento biológico (ERB) acoplado a un mecanismo de detección electrónico que interpreta los cambios fisicoquímicos presentados entre el analito y el ERB en tiempo real¹. Los biosensores basados en técnicas electroquímicas se han presentado en los últimos años como sistemas con alta sensibilidad para el análisis de múltiples sustancias de interés clínico y ambiental². El desarrollo de estos biosensores viene acompañado por modificaciones del elemento transductor con materiales que permitan mejorar la fijación de los ERB sin que se pierda su actividad bioquímica. Actualmente, el uso de arcillas intercaladas con compuestos orgánicos presenta una gran tendencia hacia el desarrollo de biosensores de bajo costo con alta estabilidad, sensibilidad y reproducibilidad³.

Palabras Clave: Biosensor, Acetilcolinesterasa, Ferricianuro, Cronoamperometría

METODOLOGÍA:

En el presente trabajo se intercaló la arcilla Montmorillonita con diferentes compuestos orgánicos (dimetilamina, quitosano y líquidos iónicos de metilimidazolio) para generar matrices de inmovilización de la enzima acetilcolinesterasa aplicadas a la detección de pesticidas Clorpirifos. Se realizaron estudios electroquímicos para optimizar la respuesta de los biosensores a partir de las técnicas voltamperometría cíclica (VC) y cronoamperometría (CA). Con éstas se analizaron variables como la bioafinidad, temperatura de inmovilización, tiempo de incubación, la selectividad y sensibilidad de los dispositivos. Todas las mediciones electroquímicas se realizaron empleando ferricianuro de potasio como mediador redox de la reacción aplicando un potencial de 0.4 V durante 90.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

Los resultados aquí obtenidos representan un nuevo enfoque hacia el desarrollo de sistemas biosensores de bajo costo empleando arcillas funcionalizadas con compuestos orgánicos que no presentan toxicidad para las enzimas empleadas y que mejoran los procesos de adsorción, no solo de las enzimas sino que también de los compuestos que se estén analizando, mejorando los límites de detección para el Clorpirifos, estos límites de detección van a depender de las interacciones que se presentan no solo entre la enzima y el inhibidor sino también entre el inhibidor y el soporte de inmovilización.

REFERENCIAS

1. Chen, S. Y. et al. Development of a Highly Sensitive Whole-Cell Biosensor for Arsenite Detection through Engineered Promoter Modifications. *ACS Synth. Biol.* 8, 2295–2302 (2019).
2. Xu, H.-B., Ye, R.-F., Yang, S.-Y., Li, R. & Yang, X. Electrochemical DNA nano-biosensor for the detection of genotoxins in water samples. *Chinese Chem. Lett.* 25, 29–34 (2014).
3. Suaifan, G. A. R. Y., Alhogail, S. & Zourob, M. Rapid and low-cost biosensor for the detection of *Staphylococcus aureus*. *Biosens. Bioelectron.* 90, 230–237 (2017).



DETERMINACIÓN DE ORO EN SOLUCIONES CIANURADAS POR ESPECTROFOTOMETRÍA ULTRAVIOLETA VISIBLE. MÉTODO DE PÚRPURA DE CASSIUS

Franco L1, Arbeláez L2, Ruiz V3.

lfranco@sgc.gov.co, 2 lmarbelaez@sgc.gov.co, 3 vruiiz@sgc.gov.co

Servicio Geológico Colombiano, Dirección de Laboratorios, Cali

Mayo de 2021

INTRODUCCIÓN: La aplicación de técnicas analíticas para la cuantificación del oro es relevante para conocer la eficiencia del proceso de cianuración, que, en la metalurgia extractiva, es un proceso que facilita la disolución de metales para su posterior recuperación. Una de las técnicas más empleadas es la espectrofotometría de absorción atómica (AA), sin embargo, existen otras como la espectrofotometría de luz ultravioleta visible (UV-Vis) que resulta ser una alternativa efectiva para determinar la cantidad de oro en una solución cianurada, en escenarios en los cuáles resulta costoso hacerlo mediante un equipo de absorción atómica o un espectrómetro de emisión de plasma inductivamente acoplado (ICP) (Ingeominas, 2010). De ahí surge el método de púrpura de Cassius, el cual consiste en un pigmento de color púrpura formado por las reacciones de óxido reducción del cloruro de estaño y el oro presente en la solución, generándose un complejo coloreado Au-Sn con apariencia de precipitado coloidal de oro soportado sobre dióxido de estaño (Valencia, 2013). La intensidad del pigmento púrpura observable y la absorbancia arrojada por el equipo de luz ultravioleta visible se correlaciona con la concentración de oro contenido en la solución, de manera que resulta muy práctico en el trabajo de campo. El método puede aplicarse de manera semicuantitativa al tenerse una escala con las tonalidades y hacer comparación in situ con la intensidad del color obtenido de manera práctica.

PALABRAS CLAVE: espectrofotometría de luz ultravioleta visible, púrpura de Cassius, oro, complejos.

MÉTODOS: Actualmente, la Dirección de Laboratorios del Servicio Geológico Colombiano, trabaja en la implementación de este método cuyos resultados preliminares han sido satisfactorios. Se prepararon estándares a partir de una solución patrón de oro, solución de cloruro estañoso y agua desionizada. Luego, se llevó a lectura en el espectrofotómetro de luz ultravioleta Thermo Fischer EVO 201, a una longitud de onda de 437 nm. Para la determinación en muestra de concentración conocida (48 mg/L) y dopada (15 mg/L), se adicionó solución de cianuro de sodio al 10%, y zinc para precipitar el oro bajo condiciones atmosféricas y a pH entre 9 y 11 unidades, posteriormente, se realizó el tratamiento del sobrenadante con peróxido de hidrógeno para eliminar el cianuro de forma segura, y el precipitado se llevó a calentamientos consecutivos con agua regia. Finalmente se tomó una alícuota, se agregó cloruro estañoso y se procedió a lectura en UV Vis.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN: Se logró la construcción de dos curvas de calibración para la aplicación del método de Púrpura de Cassius. La primera con concentraciones entre 0 mg/L hasta 15 mg/L obteniéndose un coeficiente de determinación (R²) de 99,3 y la segunda se construyó desde 15 mg/L hasta 50 mg/L, con un R² de 99,1. En las Figura 1. Y 2 se observa la variación de la intensidad de coloración a medida que se aumenta la concentración de oro en ambas curvas de calibración. En la Figura 3 se observa la coloración de las muestras sometidas a preparación para cuantificación en el UV-Vis. Para la muestra de 48 mg/L se obtuvo un porcentaje de recuperación del 95,8%, es decir, se cuantificaron 46 mg/L de oro. En el caso de la solución de 15 mg/L se cuantificaron 18 mg/L, valor aceptable dado que se trata de un método colorimétrico.



Figura 1. Curva de calibración púrpura de Cassius. Concentraciones de 0 mg/L, 1,0 mg/L, 1,5 mg/L, 2,5 mg/L, 3,5 mg/L, 5,0 mg/L, 10,0 mg/L, 15,0 mg/L



Figura 2. Curva de calibración púrpura de Cassius. De izquierda a derecha concentraciones de 15,0 mg/L, 20,0 mg/L, 25,0 mg/L, 30,0 mg/L, 35,0 mg/L, 40,0 mg/L, 45,0 mg/L, 50,0 mg/L



Figura 3. De izquierda a derecha. Muestra conocida diluida, blanco, muestra de 15 mg/L, muestra conocida concentrada

BIBLIOGRAFÍA

Ingeominas (2010). Técnicas mineralógicas, químicas y metalúrgicas para la caracterización de menas auríferas. Instituto Colombiano de Geología y Minería. Primera edición pp 169 - 171
Valencia, A. (2013). El oro: de la alquimia a la relatividad. Revista Colombiana de Materiales. Edición 4 pp 1-24
Entidad financiadora: Servicio Geológico Colombiano Sede Cali, Grupo de Investigación en Geometalurgia y Geoambiente para el Procesamiento de Minerales de los Depósitos en Colombia y Dirección de Laboratorios.



QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

ILECL-62

A systematic DFT study of the order of O-O bond dissociation enthalpy within a series of peroxides

Danilo J. Carmona^a, Pablo Jaquea, Esteban Vöhringer-Martinez^b

^aDepartamento de Química Orgánica y Fisicoquímica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile. Sergio Livingstone 1007, Independencia, Santiago, Chile. dcarmonaramsy@gmail.com

^bDepartamento de Físico-Química, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Concepción, Concepción, Chile.

Introduction: Peroxides play a central role in many chemical and biological processes because the low stability of the O-O bond which upon dissociation results in the production of radical species initiating these processes [1]. On the other hand, DFT methods constitute a compromise between accuracy and low computational cost, allowing to obtain conclusions with suitable physical meaning. For this reason we use them in this study to describe the O-O bond breaking by assaying the performance of a set of 64 xc functional-basis set combinations systematically chosen (16 xc functionals in combination with 4 basis sets) in reproducing the reactivity map of Figure 1, which contains all the order relations between each pair of experimental reference values of BDE (Bond Dissociation Enthalpy [2]) for a set of 14 peroxides with general formula ROOH.

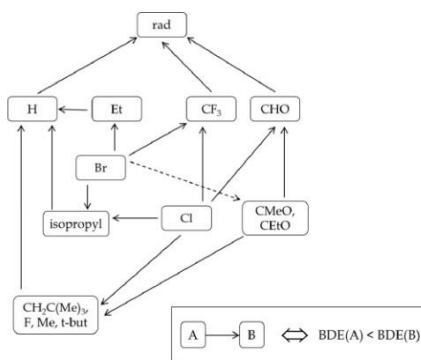


Figure 1

Methods: To exclude that any found deviation is due to factors different from the correct description of the electronic structure of the involved species, calculation of eBDE (Bond Dissociation Energy [3]) was thus performed for 4 of the peroxides with the 64 just cited DFT methods and then compared with ab initio reference values obtained at CCSD(T) level and extrapolated to the complete basis set (CBS) limit with Dunning's basis sets up to triple- ζ quality. Our results show the same trend for eBDE as in BDE calculations, which lead us to establish a necessary condition to ensure that different performance among methods arises from the electronic structure part of the calculation as previously observed for the hydrogen peroxide [3].

Preliminary Data: All functionals were able to reproduce at least 90% of the order relations, without a relevant basis set-dependence. The wrongly described relations include peroxides whose R group contains a carbonyl group and are not depending on the difference in BDE of their members, which allows us to conclude the main source of penalties relies on how these DFT methods describe carbonyl groups. ω B97X-D functional reproduces all the order relations, which matches its low absolute deviation with regard to the experimental reference values of BDE. M11 functional turned out to be the worst functional in reproducing the reactivity order (Figure 1), despite its good agreement with experimental data, which supports considering order as an additional criterion to validate DFT-based methods beyond the reproduction of absolute values of energy or other properties.

References:

- [1] Z. Rappoport, The chemistry of peroxides. Chichester: John Wiley & Sons, 2006.
- [2] Y.-R. Luo, Comprehensive handbook of chemical bond energies. CRC press, 2007.
- [3] D. J. Carmona, D. R. Contreras, O. A. Douglas-Gallardo, S. Vogt-Geisse, P. Jaque, and E. Vöhringer-Martinez, "A systematic electronic structure study of the O-O bond dissociation energy of hydrogen peroxide and the electron affinity of the hydroxyl radical," Theor. Chem. Acc., vol. 137, no. 9, p. 126, 2018.



QUÍMICA ORGÁNICA

SLCCL-298

REACCIÓN ENTRE L-CISTEÍNA Y ÁCIDO 6-MALEIMIDOHEXANOICO: CARACTERIZACIÓN DE LOS PRODUCTOS Y ESTUDIO DE LA INFLUENCIA DE pH

¹Victor Alfonso Niño Ramírez; ²Diego Sebastian Insuasty Cepeda; ³Zuly Jenny Rivera Monroy; ⁴Mauricio Maldonado Villamil
¹Universidad Nacional de Colombia

INTRODUCCIÓN

La reacción de Michael tiol-maleimido es apreciada por su versatilidad en síntesis orgánica. Algunas investigaciones indican la formación de un único producto, presencia de diastereoisómeros y/o la apertura del anillo. En esta investigación se estudió la reacción entre L-cisteína (Cys) y ácido 6-maleimidohexanoico (AMhx) en medio acuoso a diferentes pH.

PALABRAS CLAVES: Tiol, maleimido, tautómeros

MÉTODOS

Se mezclaron 14.6 mg de Cys y 28.2 mg de AMhx en agua, se ajustó el pH, variando entre 2.5 y 8.0, se agitó durante 3 min y se analizó por RP-HPLC. Los productos obtenidos a pH 6.8 fueron purificados mediante SPE y caracterizados por ¹H, ¹³C-NMR y 2D-NMR.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los perfiles cromatográficos de las reacciones entre Cys y AMhx mostraron la presencia de dos productos, no solamente uno, en todos los valores de pH estudiados. Mediante SPE fue posible enriquecer cada uno de los productos, hasta una pureza del 80%. Cada uno de estos productos de la reacción se analizaron por ESI-MS, RP-HPLC, ¹H-NMR, ¹³C-NMR y 2D-NMR. Nuestros resultados sugieren la formación de tautómeros, (i) Cys-S-AMhx, donde el producto se forma por un enlace tioéter, y (ii) Cys-NH-AMhx en el cual la unión se da por el grupo α -amino. Consideramos que el fenómeno de tautomería es un hallazgo importante ya que no se ha reportado antes para esta reacción.

REFERENCIAS

- (1) Northrop, B. et al. Thiol-Maleimide “Click” Chemistry: Evaluating the Influence of Solvent, Initiator, and Thiol on the Reaction Mechanism, Kinetics, and Selectivity. *Polym. Chem.* 2015, 6 (18), 3415–3430.
- (2) Paris, C. et al. Exploiting Protected Maleimides to Modify Oligonucleotides, Peptides and Peptide Nucleic Acids. *Molecules* 2015, 20 (4), 6389–6408.
- (3) Lahnsteiner, M. et al. Improving the Stability of Maleimide–Thiol Conjugation for Drug Targeting. *Chem.- A Eur. J.* 2020, 26 (68), 15867–15870.
- (4) Insuasty, D. et al. Synthetic Peptide Purification via Solid-Phase Extraction with Gradient Elution: A Simple, Economical, Fast, and Efficient Methodology. *Molecules* 2019, 24 (7).



QUÍMICA INORGÁNICA

SLDCL-37

SÍNTESIS, ESTUDIOS ESPECTROSCÓPICOS, ESTRUCTURALES Y CÁLCULOS COMPUTACIONALES DE ALGUNOS NITROSILOS DE METALES DE TRANSICIÓN

¹Diana Castañeda Trujillo; ²Carlos Franca; ³Oscar Piro; ⁴Jorge Guida

Universidad del Quindío y Universidad Nacional abierta y a distancia; Universidad Nacional de la Plata-CEQUINOR; Universidad Nacional de la Plata-IFLP; UNLP-CEQUINOR

INTRODUCCIÓN: El trabajo presentado aquí se centró en la preparación y estudio de complejos inorgánicos nitrosilados, de interés intrínseco, biológico y de potencial aplicación tecnológica. Los siguientes complejos enumerados a continuación, fueron sintetizados por primera vez: $K_3[Re(CN)_5NO]$, $fenH[Cr(CN)_3fenNO] \cdot 2fen \cdot 3H_2O$, $K[Cr(CN)_3fenNO] \cdot 2fen \cdot H_2O$, $NaK[RuF_5NO]$ y RuX_3LNO con $X = Cl, I, F$ y $L = fenantrolina$. Se estudiaron las propiedades de estos compuestos mediante las espectroscopias de Infrarrojo, Raman, UV-Visible, y Resonancia Magnética Nuclear. Además se resolvieron las estructuras cristalinas de la mayoría de los compuestos mediante la utilización de la técnica de difracción de rayos x de monocristales. Fue de nuestro interés el reemplazo sistemático de ligantes para estudiar cómo se modifica la naturaleza de los enlaces del óxido nítrico (NO), que conlleva a un cambio en su propiedad y reactividad, relevantes para una potencial aplicación biológica de estos complejos. En todos los casos los estudios fueron apoyados por cálculos de química computacional mediante la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). También se realizaron estudios complementarios de estabilidad térmica a través de las técnicas de análisis termogravimétrico y termodiferencial, realizado solo en algunos complejos.

PALABRAS CLAVES: infrarrojo, Raman, UV-Visible, resonancia magnética nuclear, rutenio, renio, cromo, ligando, complejos de coordinación, nitrosil (NO), TGA, DTA.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Se sintetizaron nuevos complejos nitrosilados conteniendo fenantrolina como ligante de metales de transición pertenecientes a diferentes grupos. Como estos elementos tienen configuraciones electrónicas diferentes, los complejos resultantes exhibieron propiedades distintas. Las síntesis, tenían en común la incorporación del ligante fenantrolina, pero partiendo de reactivos con ligantes diferentes. En el caso del cromo, se partió del $K_3[Cr(CN)_5NO]$, pero en los complejos de rutenio e iridio se partió de los derivados halogenados. En el caso de los complejos de cromo, tanto reactivos como productos obtenidos, presentaban la configuración electrónica d^5 de bajo espín y, en consecuencia, eran paramagnéticos, mientras que el resto de los complejos estudiados eran diamagnéticos d^6 . El listado de los complejos sintetizados se muestra en la Ilustración 1

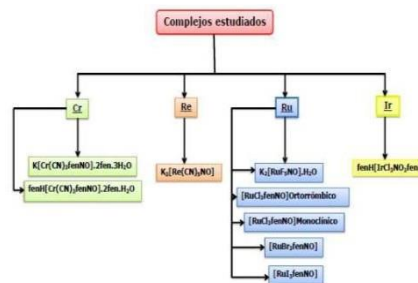


Ilustración 1. Complejos

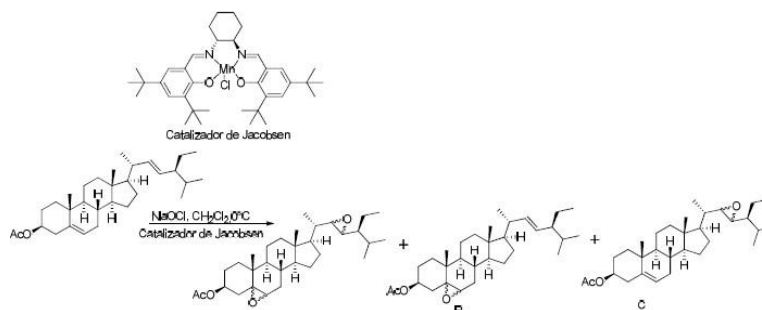
REFERENCIAS:

- (1) Mata, C.; Martínez, S.; Olivia, M.; Leyva, S.; Carmen, M.; Nieto, G.; María, R.; Negrete, A.; Mata, P. C.; Sánchez, C.; et al. El Óxido Nítrico : Una Molécula Biológica Llena de Contrastes. Acta universitaria 2010, 20 (3), 24–33.
- (2) George B. Richter-Addo, Peter Legzdins, J. B. Introduction : Nitric Oxide Chemistry. Chemical Reviews 2002, 102 (4), 857–859.
- (3) Moncada, Salvador.; Palmer, Richard M.; Higgs, E. A. The Discovery of Nitric Oxide as the Endogenous Nitrovasodilator. Hypertension 1988, 12 (4), 365–372.

Oxidación de acetato de colesterilo vía TAED-peróxido y catalizador de Jacobsen

¹Herman Gabriel Astudillo Campo; ²Olga lucia Hoyos Saavedra
Universidad del Cauca

INTRODUCCIÓN: Los derivados de estructuras esteroidales oxigenadas, presentan gran importancia comercial debido a su variada y potente actividad biológica como antiinflamatorios, hormonas, neuroesteroides; fitorreguladores y anticancerígenos. Un núcleo simple para la síntesis de epóxidos bioactivos es el colesterol, la reacción puede llevarse a cabo con perácidos o con catalizadores organometálicos.



PALABRAS CLAVE: epoxidación de colesterilo, Jacobsen

METODOLOGÍA: El acetato de colesterilo se epoxidó siguiendo dos metodologías: con peróxido de hidrógeno catalizada en medio ácido con TAED1 y utilizando el catalizador de Jacobsen2 (previamente sintetizado) con hipoclorito de sodio como oxidante. Los productos de reacción se analizaron mediante UPLC-MS, FTIR, UV-vis, y RMN, comparándolos para cada método.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: El ligando y el catalizador de Jacobsen se caracterizaron por técnicas espectroscópicas y voltamperometría cíclica, presentando las señales típicas de FTIR para el grupo imino del ligando, y el complejo a menor frecuencia, así como las señales metal-oxígeno, y metal-nitrógeno. Los experimentos en VC indican procesos de oxidación y reducción de un electrón para la formación de radicales iminio, también se observó reversibilidad para los procesos de oxidación-reducción del centro metálico del catalizador. Los resultados coinciden con lo reportado en la literatura³. Los productos obtenidos en la epoxidación del sustrato, fueron comparados tanto para el sistema TAED-peróxido, como con el catalizador de Jacobsen. Los resultados indican que ambas metodologías son útiles para la obtención de los epóxidos, sin embargo, también se presentaron algunos productos de oxidación secundarios. Actualmente, se realiza HPLC-preparativo para purificar los compuestos y caracterizarlos mediante experimentos RMN bidimensionales.

REFERENCIAS

1. Barriuso, B.; Ansorena, D.; Astiasarán, I., Oxysterols formation: A review of a multifactorial process. *The Journal of Steroid Biochemistry and Molecular Biology* **2017**, 169, 39-45.
2. Bermudez, John H.; Rojas, G.; Martin-Franco, J.; Benitez, R., Easy Epoxidation of Monoterpenes from Common Starting Materials. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, **2020**, 31 (5), 1086-1092.
3. Portilla-Zúñiga, O.; Mosquera-Ramírez, M. F.; Martín-Franco, J.; Hoyos-Saavedra, O. L.; Cuervo- Ochoa, G., Epoxidation of Neral/Geranial Using a Jacobsen-Katsuki Mn catalyst by Chemical and Electrochemical Methods. *Journal of the Mexican Chemical Society* **2016**, 60 (1), 3-12.



Estabilidad de partículas obtenidas a partir de complejos de coordinación de quitosano – Fe(III) en condiciones fisiológicas simuladas

¹Claudia Elena Echeverri Cuartas, ²Natalia Andrea Agudelo Pérez, ³Carmina Gartner Vargas
¹Universidad Eia - Universidad De Antioquia; ²Universidad De Antioquia

INTRODUCCIÓN

En la actualidad no existe un consenso con respecto a la estabilidad en condiciones fisiológicas de las partículas basadas en quitosano obtenidas por el método de gelación ionotrópica usando tripolifosfato. El propósito de este estudio fue obtener y evaluar la estabilidad de complejos de coordinación de Q-Fe(III).

PALABRAS CLAVES: Quitosano, tripolifosfato, Fe(III)

MÉTODOS

Obtención de compuestos de quitosano–polietilenglicol y quitosano–ácido fólico Obtención de complejos de coordinación de quitosano–polietilenglicol–ácido fólico–Fe(III) Preparación de partículas a partir de complejos basados en quitosano–Fe(III) Análisis morfológico y de tamaño por TEM y DLS de los complejos y las partículas Evaluación de la estabilidad por turbidimetría y DLS Resultados y Conclusiones Se obtuvieron los compuestos de quitosano–polietilenglicol (Q-PEG) y quitosano–ácido fólico (Q-AF), usando el método de acoplamiento con carbodiimida, lo cual se pudo verificar por H-RMN y espectroscopía UV-Vis, respectivamente. Previo a la formación de los complejos de coordinación basados en quitosano–Fe(III), se identificó que era necesario establecer la concentración de Fe(III) y su tiempo de hidrólisis. Por tanto, se definió una concentración de 0,25 mg/mL de cloruro de hierro, un tiempo de hidrólisis de 24 h y una relación molar de Fe(III):glucosamina de 0,23:1 para formar los complejos. Sin embargo, por TEM se evidenció que los complejos eran heterogéneos y fue necesario adicionar TPP. Lo anterior condujo a la formación de partículas homogéneas con tamaños cercanos a los 200 nm. Finalmente, al mezclar la dispersión de partículas con PBS (1×, pH=7,4 y 37 °C), se observó que las partículas tenían una mejor estabilidad al compararse con aquellas sin Fe(III).

REFERENCIAS

Huang, Y.; Lapitsky, Y. On the kinetics of chitosan/tripolyphosphate micro- and nanogel aggregation and their effects on particle polydispersity. *J. Colloid Interface Sci.* 2017, 486, 27-37. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2016.09.050>.
Giacalone, G.; Hillaireau, H.; Capiou, P.; Chacun, H.; Reynaud, F.; Fattal, E. Stabilization and cellular delivery of chitosan-polyphosphate nanoparticles by incorporation of iron. *J. Control. Release* 2014, 194, 211-219. <https://doi.org/10.1016/j.jconrel.2014.08.022>.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN ESTRUCTURAL Y ELECTRÓNICA DE COMPLEJOS DE ORO (III) CON LIGANDOS NHC DERIVADOS DE LA ACRIDINA COMO POTENCIALES AGENTES ANTICANCERÍGENOS

¹Dilan Ballesteros Peinado; ¹María Ospina Castro; ²Renso Visbal Acevedo; ³Jhon Zapata Rivera
¹Universidad Del Atlántico; ²Universidad Del Valle; ³Universidad De Los Andes

INTRODUCCIÓN

Los complejos de oro se presentan como grandes alternativas que llevan a la preparación de compuestos biológicamente activos y que al mismo tiempo sean menos perjudiciales para la salud humana. Estos presentan una estabilidad relativamente alta en medios fisiológicos y entre los metales de transición es quizás el menos perjudicial.

PALABRAS CLAVES: ComplejosDeOro(III), NHC, Acridina, DFT

METODOS

Fase I: Síntesis y caracterización estructural de los complejos de Au(III)-NHC derivados de la acridina, haciendo uso de técnicas analíticas tales como, RMN, UV-Vis y DRX de monocristal. Fase II: Aplicación de la DFT y Cálculos “Time Dependent DFT” (TD-DFT).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Luego de ser sintetizados los complejos de Au(III)-NHC derivados de la acridina (complejo 2, 3 y 4) se caracterizaron estructuralmente por RMN, donde los espectros de 2, 3 y 4 muestran los protones de la acridina, del grupo metilo y la presencia de un doblete correspondiente a los protones imidazolío de NHC con rma la formación de 2. También, para 3 se observó una mezcla de isómeros cis y trans en relación a 2, mientras que el espectro para 4 no se observaron cambios signi_cativos con relación a 2, pero la aparición de multipletes y tripletes en el espectro de ¹F NMR de 4, con_rma la presencia del contraanión. Además, el análisis por DRX evidencia que las estructuras de 2,3 y è(optimizado) son mononuclear con geometría cuadrado planar y fuerte coordinación entre NHC-Au. Finalmente, el espectro UV-Vis de los complejos muestran bandas anchas similares que van desde 250 a 360 nm.

REFERENCIAS

- (1) Liu, W.; Gust, R. *Coord. Chem. Rev.* 2016, 329 (September), 191–213.
- (2) Zou, T.; Lum, C. T.; Lok, C. N.; Zhang, J. J.; Che, C. M. *Chem. Soc. Rev.* 2015, 44 (24), 8786–8801.
- (3) Visbal, R.; Fernández-Moreira, V.; Marzo, I.; Laguna, A.; Gimeno, M. C. *Dalt. Trans.* 2016, 45 (38), 15026–15033.
- (4) Gimeno, M. C.; Laguna, A.; Visbal, R. *Organometallics* 2012, 31 (20), 7146–7157.
- (5) Visbal, R.; Laguna, A.; Gimeno, M. C. *Chem. Commun.* 2013, 49 (50), 5642–5644.
- (6) Elangovan, A.; Chiu, H.; Yang, S.; Ho, T. 2004, 3113–3118.



ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

SLFCL-113

HERRAMIENTAS BIOINFORMÁTICAS, UNA OPORTUNIDAD PARA LA ENSEÑANZA DE LA BIOQUÍMICA EN CONTEXTO

Rodrigo Rodríguez Cepeda; Universidad Pedagógica Nacional

INTRODUCCIÓN

En el marco del proyecto de investigación DQU-032-S-21 se planteó la necesidad de proponer estrategias para la enseñanza de la bioquímica, mediada por herramientas bioinformáticas, que se aparten de las metodologías memorísticas con transmisión de conocimiento, lo cual causa desinterés y bajo rendimiento académico por parte de los estudiantes

PALABRAS CLAVES : Enseñanza, contexto, bioquímica, bioinformática

MÉTODOS

La metodología implementada se enmarca en los lineamientos cuasiexperimentales sin grupo control, se planearon actividades didácticas contextualizadas en el virus Sars Cov2, tales como: instrumentos de

evaluación del rendimiento académico, análisis de videos, lectura de artículos y uso de recursos bioinformáticos, entre otros. La intervención se realizó con estudiantes universitarios

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

La intervención didáctica evidenció que los estudiantes tienen algunas dificultades conceptuales como son: enlace peptídico, estructuras de las proteínas, distribución de carga o punto isoeléctrico, entre otros. Igualmente no se observó una relación entre conceptos, que denotan conocimiento integrado que pueda ser utilizado para explicar fenómenos. De esta manera, las actividades planeadas en el contexto del COVID 19, permitió generar el interés de los estudiantes por profundizar en temas como el papel de las proteínas del virus, el mecanismo de infección en una célula sana y el proceso de réplica del virus. Aspectos que se convierten en una oportunidad para explicar algunos conceptos asociados a las proteínas, como los mencionados anteriormente. Con la expectativa generada, se emplearon diferentes actividades, dentro de las cuales se destaca el uso de herramientas bioinformáticas como RCSB PDB, Pubchem, Psipred, Uppsala server o Pymol, las cuales facilitaron la comprensión de conceptos e interpretación de datos.

REFERENCIAS

H. Berman, J. Westbrook, Z. Feng, G. Gilliland, T. Bhat, H. Weissig, I. Shindyalov and P. Bourne, "The Protein Data Bank," *Nucleic Acids Research*, vol. 28, no. 1, pp. 235-242, 2000.

D. Buchan and D. Jones, "The PSIPRED Protein Analysis Workbench: 20 Years on," *Nucleic Acids Research*, vol. 47, no. W1, pp. 402-407, 2019.

A. Lohning, S. Hall and S. Dukie, "Enhancing Understanding in Biochemistry Using 3D Printing and Cheminformatics Technologies: A Student Perspective," *Journal of Chemical Education*, vol. 96, no. 11, pp. 2497-2502, 2019.



QUÍMICA DE MATERIALES, POLÍMEROS Y NANOTECNOLOGÍA

SLGCL-115

OBTENCIÓN DE FIBRAS BIOPOLIMÉRICAS CON ESTRUCTURA NÚCLEO/PARED Y ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA MEDIANTE ELECTROHILADO

^{1,2,3}Cristian Patiño Vidal; ^{1,2,3,4}Eliezer Velásquez; ^{1,2,3,4}María José Galotto; ^{1,2,3,4}Carol López de Dicastillo
¹Universidad de Santiago de Chile (USACH), ²Centro de Innovación en Envases y Embalajes (LABEN), Chile. ³Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y Nanotecnología (CEDENNA), Chile; ⁴Facultad Tecnológica, Departamento de Ciencia y Tecnología de los Alimentos (DECYTAL), Chile.

INTRODUCCIÓN

El electrohilado coaxial es una novedosa herramienta que permite desarrollar nuevos materiales de envase activo para alimentos ¹. Esta tecnología permite encapsular compuestos como el etil lauroil arginato (LAE) en fibras con una estructura coaxial (núcleo/pared) con la finalidad de disminuir su velocidad de liberación y obtener una actividad antimicrobiana prolongada ².

PALABRAS CLAVES : electrohilado, LAE, biopolímero, alimentos.

MÉTODOS: Fibras biopoliméricas antibacterianas PLA-LAE/PLA se obtuvieron mediante electrohilado coaxial. La morfología de las fibras se evaluó mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), sus propiedades térmicas mediante análisis termogravimétricos (TGA), y la liberación del LAE desde las fibras hacia simulantes de alimentos se analizó mediante cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Las fibras coaxiales PLA-LAE/PLA fueron uniformes y mostraron un diámetro externo e interno de 0,61 y 0,35 micras, respectivamente. La incorporación del LAE en el núcleo de las fibras disminuyó la estabilidad térmica, transición vítrea y cristalinidad del PLA. Las cinéticas de liberación del LAE en un simulante acuoso y graso de alimentos fueron similares, sin embargo, la concentración máxima de LAE liberado fue más alta en el simulante graso. A pesar de ello, las concentraciones máximas del LAE liberado en ambos simulantes superaron las concentraciones mínimas necesarias del compuesto activo para inhibir el crecimiento de bacterias tales como *Escherichia coli*, *Listeria innocua*, *Salmonella typhimorium* y *Staphylococcus aureus*. Por lo tanto, estos resultados demuestran que las fibras coaxiales PLA-LAE/PLA pueden ser utilizadas como un potencial material biopolimérico para el desarrollo de envases plásticos con actividad antibacteriana.

REFERENCIAS

- (1) İnanç Horuz, T.; Belibağlı, K. B. Nanoencapsulation by Electrospinning to Improve Stability and Water Solubility of Carotenoids Extracted from Tomato Peels. *Food Chem.* 2018, 268, 86–93. <https://doi.org/10.1016/J.FOODCHEM.2018.06.017>.
- (2) Zhang, Y.; Zhang, Y.; Zhu, Z.; Jiao, X.; Shang, Y.; Wen, Y. Encapsulation of Thymol in Biodegradable Nanofiber via Coaxial Electrospinning and Applications in Fruit Preservation. *J. Agric. Food Chem.* 2019, 67 (6), 1736–1741. <https://doi.org/10.1021/acs.jafc.8b06362>.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UN AGENTE COAGULANTE A PARTIR DEL ALMIDÓN DE CÁSCARA DE PLÁTANO (*Musa paradisiaca*), PARA SU USO EN TRATAMIENTO DE AGUAS

¹Henry Adolfo Lambis Miranda; ²Jorgelina C. Pasqualino; ³Jorge R. Puello Silva ; ⁴Camilo Cortes Perez; ⁵Leymer Perez.
¹Fundación Universitaria Tecnológico Comfenalco; ²Universidad Tecnológica de Bolívar

INTRODUCCIÓN

El agua es una sustancia esencial , este trabajo busca sintetizar un coagulante a partir de un biopolímero, como lo es la cáscara de plátano (*Musa paradisiaca*), aprovechando su capacidad de desestabilizar las partículas coloidales que se encuentran presentes en el agua, teniendo como consecuencia una reducción de la turbidez.

PALABRAS CLAVES: Starch, water, adjuvant, coagulation

MÉTODOS

Método de extracción: El método de extracción húmedo descrito por Pasqualino et al. (2017) Modificación Química: Para la modificación química del almidón, se utilizó un tratamiento de acetilación, basado en el trabajo de SULBARÁN(2013) .

Grados de sustitución: Determinar el grupo acetilo, mediante la metodología de Wurzburg, (1986).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

- Se modificó el almidón de cáscara de plátano (*Musa paradisiaca*) por medio de una reacción de acetilación, haciendo uso del anhídrido acético. Lo anterior se indica por medio de los espectros infrarrojos donde se logra detectar un cambio en el espectro en relación al del almidón nativo y a partir del grado de sustitución.
- El análisis estadístico de varianza ANOVA para el primer diseño experimental muestra una dependencia significativa en lo que se refiere a la reducción de Turbidez, dando lugar al carácter de importancia que tiene el grado de sustitución por medio de acetilación del almidón nativo. Para el segundo diseño experimental se muestra una incidencia significativa y de positividad, con respecto a los dos niveles (alto y bajo) en lo que se refiere a la dosificación en base seca de la relación Al2 (SO4)3 y Almidón modificado, en el efecto de minimizar la turbidez.

REFERENCIAS

1. Lopez-Diago, L., Castillo, K., Mejia, M. V., Pasqualino, J., Meza-Catellar, P., & Lambis, H. (2018). Evaluation of the Production of Starch from Bitter Cassava (*Manihot utilisima*) using Different Methodologies. *ChemicalEngineering Transactions*, 65, 613-618.
<https://www.cetjournal.it/index.php/cet/article/view/CET1865103> (January 2020)
2. Contreras-Andrade, I., Licea-Claverie, A., Sarmiento-Sánchez, J. I., Aguilar-Aguirre, M. G., Quinonez-Angulo, M. P., & Picos-Corrales, L. A. (2015). Synthesis of flocculants based on responsive polymers and its use in solids removal from river water and wastewater. *Revista mexicana de ingeniería química*, 14(2), 415-427.
http://www.scielo.org.mx/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1665-27382015000200018 (June 2020)
3. Standard Practice for Coagulation-Flocculation Jar Test of Water. ASTM D2035-13.
<https://www.astm.org/DATABASE.CART/HISTORICAL/D2035-13.htm> (accessed: Feb 2020).



SÍNTESIS Y RESISTENCIA A LA CORROSIÓN DE OXINITRUIROS DE ZIRCONIO-CERIO

¹Brian Felipe Mendez Bazurto; ¹Gloria Carolina Numpaque; ¹Gloria Ivonne Cubillos González
¹Universidad Nacional de Colombia

INTRODUCCIÓN

Películas delgadas de oxinitruros de cerio-zirconio (Ce-ZrOxNy) incrementan la resistencia a la corrosión del acero inoxidable 316L en uno o dos órdenes de magnitud, en función del flujo de nitrógeno empleado como gas reactivo en la síntesis de la película.

PALABRAS CLAVES: Cerium-zirconium oxynitride, sputtering, corrosion

MÉTODOS

A partir de un blanco concéntrico de Ce-Zr se depositaron sobre AISI 316L películas de CeOxNy-ZrOxNy mediante sputtering (RF). Su morfología se evaluó por microscopía electrónica de barrido (SEM), la estructura por difracción de rayos x (DRX) y la resistencia a la corrosión mediante las curvas polarización potenciodinámica.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Dada la diferencia de potencial y la presencia de oxígeno en la cámara de sputtering, por ser el cerio un metal pirofórico, el blanco entra en ignición y se forma óxido de cerio en el perímetro del mismo. La formación de óxido, trae como consecuencia la baja adherencia y posterior delaminación de las películas de CeOxNy depositadas sobre AISI 316L. Películas delgadas de CeOxNy-ZrOxNy con buena adherencia al sustrato y escasas imperfecciones, se depositaron sobre una capa buffer Ni-ZrO2 previo al depósito de la película delgada y una configuración de blanco constituida por un anillo de zirconio alrededor de un disco de cerio. La evaluación de la resistencia a la corrosión de las películas así depositadas sobre acero inoxidable AISI 316L, de acuerdo a las condiciones de depósito incrementa la resistencia a la corrosión del acero en uno o dos órdenes de magnitud, en comparación con el acero desnudo.

REFERENCIAS

1. Li, S.J; Lin, B.X; Yan, C.H; Zhang, Y.W. Urea-based hydrothermally derived homogeneous nanostructured Ce_{1-x}Zr_xO₂ (x = 0–0.8) solid solutions: a strong correlation between oxygen storage capacity and lattice strain.
2. J Phys Chem B. 2004. 108, 33. 12481–12488 Alfonso J.E; Bethencourt, M; Cubillos G.I; Marco J.F; Olaya J.J. The influence of deposition temperature on microstructure and corrosion resistance of ZrOxNy/ZrO2 coatings deposited using RF sputtering. Applied Surface Science. 2014. 309. 181–187
3. Hu, Y; Huang, J.H; Yu, G. Structure evolution and mechanical properties of ZrN_xO_y thin film deposited on Si by magnetron sputtering. Surface & Coatings Technology. 2011. 205. 5093–5102



SLGCL-229

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y MAGNÉTICAS DE LOS GRANATES $\text{Sm}_3\text{-xGdxFe}_5\text{O}_{12}$ ($x = 0.0\text{--}1.0$)

¹Angela María Morales Rivera; ²Julio Elio Rodríguez López; ³Julián Andrés Munevar Cagigas; ⁴Elisa Baggio Saitovitch; ⁵Luis Carlos Moreno Aldana; ⁶Carlos Arturo Parra Vargar.

¹Universidad Nacional de Colombia; ²Universidade Federal Do ABC; ³Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas; ⁴Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia.

INTRODUCCIÓN

La sustitución catiónica en los materiales tipo granate afecta las propiedades magnetoeléctricas y ópticas, otorgando diversas aplicaciones como sensores para dispositivos electrónicos, partes para dispositivos de almacenamiento de datos y burbujas magnéticas.^{1,2} Además, las rutas de química húmeda permiten la disminución de la temperatura y el tiempo de síntesis.³

PALABRAS CLAVES :Granate, estado-sólido, Citrato, Ferrimagnético

MÉTODOS:

Se sintetizaron granates $\text{Sm}_3\text{-xGdxFe}_5\text{O}_{12}$ con $x = 0.0\text{--}1.0$ mediante los métodos de reacción de citrato y estado sólido. Los materiales obtenidos se caracterizaron a través de difracción de rayos X (DRX), refinamiento de Rietveld, microscopía electrónica de barrido (MEB), espectroscopía Raman, magnetometría de muestra vibrante y espectroscopía Mössbauer.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

El análisis estructural mostró que la sustitución de Gd^{3+} permite obtener una fase pura con un valor de x de 1,0 (33,33%). Los granates obtenidos presentaron una estructura cristalina cúbica y un grupo espacial $\text{Ia}\bar{3}\text{d}$ (230). El uso del método del citrato permitió obtener materiales con tamaños de partícula menores, H_c menor a 90 Oe y M_r mayor a $0.33 \mu\text{B}/\text{f.u.}$ El carácter ferrimagnético fue confirmado por espectroscopia de Mössbauer, que mostró los diferentes sitios cristalográficos de Fe y sus campos hiperfinos. La sustitución de Gd^{3+} por Sm^{3+} modificó la respuesta magnética del granate $\text{Sm}_3\text{Fe}_5\text{O}_{12}$, generando una disminución en los H_s , H_c y M_r . Finalmente, los resultados muestran que el uso del método del citrato posibilita la aplicación de estos granates en transformadores e interruptores de microondas, con una importante disminución de los costes de producción.

REFERENCIAS

- (1) Wu, H. R.; Ti, R. X.; Xu, Y.; Shan, Y. Z. Dielectric Property of $\text{Y}_2.7\text{La}_{0.3}\text{Fe}_5\text{O}_{12}$ Ceramics. *Physica B: Condensed Matter* 2018, 530, 15–18.
- (2) Kirihara, A.; Uchida, K.-ichi; Kajiwara, Y.; Ishida, M.; Nakamura, Y.; Manako, T.; Saitoh, E.; Yorozu, S. Spin-Current-Driven Thermoelectric Coating. *Nature Materials* 2012, 11 (8), 686–689.
- (3) Akhtar, M. N.; Sulong, A. B.; Ahmad, M.; Khan, M. A.; Ali, A.; Islam, M. U. Impacts of Gd–Ce on the Structural, Morphological and Magnetic Properties of Garnet Nanocrystalline Ferrites Synthesized via Sol-Gel Route. *Journal of Alloys and Compounds* 2016, 660, 486–495.



DEPOSICIÓN POR LÁSER PULSADO DE PELÍCULAS DELGADAS DE TiO₂ Y SU FUNCIONALIZACIÓN CON ÁCIDO FÓLICO

¹Linda Esperanza Bertel Garay; ²José Miguel García Martín; ³Rogelio Ospina; ⁴David A. Miranda.

¹Universidad Industrial de Santander; ²Instituto de Micro y Nanotecnología, IMN-CNM, CSIC (CEI UAM+CSIC)

INTRODUCCIÓN

Las películas delgadas de TiO₂ funcionalizadas con biomoléculas se han utilizado en la fabricación de biosensores electroquímicos, altamente sensibles y selectivos (Nadzirah, 2020), o como implantes biocompatibles (Liu, 2017). Los nanomateriales funcionalizados con ácido fólico son bioconjugados potenciales en la detección o el tratamiento fototérmico del cáncer (Guselnikova, 2019).

Palabras Claves: TiO₂ Nanomateriales PLD Folato

MÉTODOS

Las películas delgadas de TiO₂ se obtuvieron mediante la deposición por láser pulsado bajo una presión de 4.6 Pa de oxígeno, a diferentes valores de fluencia de la luz láser (1.3 - 2.5 J/m²), durante 5 min de depósito. Las películas se caracterizaron por XPS, AFM y espectroscopía Raman.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

El análisis XPS permitió confirmar la composición química de las películas delgadas de TiO₂. Se observó, en las imágenes AFM de las películas obtenidas, que a una mayor influencia de luz láser el espesor de la película y la rugosidad RMS aumentan. El análisis AFM de las películas funcionalizadas mostraron una disminución de la rugosidad, con respecto a la película sin funcionalizar, indicando que las moléculas de ácido fólico podrían haberse ubicado en los valles de la película. Uno de los principales resultados obtenidos fue la identificación, a partir del análisis de los espectros Raman, de la interacción del ácido fólico con la superficie de TiO₂ a través del anillo de pteridina. De esta manera, la metodología reportada permite obtener una película delgada de TiO₂ funcionalizada con ácido fólico que puede ensayarse en investigaciones futuras en la detección de células cancerosas.

REFERENCIAS

- (1) Nadzirah, S.; Gopinath, S. C. B.; Parmin, N. A.; Hamzah, A. A.; Mohamed, M. A.; Chang, E. Y.; Dee, C. F. State-of-the-Art on Functional Titanium Dioxide-Integrated Nano-Hybrids in Electrical Biosensors. *Crit. Rev. Anal. Chem.* 2020, 0 (0), 1–12.
- (2) Liu, L.; Bhatia, R.; Webster, T. J. Atomic Layer Deposition of Nano-TiO₂ Thin Films with Enhanced Biocompatibility and Antimicrobial Activity for Orthopedic Implants. *Int. J. Nanomedicine* 2017, 12, 8711–8723.
- (3) Guselnikova, O.; Dvorankova, B.; Kakisheva, K.; Kalachyova, Y.; Postnikov, P.; Svorcik, V.; Lyutakov, O. Rapid SERS-Based Recognition of Cell Secretome on the Folic Acid-Functionalized Gold Gratings. *Anal. Bioanal. Chem.* 2019, 411 (15), 3309–3319



QUÍMICA DE PRODUCTOS NATURALES Y FARMACÉUTICOS

SLHCL-152

EVALUACIÓN DE CAPACIDAD ANTIOXIDANTE DE EXTRACTOS VEGETALES PRODUCIDOS A PARTIR DE RESIDUOS AGROINDUSTRIALES GENERADOS EN COLOMBIA.

^{1,2}Julian Mauricio Guerrero Rodriguez; ¹Edier Felipe Gómez Gómez; ¹Gina Yesenia Sampayo Velásquez; ^{1,2}José Gabriel López Ortiz, ¹Debora Alcida Nabarlatz.

INTRODUCCIÓN

Las frutas y verduras contienen compuestos que destacan, entre otras cosas, por sus propiedades antioxidantes. Generalmente es consumida la pulpa, mientras que el resto de material vegetal es desechado. El objetivo de este estudio fue evaluar la capacidad antioxidante de los extractos acuosos producidos a partir de residuos agroindustriales generados en Colombia.

PALABRAS CLAVES: Valorización Residuos. Agroindustriales Capacidad. Antioxidante Extractos. Vegetales

MÉTODOS

Se caracterizaron los extractos por el método de Miller, para determinar azúcares reductores, y el método de Folin-Ciocalteu, para cuantificar el contenido de polifenoles totales. Igualmente, se evaluó la capacidad antioxidante mediante el procedimiento de Oyaizu y la metodología de Benedict (modificado), determinando el poder reductor de Fe³⁺ y de Cu²⁺, respectivamente.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

En el caso de la cuantificación de azúcares reductores, la mayor concentración de estos se presentó en el extracto de cáscara de plátano maduro mediante extracción Soxhlet (0.457 ± 0.05 mg glucosa/ml). En el caso de contenido de polifenoles totales, la mayor concentración se obtuvo del extracto de cáscara de mandarina mediante ambas extracciones, soxhlet y maceración (0.128 ± 0.02 mg equivalente ácido gálico/ml y 0.125 ± 0.01 mg equivalente ácido gálico/ml, respectivamente). En la evaluación del poder reductor de Fe³⁺ el extracto de la cáscara de mandarina obtuvo los mayores valores (0.432 ± 0.11 mg equivalente ácido gálico/ml para soxhlet y 0.497 ± 0.05 mg equivalente ácido gálico/ml para maceración). Finalmente, el material vegetal con el mayor poder reductor de Cu²⁺ fue el extracto de semilla de mora (0.147 ± 0.023 g CuSO₄ reducidos/g extracto y 0.134 ± 0.021 g CuSO₄ reducidos/g extracto, obtenidos por soxhlet y maceración, respectivamente).

REFERENCIAS

- (1) E. Moreno, B. L. Ortiz, and L. P. Restrepo, "Contenido total de fenoles y actividad antioxidante de pulpa de seis frutas tropicales," Rev. Colombia. Química, 2015, doi: 10.15446/rev.colomb.quim.v43n3.53615.
- (2) GOBERNACIÓN DE SANTANDER, EVALUACIONES AGROPECUARIAS MUNICIPALES, and UNIVERSIDAD SERGIO ARBOLEDA, "Evaluaciones Agropecuarias Departamento de Santander 2016," EVA 2016, p. 133, 2016.
- (3) Fondo Nacional de Fomento Hortifrutícola - FNF and Asociación Hortifrutícola de Colombia - ASOHOFrucol, "Balance del Sector Hortifrutícola," p. 16, 2019.



OBTENCIÓN DE BIOCARBONES A PARTIR DEL PROCESO DE CARBONIZACIÓN HIDROTÉRMICA (HTC) DE LOS RESIDUOS AGROINDUSTRIALES DE PLÁTANO Y CAÑA DE AZÚCAR

¹Jenny M Velez, ¹Lina M. Orozco, ¹Luz Angela Veloza, ²Michael Renz.

¹Universidad Tecnológica de Pereira, Grupo Polifenoles, Facultad de Tecnología, Colombia. ²Instituto de Tecnología Química, Universitat Politècnica de València-Consejo Superior de Investigaciones Científicas (UPV - CSIC), España.

INTRODUCCIÓN:

En Colombia, el bagazo de caña de azúcar y la cáscara de plátano son residuos generados a gran escala 1. Una alternativa ambientalmente amigable para convertir estos residuos es usar el proceso HTC, en el que la biomasa húmeda se transforma en un producto acuoso y un biocarbón con poder calorífico 2.

PALABRAS CLAVES: residuos, biocarbón, cenizas, combustible

MÉTODOS:

El proceso HTC se llevó a cabo a 215 °C, durante 2 y 4 horas y bajo presión autógena (21 bar). Se determinaron las propiedades fisicoquímicas de los residuos agroindustriales frescos y de los biocarbones en términos de contenido de humedad, cenizas, carbón, metales y estabilidad térmica.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

Bajo las condiciones de reacción, se obtuvo para la cáscara del plátano un contenido de biocarbón superior al bagazo de caña con valores entre 65–70% y 58–64% respectivamente, basado en el biocarbón seco y libre de cenizas. De otro lado, el contenido de carbón fijo se duplicó respecto al material de partida hasta alcanzar valores entre 35%–40% para la cáscara de plátano en combinación con un contenido de cenizas por debajo de un 6%. Para el bagazo, el carbón fijo aumentó desde 15% al 30% aproximadamente. Los resultados de caracterización demuestran que la carbonización hidrotérmica es un proceso viable para la producción de biocarbón con potencial aplicación como combustible sólido.

Se considera además que una posible alternativa de uso del biocarbón podría ser como aditivo de suelos por su capacidad de retención de agua y de nutrientes 3.

REFERENCIAS:

- (1) Duque, S. H.; Cardona, C. A.; Moncada, J. Techno-Economic and Environmental Analysis of Ethanol Production from 10 Agroindustrial Residues in Colombia. *Energy and Fuels* 2015, 29 (2), 775–783.
- (2) Funke, A.; Ziegler, F.; Berlin, T. U. Hydrothermal Carbonization of Biomass : A Summary and Discussion of Chemical Mechanisms for Process Engineering. 2010, 160–177.
- (3) Melo, C. A.; Junior, F. H. S.; Bisinoti, M. C.; Moreira, A. B.; Ferreira, O. P. Transforming



PETROQUÍMICA Y GEOQUÍMICA

SLCL-5

INVESTIGACIÓN PARA LA APLICACIÓN DE UN NUEVO LUBRICANTE EN UNA EMPRESA DE PETRÓLEO.

Ing. Amparo Zulueta Torres, Ing. Beatriz Pérez Barcala, Walfrido Cue, Maykel Padrón.
Centro de investigación del Petróleo. Cuba. CP 3400. aimee@ceinpet.cupet.cu

INTRODUCCIÓN La correcta lubricación de los mecanismos de un equipo permite que estos alcancen su vida de diseño y que garanticen permanentemente la disponibilidad del mismo, reduciendo al máximo los costos de lubricación, mantenimiento y las pérdidas por activo cesante. A partir de las recomendaciones del fabricante del equipo, o si estas no se conocen, se debe calcular el lubricante correcto considerando los parámetros de diseño del mecanismo como cargas, velocidades, temperaturas, medio ambiente en el cual trabaja el equipo, etc.

El presente trabajo tiene como objetivo seleccionar el lubricante adecuado para las bombas modelos RMI125-32H y RMI150-40 que la Empresa de Gas introdujo en su parque de equipos industriales las cuales llegaron sin aceite en el depósito y realizar un estudio de los lubricantes industriales de CUBALUB, específicamente aceites hidráulicos, la prueba de explotación controlada para el análisis del comportamiento del lubricante a aplicar en las bombas, estableciendo la frecuencia de cambio.

MÉTODOS La caracterización del aceite se realizó según las normas de ensayos ASTM tales como viscosidad a 40 y 100 °C, agua por destilación, índice de viscosidad, entre otros. Las muestras fueron analizadas en el laboratorio Físico Químico del CEINPET.

RESULTADOS Los resultados obtenidos demuestran que el aceite para la lubricación de las bombas es el Hidráulico 32, ya que el mismo cumplió con las exigencias del fabricante (Viscosidad 4°-6° ENGLER (ISOVG68, SAE 20, SAE 30). Se establece realizar el cambio de aceite cada 2000 horas manteniendo la recomendación del fabricante respecto al uso de una grasa base litio.

OCURRENCIA DE MERCURIO EN CARBONES: CONTENIDO Y CORRELACIONES – COMPORTAMIENTO DEL MERCURIO DESDE LA MINA Y EL CICLO DE COMBUSTIÓN, NTE DE SANTANDER, COLOMBIA

Guerra Lemoine, Sonia Lucía¹ - Romero Moreno, Manuel Hernando² - Rodríguez Castellanos, Billy Alexander³ – Castro Adriana⁴,
González, Harry⁵

¹Químico Esp, ²Químico Msc, ³Ing. Químico Msc., ⁴Geóloga Msc, ⁵Tecn. Químico Esp.- Servicio Geológico Colombiano, Diagonal 53
No. 34-53, Bogotá, Colombia sguerra@sgc.gov.co,

INTRODUCCIÓN Acorde con PLAN ÚNICO DE MERCURIO, PLAN ESTRATÉGICO SECTORIAL PARA LA ELIMINACIÓN DEL USO DE MERCURIO, convenio SGC-ANDEG, se desarrolla proyecto: Ocurrencia mercurio en carbones Nte. de Santander y comportamiento en ciclo de combustión. Para establecer línea base del contenido de mercurio en carbones de Catatumbo, Zulia, Chinácota, Salazar y Herrán-Toledo, el SGC con participación de la térmica, tomó 89 muestras en mina; muestreos en Termoeléctrica: carbón, escorias, cenizas volantes y mercurio en chimeneas y en puntos de influencia de la Termoeléctrica.

PALABRAS CLAVE: Correlaciones, mercurio, ciclo, caracterización

METODOLOGÍA

- Información.
- Reuniones con térmica y minas proveedoras.
- Descripción geológica.
- Muestras frente de mina y caracterización en 45 análisis: Laboratorio Carbones, SGC.
- Evaluación y relaciones mercurio con otros parámetros.
- Muestreo y caracterización de carbón en patio, banda, cenizas volantes, escoria, mercurio en gases y calidad aire



Figura 1. Muestreo de mercurio en gases de la chimenea



Figura 2 Muestreo en mina



Figura 3 Medición de mercurio en calidad de aire

RESULTADOS La principal Formación geológica que alberga los mantos de carbón de tipo térmico es la Formación Cuervos (Paleoceno medio) y la Formación Carbonera (Eoceno superior). Se observó que en las cenizas volantes se concentra el mercurio producido en la combustión del carbón. En las mediciones de mercurio en calidad de aire, en puntos de influencia de la térmica se encuentra promedio <1ppb.

CONCLUSIONES Los carbones, mineral heterogéneo, contienen mercurio en diferentes concentraciones y formas de combinación, se encuentra formando sulfuros y su contenido está directamente relacionado con cenizas, azufre total, azufre pirítico y material mineral. Con los resultados obtenidos el mercurio es atrapado por las cenizas volantes reaccionando con el azufre y el cloro; el cloro y el flúor son halógenos colaboran para aumentar la gasificación del mercurio al quemar el carbón y reaccionan formando compuestos en las cenizas. (3) El valor medio del contenido de mercurio en base seca en las muestras de mina es de 127µg/kg, siendo inferior al promedio mundial (2)

REFERENCIAS

1. Kolker, A., Quick, J., Senior, C. y Belkin, E., (2012) Mercury and Halogens en carbón – Their role in Determining Mercury Emissions From Coal Combustion, USGS United Stated
2. EVALUACIÓN MUNDIAL SOBRE EL MERCURIO, PROGRAMA DE LAS NACIONES UNIDAS PARA EL MEDIO AMBIENTE PRODUCTOS QUÍMICOS, Publicado por el PNUMA Productos Químicos Ginebra, Suiza diciembre de 2002 Versión en español publicada en junio 2005
3. Ochoa González, Raquel (2011) Retención de mercurio en sistemas de desulfuración en fase húmeda, Tesis doctoral, Universidad de Oviedo
4. Kolker, Allan, Senior, C., van Alphen, C., Koenig, A., and Geboy, N., 2016, Mercury and trace element distribution in density separates of a South African Highveld (#4) coal: Implications for mercury reduction and preparation of coal for export: International Journal of Coal Geology, v. 170, p. 7-13



QUÍMICA MINERAL DE LOS GRANATES DE LA UNIDAD ORTONEIS DE BERLÍN, MACIZO DE SANTANDER, COLOMBIA

Carolina Jiménez Triana, Jimmy Alejandro Muñoz Rocha, Mary Luz Peña Urueña, Maykel Padrón

Introducción

La Unidad Ortoneis de Berlín es un cuerpo metamórfico con escasa información geoquímica. Esta es necesaria para determinar su evolución con respecto al Macizo de Santander. Para ello, se utilizó microsonda electrónica, además de un ICP-MS tipo cuadrupolo, herramientas fundamentales para la interpretación de la historia tectono-termal de esta unidad.

Palabras Claves

Química mineral, EPMA, ICPMS-Cuadrupolo

Métodos

La química mineral se realizó en una Microsonda electrónica JEOL JXA-8200, con una aceleración de voltaje de 15 kv; 20 nA de corriente del haz; diámetro del haz: 5 μm - 10 μm ; Los elementos traza se midieron en un ICP-MS tipo cuadrupolo iCAP RQ, para determinar REE y otros.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los granates presentaron zonaciones inversas en Mn, además de homogenización, esta zonación es fuertemente dependiente de la temperatura; esto se espera en granates retrógrados, cristalizados esencialmente por encima de los 700 °C. Cuando hay un metamorfismo prógrado, los granates comienzan a homogeneizarse, por encima de 600°C - 700°C, dando a lugar a procesos de difusión y reequilibrio del mineral, característicos de rocas metamórficas de alto grado. La zonación en elementos traza es más fuerte que en elementos mayores, proporciona información acerca de la historia metamórfica y la relación Fluido-Roca, y nos indica que el sistema se abrió, permitiendo la introducción de elementos típicos de la corteza, además de un reequilibrio mineral como resultado de un alto calentamiento hasta llegar a facies Anfibolita alta-Granulita en la zona del Corregimiento de Berlín en el Macizo de Santander.

Referencias

- (1) Hickmott, D. D.; Shimizu, N.; Spear, F. S.; Selverstone, J. Trace-Element Zoning in a Metamorphic Garnet. *Geology* 1987, 15 (6), 573–576. [https://doi.org/10.1130/0092-7015\(1987\)15%573:TZIAMG%3E2.0.CO;2](https://doi.org/10.1130/0092-7015(1987)15%573:TZIAMG%3E2.0.CO;2)
- (2) Spear, F. S. Metamorphic Pressure- Temperature-Time Paths • Q Short Course Presented At.
- (3) Brown, M. Journal of the Geological Society P – T – t Evolution of Orogenic Belts and the Causes of Regional Metamorphism Service Volume 150 Celebration Paper P - T - t Evolution



34° CLAQ 2020
CONGRESO LATINOAMERICANO DE QUÍMICA
CARTAGENA DE INDIAS - COLOMBIA



PÓSTER CLAQ



ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA

SLFCL-7

EMPLEO DE SOFTWARE DE SIMULACIÓN DE PRÁCTICAS DE LABORATORIO EN EL DESARROLLO DE LAS CLASES PRÁCTICAS EN LA CÁTEDRA QUÍMICA ANALÍTICA I DE LA FCQ - UNA

Amapola Mónica Cabrera de Vera¹

¹Facultad de Ciencias Químicas - Universidad Nacional de Asunción

amapolamonicac@gmail.com

Introducción: Para afrontar los retos del Siglo XXI, la educación debe estar dirigida a promover capacidades y competencias, no solo conocimientos cerrados o técnicas programadas. En la búsqueda de mejores estrategias enseñanza se propone software informático de simulación de prácticas de laboratorio, como herramienta de apoyo al aprendizaje de análisis químicos.

Métodos: El diseño metodológico es de tipo pre experimental, corresponde a un estudio exploratorio descriptivo, con enfoque cuali cuantitativo. Se aplicó una encuesta a los estudiantes para verificar su grado de conocimiento acerca del uso de simuladores, se aplicó el simulador ChemLab y luego se evaluó su influencia sobre el rendimiento.

Resultados y Conclusiones: Para ambas carreras se obtuvo una diferencia significativa para ambos periodos en cuanto al rendimiento académico obtenido, para $\alpha=0,05$, sin embargo se observa mayor homogeneidad en los promedios de laboratorio, en los periodos 2014, 2015 y 2017 para la carrera de IA y en los periodos 2014 y 2017 y 2015 con 2016 para la carrera de IQ. Si bien la implementación de la innovación tuvo lugar solo en el año 2017, sirve como punto de comparación con el periodo anterior para dar lugar a la idea de que, con el empleo del software de simulación, se podría llegar a una mejora en el rendimiento académico promedio en la asignatura Química Analítica I, para ambas carreras.

REFERENCIAS:

1. Ayala, N. F., Michalus, J. C., & Malfanti, I. (2007). Simulación aplicada al proceso de elaboración del Té Seco. *Revista Ingeniería Industrial*, I(6), pp. 69-75.
2. Baron, A. P. (2009). *Investigación en las Ciencias Sociales*. Asunción: ABP.
3. Coll, C. M. (2008). *Psicología de la Educación Virtual. Aprender y Enseñar con las Tecnologías de la Información y la Comunicación*. Madrid: Ediciones Morata S.L.
4. Cuevas, M., Valdivia, D., Mateo, S., & Parra, M. L. (2010). Simulación de prácticas de laboratorio de la asignatura "Experimentación en Ingeniería Química" mediante el uso del Simulador de procesos Hysis.Plant. *Iniciación a la Investigación*, IV(19), pp.1-5.



IMPLEMENTACIÓN DE ESTRATEGIAS PEDAGÓGICAS PARA LA ENSEÑANZA DE NOMENCLATURA ORGÁNICA MEDIADAS POR EL TRABAJO COLABORATIVO A TRAVÉS DEL JUEGO.

Danny Alejandro Arteaga Fuertes¹, Luis Alberto Lenis Velasquez, Marino Chavarro Cordoba.

¹Universidad del Cauca

dannyarteaga@unicauca.edu.co

Palabras Claves. Ludo Evaluación, Nomenclatura, Gamificación, Innovación.

Introducción: Las dinámicas educativas diseñadas para la enseñanza de las ciencias deben avanzar con la evolución tecnológica, la nueva generación de estudiantes, crecida en ambientes virtuales necesita acceso libre a plataformas educativas para reforzar conocimiento, generando grandes retos a la educación tradicional que tendrá que ser complementada con dichas tecnologías.

Método: La estrategia educativa planteada tiene un componente académico y de investigación en el aula, ha sido proyectada para enseñar nomenclatura orgánica de acuerdo al cumplimiento de tres etapas definidas secuencialmente: la producción de juegos interactivos usando la plataforma Genially, implementación de metodologías de trabajo y validación de estrategias pedagógicas.

Resultados y Conclusiones: En este trabajo se muestran los logros alcanzados en la implementación de un prototipo de juego didáctico soportado en la plataforma Genially para complementar el aprendizaje de nomenclatura orgánica. La investigación en esta fase está dirigida a 52 estudiantes, entre hombres y mujeres, que cursan Química Orgánica en la Universidad del Cauca (Popayán, Colombia) y pertenecen a los programas de Biología, Ingeniería Ambiental e Ingeniería Agroindustrial. Como estrategia, se organizaron grupos de trabajo de dos estudiantes para la aplicación de la herramienta lúdica, realizando una previa explicación y exploración por parte de los alumnos. Posteriormente, se realizó la valoración de este a través de una encuesta digital evaluando componentes: interfaz gráfica y funcionalidad; pertinencia y contenidos; y nivel de satisfacción. El 98% de los estudiantes señalan como muy importante este tipo de herramienta dado que les permitió afianzar las temáticas, además de ser una iniciativa muy llamativa para ellos.

Referencias:

1. Gutiérrez Mosquera, A.; Barajas Perea, D. S. Incidencia de los Recursos Lúdicos en el Proceso de Enseñanza – Aprendizaje de la Química Orgánica I. *Educ. Quim.* **2019**, 30 (4), 57-70.
2. Vera Monroy, S. P.; Mejía Camacho, A.; Gamboa Mora, M. C.; C=O carbohidratos: Efecto Del Juego Sobre El Aprendizaje. *Educ. Quim.* **2020**, 31 (1), 23-35. 3. Moreno, J.; Murillo W. J.; Juego de Carbonos: una Estrategia Didáctica para la Enseñanza de la Química Orgánica Propiciando la Inclusión de Estudiantes de Educación Secundaria Con Diversas Discapacidades. *Revista Brasileira de Educação Especial.* **2018**, 24 (4), 567-582.



QUÍMICA PLEGADA

Alfonso Enrique Ramírez Sanabria¹

¹Grupo de Catálisis, Departamento de Química, Universidad del Cauca, Popayán – Colombia

Palabras Claves: Enseñanza, Química, Catálisis, Quiralidad

A partir de las consideraciones sobre la importancia de la ciencia en la sociedad de Eduardo Posada Flórez ¹, en la cuales se mencionan que “el conocimiento ha sido el principal motor de desarrollo tecnológico y lo será cada vez más; que además debe tener en cuenta que lo esencial es que, la preservación del medio ambiente sea el centro de nuestras preocupaciones, y no hay duda de que, para ello, la Ciencia tiene un papel fundamental”.

Una de las principales herramientas para la preservación y remediación del medio ambiente es la Catálisis, quien ha sido llamada la aliada de la ecología². Por ejemplo, en la industria del transporte automotriz, la Catálisis, podría trabajar en dos frentes “uno, es lo que se llama tecnologías más limpias, que tienden a disminuir la emisión de contaminantes, el auto de hidrógeno o eléctrico por ejemplo; y el otro

consiste en eliminar el contaminante una vez producido a través de la aplicación de un catalizador en alguna o varias partes del motor del auto, para evitar que se liberen los contaminantes a la atmósfera. Hoy en día las dos vías son necesarias y son temas de intensa investigación”.

El proyecto de Química plegada es ante todo un sueño hecho realidad por la gente de .Puntoaparte editores. Se trata también de un cuento cuyo protagonista es la Química y que está compuesto por seis historias, cada una contada a través de este plegable de seis páginas. Aunque este número surgió de forma casual, su significado en la cábala nos hace ver que, tal como en la ciencia, nada ocurre por azar: el seis se define como el signo del amor, y también el de la comprensión y la responsabilidad. Este sueño es, entonces, producto del amor que el autor tiene por la Química, en especial por la orgánica, que estudia el átomo de carbono (cuyo número atómico es, por supuesto, seis) y está guiado por la responsabilidad que tenemos como sociedad por su comprensión. Queremos así, aportar al reto que nos invita la ministra de Ciencia y Tecnología de buscar estrategia de comunicación para científicos y no científicos orientada a la construcción de un lenguaje de interacción entre las distintas formas de producción del conocimiento ³.

Referencias:

1. Revista de 2020 Volumen XXVII No 3 año 2020
2. https://www.unl.edu.ar/noticias/leer/16252/Catalisis_la_gran_aliada_de_la_ecologia.html#_YHn21O8zZBw
3. Mabel Torres Torres. Democratización de la Ciencia. Revista de 2020 Volumen XXVII No 3 año 2020



MEZCLANDO DIVERSIÓN Y QUÍMICA PARA DESPERTAR EL INTERÉS POR EL APRENDIZAJE DE LAS CIENCIAS EN ESTUDIANTES DE GRADO 11 DE LA INSTITUCIÓN EDUCATIVA COMERCIAL DEL NORTE (POPAYÁN-COLOMBIA).

Andrea Carolina Cabanzo Olarte¹, Danny Alejandro Arteaga Fuertes, Paola Andrea Gomez Buitrago.

¹Universidad del Cauca

acabanzo@unicauca.edu.co

Palabras Claves: Ludoevaluación, Innovación, Aprendizaje Activo.

Introducción: Resultados en las áreas de ciencia básica en estudiantes de educación media muestran niveles de desempeño bajo, especialmente en el Departamento del Cauca. El propósito de la propuesta es motivarlos a aprender de manera lúdica y científica, reduciendo la deserción temprana que puedan presentar al ingresar a la educación superior.

Métodos: Este proyecto de innovación educativa se ha proyectado para despertar el interés en el aprendizaje de la química siguiendo un algoritmo de trabajo con fases consecutivas: identificación de temáticas de estudio y estilos de aprendizaje bajo el desarrollo de encuestas dirigidas, preparación de materiales académicos, implementación de estrategias y validación.

Resultados y Conclusiones: Dentro de la estrategia de innovación educativa propuesta se han ejecutado las primeras fases de acuerdo a datos de interés y necesidades predominantes encontradas en la población de estudio. El análisis de resultados de estas primeras fases, diagnóstico e interpretación, han permitido clasificar tanto los estilos de aprendizaje como las temáticas de mayor dificultad en los estudiantes de la Institución Educativa Comercial del Norte. Siguiendo un algoritmo de trabajo, bajo encuestas dirigidas, pregunta y contrapregunta, se consolidaron como temáticas de interés, estructura del átomo, números cuánticos, estequiometría y nomenclatura inorgánica. Dentro de los estilos de aprendizaje siguiendo el modelo VAK se encontró que en los 75 estudiantes participantes, predomina la parte visual y auditiva como formas de aprendizaje. Acorde a estos resultados, se están diseñando materiales educativos basados en dinámicas lúdicas de aprendizaje activo, que serán implementados secuencialmente en fases posteriores en consonancia con los contenidos programáticos de cada curso.

Referencias

1. Montero, B. Application of educational games as a teaching: A Literature Review. *Pensamiento Matematico*. **2017**, 7 (1), 75-92.
2. Parga, M.; Piñeros, G. Enseñanza de la química desde contenidos contextualizados. *Educ. Quím.* **2018**, 29 (1), 55-64.
3. Zaragoza, E.; Orozco, L.; Macias, J.; Nuñez, M.; Gutierrez, R.; Hernandez, D.; Navarro, C.; Ritz, M.; Villalobos, R.; Gomez, N.; Cerda, R.; Gutierrez, A.; Perez, C. Estrategias didácticas en la enseñanza-aprendizaje lúdica en el estudio de la nomenclatura química orgánica en alumnos de la Escuela Preparatoria Regional de Atotonilco. *Educ. Quím.* **2016**, 27 (1), 43-51.



IMPLEMENTACIÓN DE LA QUIMIOINFORMÁTICA EN LA ENSEÑANZA DE LA QUÍMICA EN NIVEL MEDIO DEL PROGRAMA DE BACHILLERATO INTERNACIONAL EN EL GIMNASIO VERMONT.

Marcela Cruz¹, Sonia Beltrán, Alejandra Buesaquillo.

¹Gimnasio Vermont

sonia.beltran@gimnasiovermont.edu.co

Palabras clave: Quimioinformática, QSAR, enseñanza de la química, descriptores moleculares

Introducción: En la actualidad, la enseñanza de la química demanda grandes retos, los cuales promueven habilidades de pensamiento de orden superior. El Gimnasio Vermont, en su programa de bachillerato internacional, ofrece la asignatura de química nivel medio, por ende, esta investigación dará cuenta de la enseñanza de ésta, mediante la implementación de la quimioinformática en el planteamiento de investigaciones denominadas “pruebas internas”, desarrolladas por estudiantes de grado once.

Métodos: La metodología llevada a cabo para el desarrollo de las pruebas internas consistió en la construcción de la base de datos mediante la búsqueda de moléculas en DrugBank, luego en PubChem se consultó el código SMILES, el cual fue utilizado para calcular los descriptores moleculares en ChemDes. Finalmente se realizó un análisis preliminar utilizando matrices de correlación corrplot en RStudio, para el posterior planteamiento de la pregunta de investigación y las variables de estudio.

Resultados y conclusiones: Finalmente, los estudiantes hicieron uso de la quimioinformática, como un novedoso método para diseñar sus investigaciones. Con el modelo QSAR, lograron evaluar el comportamiento de diversas estructuras químicas a través de propiedades y sus mecanismos de acción en diferentes matrices fisicoquímicas, biológicas y ambientales, además caracterizaron diferentes estructuras a partir del análisis de descriptores moleculares. Luego validaron la relación estructura-actividad mediante el análisis de correlación de las variables, haciendo uso del programa RStudio y así poder dar respuesta a la pregunta de investigación, mediante un análisis estadístico robusto y coherente.

Si bien, los estudiantes reconocieron otro método de investigación in silico para el estudio de estructuras químicas, esta investigación aporta al desarrollo del Programa del Diploma, ya que potencializo los niveles de apertura propuestos por Herron (1971), en especial el nivel tres ya que integraron un fenómeno de estudio, pregunta orientadora, desarrollo de metodología y respuesta adecuada a su tema de interés.

Referencias:

1. Herron, M. (1971). The nature of scientific inquiry. *SchoolReview*. 79, 171-212.
2. International Baccalaureate Organization Ltd. (2016). Programa del Diploma. Guía de Biología Peterson House, Malthouse Avenue, Cardiff Gate Cardiff. Reino Unido.



Exploración del Ambiente de Aprendizaje en Casa de los Estudiantes de un Colegio en la Ciudad de Barrancabermeja, Santander, Colombia; en época de pandemia Covid-Sars 19

EDWIN DE LA CRUZ MONTOYA¹, Antonio Francisco Gomez Martinez¹.

¹Colegio Agropecuario La Fortuna Barrancabermeja.

edmquim@gmail.com

Palabras Claves: pandemia, aprendizaje, ambiente escolar.

Introducción: La educación se ha centrado en el ambiente escolar, en la enseñanza lúdica, en la incidencia tecnológica y otros aspectos. No obstante es imperativo revisar el ambiente de aprendizaje del entorno mas cerca del educando, pues es sabido que el entorno del individuo afecta directamente el proceso de enseñanza aprendizaje.

Métodos: La herramienta utilizada para la adquisición de los datos se realizo mediante una encuesta, la cual fue suministrada a través del cuadernillo de química de los alumnos del colegio agropecuario la fortuna. Los padres de familia respondieron la encuesta de forma voluntaria, previa explicación de la intención de la misma.

Resultados y Conclusiones: El estudio realizado sobre el ambiente de aprendizaje en casa a los estudiantes del colegio agropecuario la fortuna, deja entrever la importancia de la acción directa de los padres (acudientes) en el proceso de enseñanza aprendizaje. La afirmación anterior se basa en el hecho de que mas del 50% de los acudientes están involucrados con mucha frecuencia en las diferentes variables que conforman un ambiente de aprendizaje en su casa. Tales variables como: elogios y reconocimiento ante el esfuerzo realizado por los estudiantes, relaciones afectivas entre padres e hijos, diálogos sobre objetivos y planes sobre su vida adulta, e incentivo a la independencia, están siendo abordadas en casa por los acudientes de nuestra institución. Los adultos que están a cargo del proceso de enseñanza aprendizaje de los jóvenes no están promoviendo de manera masiva el habito de la lectura, así como tampoco la realización de actividades de origen artístico.

Referencias:

1. Puga, M. d. (2006). Investigacion de las TIC en la educacion. Revista Latinoamericana de tecnologia educativa , 14.
2. Fullat,O. (1992) Conceptos básicos en la pedagogía. Ediciones CEAC. Perú.164-08020. Barcelona-España.
- Coloma, M, C. T. (2000). Sobre los estilos de enseñanza y de aprendizaje. Educación, Vol. 9, (17), pp.51-79.



IMPLEMENTACIÓN DE PODCASTS PARA PROMOVER LA INTERACCIÓN ENSEÑANZA - APRENDIZAJE DE QUÍMICA DURANTE LA PANDEMIA

Aymer Alejandro Alvarado¹, Aida Liliana Barbosa López²

¹Universidad de Cartagena – Bolívar, Colombia, Joven Investigador. ²Universidad de Cartagena – Bolívar, Colombia, Laboratorio de Investigaciones en catálisis y Nuevos materiales LICATUC.

aalvaradol@unicartagena.edu.co

Palabras Clave: Podcast, Enseñanza de la Química, Alternativas de Aprendizaje, Innovación en la Educación.

La pandemia generada por la COVID- 19 aceleró el paso del hombre a un mundo cada vez más digital, lo cual llevó a que todas las áreas en las que este se desarrollaba, se reinventaran. Entre esas el aula de clases, la forma en que se aprende y se enseña. En este proyecto, en búsqueda de promover la reinención de la enseñanza del conocimiento en Química haciendo uso de las Tecnologías de la Información y la Comunicación (TIC), se desarrolló una herramienta del tipo Podcast, un instrumento tecnológico y digital que se encuentra en auge debido a su simplicidad de transmisión y acceso; El cual fue desarrollado por estudiantes de tercer semestre del programa de química universidad de Cartagena, filtrado por docentes de la misma institución, dado a conocer al público en general por plataformas de difusión, y finalmente se realizó una hibridación del aprendizaje, en donde se implementó y evaluó con estudiantes de bachillerato en zonas donde es difícil el acceso a la red, como lo es el corregimiento de la isla tierra bomba. En este proyecto se puede encontrar como benefician a los estudiantes el uso de estas alternativas tecnológicas para el fortalecimiento de sus conocimientos ya que estos pueden ser utilizados tanto afuera, como dentro del aula y facilitan a los docentes la distribución del saber de una manera dinámica, e innovadora. Simultáneamente se puede encontrar el proceso, la metodología y medios de evaluación que se llevaron a cabo para la producción y validación de estos.

Referencias:

1. Young Benjamin, Pouw Andrew, Redfern Amanda, Cai Fei, Chow Jessica. Eyes for Ears—A Medical Education Podcast Feasibility Study. *Journal of Surgical Education*. [Online]. 2021. Volume 78, Issue 1. Pages 342- 345 (<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1931720420302348>).
2. Morales-Carrera, Uriel & Díaz-José, Julio & Medero-Gómez, Iliana & Morales-Ríos, Verónica. (2018). Innovación social, TICs y vulnerabilidad Social Innovation, ICTs and vulnerability.
3. Corredor Mosquera, G. C. (2015). El uso del podcast como estrategia para promover competencias en lectura y escritura. Retrieved from https://ciencia.lasalle.edu.co/lic_lenguas/39.



FISICOQUÍMICA

ILRCL-738

Studies of arsenic adsorption onto nZVI/rGO: experimental and theoretical approaches for surface phenomena

C. V. Lima^{1,2}, J. Juan², R. Faccio³, E. A. González², C. Pistonesi², M. F. Pistonesi², J. S. Rebouças¹

¹Universidade Federal da Paraíba, Departamento de Química, 58051-900, João Pessoa, PB, Brazil. ²Universidad Nacional del Sur, Departamento de Química, INQUISUR (UNS CONICET), B8000CPB, Bahía Blanca, Buenos Aires, Argentina. ³Física & Centro NanoMat, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

caiovlma@hotmail.com

key-words: arsenic, nZVI/rGO, adsorption, DFT.

Introduction: There is a worldwide concern about population chronic arsenic exposure via ingestion of contaminated water and food. Nanoscale Zero-Valent Iron (nZVI) has been explored in As remediation strategies, especially if coupled with reduced graphene oxide (rGO). To better understand this As-adsorption phenomena, experimental and theoretical approaches were carried out.

Methods: nZVI/rGO were synthesized by iron reduction with boron hydride in a rGO suspension. Arsenic isotherm adsorption were determined from 15 ppm arsenic aqueous solutions. DFT calculations were performed using Vienna Ab-Initio Simulation Package, Kohn-Sham equations solved by projected-augmented method, and exchange and correlation energies calculated using Perdew, Burke and Ernzerhof³.

Results and Conclusions: nZVI/rGO were successfully synthesized and characterized by Transmission Electron Microscope (TEM) and Zeta Potential (ZP). nZVI clusters are well dispersed over the rGO sheets, with a mean particle size of 7 nm. ZP was measured in a 2–12 pH range and shows a point of zero charge at pH 6.5. Adsorption isotherms were studied in a 3.6–7.9 pH range. The best adsorption performance was achieved in pH 3.6, in which interactions between nZVI/rGO and arsenic are greater. Preliminary DFT calculations evaluated arsenic adsorption over nZVI/rGO using a simplified model of magnetite nanoparticle. Arsenic binds to two surface oxygen atoms, with adsorption energy of -3.85 eV, As-O distance of 1.8 Å, and O1-As-O2 angle of 109.5°. After adsorption, arsenic presents a positive charge of +2.14e, showing its stability in the cationic form. These data help to understand part of the superficial phenomena involved in the arsenic adsorption.

References:

1. Fan, M. et al. Synthesis and Characterization of Reduced Graphene Oxide-Supported Nanoscale Zero-Valent Iron (NZVI/RGO) Composites Used for Pb(II) Removal. *Materials (Basel)*. 2016, 9 (8).
2. Kresse, G.; Joubert, D. From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented Wave Method. *Phys. Rev. B* **1999**, 59 (3), 1758–1775.
3. Perdew, J. P.; Burke, K.; Ernzerhof, M. Generalized Gradient Approximation Made Simple (Vol 77, Pg 3865, 1996). *Phys. Rev. Lett.* **1997**, 78 (7), 1396–1396.



FORMULACIÓN DE RECUBRIMIENTO COMESTIBLE A BASE DE PECTINA Y CHILE POBLANO (*Capsicum annum var. Annum*) PARA INCREMENTAR LA VIDA ÚTIL DE CHILE HABANERO (*Capsicum chinense*)

María del Carmen Vázquez-Briones, Moisés Mata-García, Dayra del Carmen Reyes-Hernández, Tania Edelin Pérez de la Cruz

Universidad Tecnológica del Sureste de Veracruz, Universidad Tecnológica, Veracruz, México

vazbri20@hotmail.com

Palabras clave: chile habanero, pectina, recubrimiento.

Resumen: En este estudio se evaluaron tres soluciones de recubrimiento comestible: a) una solución al 2% de pectina, utilizando 0.5 de glicerol como plastificante, b) Solución de pectina a 2% y puré de chile poblano (7:3 v/p), c) solución de pectina a 2% y puré de chile poblano (9:1 v/p) aplicados en chile habanero. Los chiles habaneros recubiertos almacenados a temperatura ambiente se les determinó: pérdida de peso, °Brix, acidez y firmeza. Los chiles habaneros recubiertos con pectina al 2% presentaron menor pérdida de peso, mantuvieron la firmeza y el porcentaje de ácido málico durante el almacenamiento a temperatura ambiente.

Introducción: El chile habanero destaca por su amplia diversidad de tamaños, colores, formas y niveles de picante. En México se consume básicamente fresco. El consumo de chile habanero (*Capsicum chinense*) puede tener beneficio para la salud, en base al alto contenido de fitoquímicos: fenoles, flavonoides, carotenoides, capsaicinoides y antioxidantes que son componentes importantes de la dieta debido a su capacidad para reducir el riesgo de enfermedades degenerativas. De igual forma, por la actividad biológica que algunos estudios han demostrado que presenta el chile habanero, puede tener un posible uso farmacéutico, emplearse como un nuevo sabor con propiedades funcionales para alimentos o productos nutricionales (Menichini et al. 2009) La calidad y la vida de anaquel del chile habanero son factores importantes en su comercialización; sin embargo, la literatura científica presenta escasa información. Por otra parte, existe el interés de incrementar la vida útil del chile habanero fresco para reducir las pérdidas que presentan los comerciantes. Actualmente en la industria alimentaria se busca reemplazar los conservadores químicos por conservadores naturales que no causen un daño a la salud del consumidor. Una alternativa para incrementar la vida útil del chile habanero es la utilización de recubrimientos comestibles-biodegradables, ya que se considera una tecnología que está ganando importancia para prolongar la vida útil de frutas frescas y mínimamente procesadas, debido a que actúan como una barrera contra la humedad. Se elaboran a partir de lípidos, polisacáridos, proteínas o combinaciones. Se puede definir a un recubrimiento como la matriz continua delgada que posteriormente será utilizada en forma de recubrimiento del alimento (Vázquez et al., 2013). El propósito de este trabajo fue elaborar un recubrimiento comestible a base de pectina y chile poblano (*Capsicum annum var. Annum*) para incrementar la vida útil de chile habanero (*Capsicum chinense*).

Metodología: Se utilizaron chiles habaneros verdes que fueron adquiridos en un mercado en la ciudad de Nanchital, los frutos se seleccionaron de acuerdo a su tamaño, color del pedúnculo y que no presentaran daños. El chile habanero entero se lavó con detergente y agua de grifo, posteriormente se desinfectó en una solución de NaClO (0.2g/L) durante 10 minutos. El exceso de solución se eliminó colocando los chiles habaneros sobre mallas de papel adsorbente durante 1 minuto. Posteriormente se midió longitud, diámetro y peso en los chiles habaneros. Se prepararon tres soluciones de recubrimiento comestible: a) una solución al 2% de pectina, utilizando 0.5 de glicerol como plastificante, b) Solución de pectina a 2% y puré de chile poblano (7:3 v/p), c) solución de pectina a 2% y puré de chile poblano (9:1 v/p). Posteriormente, los chiles habaneros se sumergieron a las soluciones durante 2 minutos, se colocaron sobre mallas, para ponerlos a secar durante 25 minutos a 35°C. Se colocaron los chiles en recipientes de plásticos (12x20cm). Los chiles habaneros recubiertos almacenados a temperatura ambiente se les determinó °Brix, pérdida de peso por gravimetría, los resultados se expresaron en porcentaje de pérdida de peso. La firmeza se obtuvo utilizando un penetrometro Modelo: GY-3, los resultados fueron expresados en kg/cm².

Resultados

Los chiles habaneros presentaron valores promedios de longitud 5.2±0.8 cm, diámetro 3.83±0.34 cm y peso 17.39±2.4 g. La pérdida de agua en el chile habanero se produce debido a diferencias de la presión de vapor, que corresponde a la diferencia entre la humedad del fruto y la humedad relativa del aire. En la figura 1 se observa que a partir de la semana 2 se presentó mayor pérdida de peso. Los chiles recubiertos con la solución A presentaron menor pérdida de peso durante los días de almacenamiento. Con respecto a los valores de °Brix se presentaron menores valores en chiles habaneros recubiertos con las soluciones A y C, hasta la tercera semana de almacenamiento (Figura 2). La firmeza es un atributo



importante en el chile habanero fresco, ya que el excesivo ablandamiento es uno de los principales factores determinantes de la pérdida de calidad, haciéndolos más propensos al desarrollo de hongos. Los chiles habaneros recubiertos con la solución A (pectina 2%) mantuvieron la mayor firmeza durante las cinco semanas de almacenamiento (Figura 3). No se observó una tendencia en los valores de porcentaje de ácido málico. Los chiles recubiertos con la solución B y C presentaron una ligera disminución a partir de la semana cuatro.

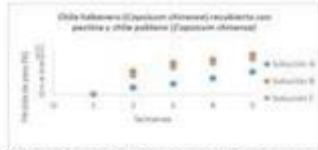


Figura 1. Valores de pérdida de peso en chile habanero recubierto.

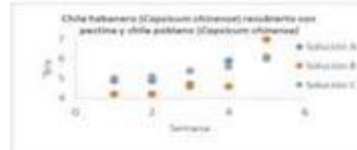


Figura 2. Valores de Brix en chile habanero recubierto.



Figura 3. Valores de firmeza en chile habanero recubierto.



Figura 4. Valores de firmeza en chile habanero recubierto.

Conclusiones

De acuerdo a los resultados obtenidos, se concluye que los chiles habaneros recubiertos con pectina al 2% presentaron menor pérdida de peso, mantuvieron la firmeza y el porcentaje de ácido málico durante el almacenamiento a temperatura ambiente.

Referencias

1. Menichini, F., Tundis, R., Bonesi, M., Loizzo, M., Conforti, F., Statti, G., Menichini, F. "The influence of fruit ripening on the phytochemical content and biological activity of Capsicum chinense Jacq. cv Habanero". Food Chemistry, 114(2009), 553–560. doi:10.1016/j.foodchem.2008.09.086
2. Vázquez, B.M.C y Bental, G. J. A. (2013). Recubrimiento de frutas con biopelículas. Temas selectos de ingeniería de alimentos. Volumen 7-2. Pág. 5-14.



ADSORCIÓN Y ESTUDIO CALORÍMETRICO DE CO₂ EN MATERIALES ADSORBENTES PREPARADOS A PARTIR DE CUESCO DE PALMA

Sergio Alberto Acevedo Corredor, Liliana Giraldo Gutiérrez, Juan Carlos Moreno Piraján

Universidad Nacional de Colombia - Universidad de los Andes

saacevedoc@unal.edu.co

Palabras claves: Calorimetría de Adsorción, CO₂, Carbón Activado

Introducción:

En esta investigación se prepararon carbones activados a partir de Cuesco de Palma Africana mediante activación química para la adsorción CO₂, estos materiales carbonosos poseen una porosidad y características óptimas con la finalidad de capturar este gas considerado el principal responsable del efecto invernadero; ya que hoy en día a nivel atmosférico se encuentran concentraciones superiores a las 400 ppm debido a las diferentes actividades antropogénicas asociadas especialmente al sector industrial.

Métodos:

Impregnación y activación química, carbonización, isothermas de adsorción N₂, caracterización Fisicoquímica, isothermas Adsorción y calorimetría de adsorción CO₂; estas técnicas se utilizaron para caracterizar las propiedades fisicoquímicas de los materiales adsorbentes preparados en esta investigación con la finalidad de capturar CO₂.

Resultados y conclusiones: Los materiales preparados en este estudio poseen estructuras micro-mesoporosas la cual los hace viables en el proceso de adsorción y pueden ser tenidos en cuenta como una alternativa en la adsorción de CO₂ en los procesos postcombustión, estos sólidos presentan una difusión rápida por la porosidad y afinidad que presentan hacia la molécula del CO₂ y así mitigar los daños causados por este gas efecto invernadero con respecto al calentamiento global [1]. Los resultados de las características texturales fueron áreas superficiales BET entre 700- 1305 m²g⁻¹, y una capacidad de adsorción de CO₂ entre 200 y 250 mg g⁻¹, estos materiales adsorbentes tipo carbones activados poseen una proporción destacada de microporos efectivos para el proceso de adsorción de CO₂, lo cual se corroboró con las calorimetrías de adsorción realizadas a estos sólidos.

Referencias:

1. Jarosław, S.; Mohammed, O.; Cruz, O.; Srenscek-Nazzal, J. Preparation of low-cost activated carbons from amazonian nutshells for CO₂ storage, *Biomass and Bioenergy* 2020, 144, 1059257/1-105925/9.



DETERMINACIÓN EXPERIMENTAL DE LA ENERGÍA ESPECÍFICA EN UNA CONFIGURACIÓN DE BATERÍA ELÉCTRICA BASADA EN ELECTRODOS DE GRAFENO OXIDADO MULTICAPA, EMPLEANDO ALGUNOS ELECTROLITOS SÓLIDOS DE COMPLEJOS NITROSILADOS.

Cristián González, L. Diana Castañeda Trujillo, Jhon Jairo Prías.

Universidad Nacional Abierta y a Distancia, Universidad del Quindío

lady.castaneda@unad.edu.co

INTRODUCCIÓN El diseño de nuevos electrolitos solidos es un campo abierto de investigación en el desarrollo de baterías eléctricas. Se presenta la determinación experimental de la energía específica en una configuración de batería eléctrica basada en electrodos de grafeno oxidado multicapa (GO-BPA), empleando como electrolitos sólidos los complejos nitrosilados $K_3[Cr(CN)_5NO]$ y $fenH[Cr(CN)_5NO] \cdot 2fen \cdot 3H_2O$. Los electrodos GO-BPA fueron sintetizados por el método de la doble descomposición térmica, bajo temperatura y atmósfera de nitrógeno controladas, empleando como material fuente el bambú (*Guadua angustifolia* Kunth).

METODOLOGÍA Se elaboraron configuraciones de batería eléctrica por el método de multicapas de Cu/GO BPA/Complejo nitrosilado/GO-BPA/Ag, fueron encapsuladas en resina epóxica y se realizó su caracterización eléctrica por métodos evolución voltaje (V_{oc}) (generación de energía) y curvas corriente voltaje (I-V) a dos puntas (acumulación de energía); se caracterizó batería comercial de 1,5 V de óxido de plata SR626SW, empleada como referencia; lográndose determinar la influencia de electrolitos sólidos propuestos, en el aumento de los parámetros eléctricos de potencia, densidad de potencia y energía específica.

CONCLUSIONES El análisis de resultados, demostró que el prototipo de batería eléctrica con electrolito $K_3[Cr(CN)_5NO]$ exhibió una energía específica superior, en un orden de magnitud, a la presentada por la batería eléctrica elaborada con el electrolito $fenH[Cr(CN)_5NO] \cdot 2fen \cdot 3H_2O$, lo cual se podría atribuir a la presencia de una mayor densidad de carga electrónica en $K_3[Cr(CN)_5NO]$ comparada con la carga electrónica de la fenantrolina, esta diferencia es dominada por el efecto de retrodonación π , entre los orbitales moleculares $d(t_{2g})$ del cromo y los orbitales π ácidos de los ligandos ciano y nitrosil, en el electrolito $K_3[Cr(CN)_5NO]$. Estos resultados sugieren al complejo $K_3[Cr(CN)_5NO]$ como un posible candidato para el desarrollo de baterías de electrolitos sólidos basadas en electrodos de GO-BPA.

REFERENCIAS:

1. Pr, J. Study in graphite oxide platelets obtained from bamboo for possible, Universidad del Valle, 2019.
2. Ragu, S.; Chen, S.; Ranganathan, P.; Rwei, S. Fabrication of a Novel Nickel-Curcumin / Graphene Oxide Nanocomposites for Superior Electrocatalytic Activity toward the Detection of Toxic p-Nitrophenol. **2016**, 11, 9133–9144.
3. Robledo, C. B.; Otero, M.; Luque, G.; Cámara, O.; Barraco, D.; Rojas, M. I.; Leiva, E. P. M. First-Principles Studies of Lithium Storage in Reduced Graphite Oxide. *Electrochimica Acta* **2014**, 140, 232–237.



CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA Y HUMECTABILIDAD DE EMULSIONES DE *Beauveria bassiana* SOBRE LARVAS DE TERCER INSTAR DE *Diatraea saccharalis*, *Helicoverpa zea* Y *Chloridea virescens* Caracterización, ángulo contacto, entomopatógeno.

Diana Rocío Vasquez Carreño.¹, Martha Isabel Gómez Álvarez.², Diana Marcela Aragón Novoa.¹

¹Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Bogotá, Colombia. ²Corporación Colombiana de Investigación Agropecuaria (AGROSAVIA), Sede Central, Km 14 vía Mosquera-Bogotá, Cundinamarca, Colombia.

drvasquezc@unal.edu.co

Los bioplaguicidas continúan promoviéndose en todo el mundo como una alternativa favorable a las aplicaciones de plaguicidas químicos^{1,2}. El uso de hongos entomopatógenos es una de ellas, sin embargo, su humectabilidad sobre el insecto plaga, es un parámetro que hasta el momento aún no se ha estudiado. Se prepararon emulsiones con y sin conidios (concentración final 1×10^6 conidios/mL), desde W/O hasta O/W. Se caracterizaron en tamaño y uniformidad de gota, pH, conductividad y potencial z. Se evaluó la humectabilidad a través del ángulo de contacto mediante el uso de la técnica de gota sésil³. Los conidios presentaron una humedad de $8,33 \% \pm 0,59$, concentración de $1,33 \times 10^{11} \pm 0,10$ conidios/g seco, unidades formadoras de colonias (UFC/g) de $1,47 \times 10^{11} \pm 0,41$, germinación del 100% y contaminantes en una cantidad menor a $< 10^2$, evidenciando buena viabilidad de estas estructuras y alta germinación, para bioplaguicidas basados en conidios de hongos entomopatógenos. Con la inclusión de los conidios se obtuvo mayor tamaño de gota, conductividad, potencial z y una disminución en el valor de pH. Las emulsiones presentaron ángulos desde $36.52^\circ - 55.20^\circ$ sobre *Diatraea saccharalis*, entre $25.57^\circ - 84.72^\circ$ para *Helicoverpa zea*, mientras que para *Chloridea virescens* $32.95^\circ - 87.42^\circ$, siendo las emulsiones con inclusión de conidios las que presentaron una mayor humectabilidad sobre los insectos plaga. Finalmente, las emulsiones de mayor proporción de aceite (70% y más del 80%) humectaron completamente las epicutículas de las larvas de las 3 especies.

Referencias:

1. Behle, R., & BIRTHSEL, T. Chapter 14 - Formulaciones de Entomopatógenos como Bioinsecticidas. In: Mass Production of Beneficial Organisms. Editor(s): Morales-Ramos, J., Rojas, M., Shapiro-Ilan, D. Academic Press. 2014. 483–517.
2. Maina, U., Galadima, I., Gambo, F., & Zakaria, D. A review on the use of entomopathogenic fungi in the management of insect pests of field crops. J. Entomol. Zool. Stud. 2018, 6, 27-32.
3. Huhtamäki, T., Tian, X., Korhonen, J., & Ras, R. Surface-wetting characterization using contact angle measurements. Nat. Protoc. 2018, 13, 1521–1538.



AB INITIO STUDY OF POLYSULFIDE REACTIVITY ON THE SURFACE OF GRAPHIC CATHODES WITH STRUCTURAL DEFECTS FOR LITHIUM-SULFUR BATTERIES

Arnovis Enrique Yepes Payares

Universidad de Cartagena, Cartagena – Colombia

ayepesp1@unicartagena.edu.co

INTRODUCTION Lithium-sulfur batteries constitute a viable energy storage alternative that would allow electric vehicle transport and the reduction of combustion gas emissions to the earth's atmosphere. However, multiple drawbacks have not permitted the technological development of these devices and their commercialization and implementation in means of transport. Among these drawbacks are the low conductivity of the sulfur that makes up the cathode, the volumetric expansion and destruction of the cathode as a result of the formation of polysulfides, and the diffusion of polysulfides through the organic solvent towards the anode [1]. The problem related to the diffusion of polysulfides has been the focus of many experimental and theoretical investigations and is the object of study from different approaches [2].

METHODOLOGY A computational study was made that has allowed us to improve the understanding at the molecular level of the relationship between the structure of the material that makes up the cathode and the sulfur reduction mechanisms during the battery discharge process. Adsorption calculations for comparing the influence of pore size, the presence of defects and the type of polysulfide on the physicochemical behavior of the Li-S battery cathode was carried out.

RESULTS AND CONCLUSIONS Analyzing the results of the adsorption calculations it was determined that as the polysulfide has a greater number of sulfur atoms, the bigger the attraction it experiences when being close to a graphene film, this behavior has already been reported in previous works [3].

On the other hand, the effect of the influence of the distance between the graphene films (pore size) and the adsorption energy was quantified, showing that the smaller the distance, the greater the attraction experienced by the polysulfides on the graphene film. Now, if we examine the influence of the presence of defects on the adsorption energy, we can consider that both the vacancy and the vacancy generate a greater attraction on the polysulfides than in order speaking of almost a double of the energy that occurs in the case without defects.

BIBLIOGRAPHY:

- [1] H. Kim, H.-D. Lim, J. Kim, and K. Kang, "Graphene for advanced Li/S and Li/air batteries," *J. Mater. Chem. A*, vol. 2, no. 1, pp. 33–47, Nov. 2014.
- [2] H. Chen, C. Wang, W. Dong, W. Lu, Z. Du, and L. Chen, "Monodispersed sulfur nanoparticles for lithium-sulfur batteries with theoretical performance," *Nano Lett.*, vol. 15, no. 1, pp. 798–802, 2015.
- [3] J. C. Burgos, P. B. Balbuena, and J. A. Montoya, "Structural Dependence of the Sulfur Reduction Mechanism in Carbon-Based Cathodes for Lithium-Sulfur Batteries," *J. Phys. Chem. C*, vol. 121, no. 34, pp. 18369–18377, 2017.



FOTOSENSIBILIZADORES SUPRAMOLECULARES APLICADOS A TERAPIA FOTODINÁMICA

José Robinson-Duggon, Nory Mariño-Ocampo, Denis Fuentealba.

Universidad de Panamá, Ciudad de Panamá, Panamá, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile.

dlfuente@uc.cl

Palabras Claves: Fotosensibilizador, supramolecular, macrociclos, PDT.

La Terapia Fotodinámica (PDT) se basa en la inactivación de células tumorales o microorganismos a través de la generación de oxígeno singlete y otras especies reactivas de oxígeno (ROS), mediante la irradiación de un fotosensibilizador. Estos ROS oxidan a proteínas, lípidos y/o ADN llevando a la muerte celular. La familia de macrociclos llamados “cucurbiturilos” permite modificar las propiedades fotoquímicas de los fotosensibilizadores de una manera controlada, incluso pudiendo ser utilizados para “encender” y “apagar” la generación de oxígeno singlete. Se llevaron a cabo estudios fotofísicos, fotoquímicos y de citotoxicidad en células tumorales cultivadas in vitro con diversos sistemas. Nuestro grupo ha investigado los complejos fotosensibilizador cucurbiturilo por varios años, y más recientemente se ha expandido hacia el diseño y síntesis de fotosensibilizadores que vayan dirigidos a unirse a proteínas de suero (albúmina), como una manera de aumentar la incorporación en tejidos tumorales. Resultados con derivados del fotosensibilizador azul de toluidina con ácidos grasos y grupos reactivos a sulfhidrilos serán presentados, los cuales muestran mayor afinidad tanto hacia la proteína como al macrociclo. Además en varios casos se demuestra la mayor generación de oxígeno singlete. Resultados con cultivos celulares in vitro demuestran el potencial uso de estos en terapia fotodinámica del cáncer.

Referencias:

1. (1) Robinson-Duggon, J.; Pizarro, N.; Gunther, G.; Zúñiga-Núñez, D.; Edwards, A. M.; Greer, A.; Fuentealba, D., Fatty Acid Conjugates of Toluidine Blue O as Amphiphilic Photosensitizers: Synthesis, Solubility, Photophysics and Photochemical Properties. *Photochemistry and Photobiology* 2021, 97 (1), 71-79.
2. Robinson-Duggon, J.; Perez Mora, F.; Valverde-Vasquez, L.; Cortes-Arriagada, D.; De la Fuente, J. R.; Gunther, G.; Fuentealba, D., Supramolecular Reversible On-Off Switch for Singlet Oxygen Using Cucurbit[n]uril Inclusion Complexes. *J. Phys. Chem. C* 2017, 121 (39), 21782-21789. Agradecimientos a ANID Fondecyt Regular grants 1160443, 1210583, DIPOG, FONDEQUIP EQM170120, EQM120065, EQM160099.



Preparación de catalizadores basados en óxidos de níquel(II) y cerio(III) másicos para la conversión catalítica de hollín proveniente de arenas de fundición

Nelson Gustavo Arcos Bartolo, Rómulo Cruz, Mario Hurtado-Cotillo, Rosario Lopez Cisneros

Universidad Nacional de Ingeniería- Peru

narcosb@uni.pe

Palabras clave Ni-Ce másico, arenas de fundición, evaporación de solvente, combustión del hollín.

Introducción: Actualmente, los problemas ambientales en las fundiciones de arena se basan en las emisiones de materiales carbonosos particulados (PM 2.5), que en su mayoría está conformada por hollín, generado por la fundición de arenas. La escasa recuperación de las arenas de fundición, produce contaminación ambiental al desechar estos remanentes.

Métodos: Los catalizadores basados en óxidos mixtos níquel-cerio fueron preparados por el método de evaporación de solvente para la oxidación catalítica del hollín. Luego, estos fueron calcinados a 800°C con una rampa de 2°C/min durante cuatro horas.

Resultados: Los resultados mostraron que el catalizador NiCe1 (fracción molar 1:9 de níquel:cerio respectivamente) fue el mejor catalizador para la combustión selectiva del hollín debido a que su temperatura de calcinación (T50) en la actividad catalítica fue de 659°C, la más baja comparado con los T50 de los catalizadores NiCe5 y NiCe9 (670 °C y 669°C, respectivamente). el catalizador NiCe1 mostró la fase del CeO2 (fluorita) con área superficial de 18 m²/g, cuyos sitios ácidos comparados a los otros catalizadores mixtos muestra sitios ácidos intermedios y fuertes. Además, NiCe1 presentó una temperatura máxima de reducción de 316°C que fue la menor temperatura comparada con los otros catalizadores. Por lo tanto, se recomienda utilizar el catalizador NiCe1 para ser soportado sobre SiO2 como trabajo futuro para realizar un estudio cinético para la combustión catalítica del hollín.

Referencias:

1. Bates, C. E. 2018. Anti-veining additive for silica sand mold. US Patente 20180056373 presentado el 29 de Agosto del 2016.
2. Andana, T., Piumetti, M., Bensaid, S., Veyre, L., Thieuleux, C., Russo, N., ... Pirone, R. (2017). CuO nanoparticles supported by ceria for NO_x-assisted soot oxidation: insight into catalytic activity and sintering. *Applied Catalysis B: Environmental*, 216, 41-58. doi:10.1016/j.apcatb.2017.05.061.
3. Alcalde-Santiago, V., Bailón-García, E., Davó-Quiñonero, A., Lozano-Castelló, D., & Bueno-López, A. (2019). Three-dimensionally ordered macroporous PrO_x: An improved alternative to ceria catalysts for soot combustion. *Applied Catalysis B: Environmental*, 248, 567-572.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE CATALIZADORES MESOPOROSOS TIPO CaO/SiO₂

Jesús Sigifredo Valencia Ríos, Luis Carlos Moreno Aldana, Grey Cecilia Castellar Ortega.

Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C., Colombia, Universidad Autónoma del Caribe, Barranquilla, Colombia
grey.castellar@uac.edu.co

Palabras clave: CaO, sílica, impregnación incipiente, catálisis.

INTRODUCCIÓN El CaO es uno de los catalizadores más estudiados en la síntesis de biodiesel, pues se trata de un óxido alcalinotérreo no corrosivo, de baja solubilidad y de alta basicidad.¹ Pero su capacidad catalítica muestra un rendimiento superior cuando es soportado sobre un óxido metálico, alúmina o sílica, lo cual mejora sus propiedades químicas y de textura, y disminuye los procesos de lixiviación y el efecto del agua.² En esta investigación se sintetizaron catalizadores tipo CaO/SiO₂ y se evaluó el efecto de la cantidad de fase activa en sus propiedades.

MÉTODOS La impregnación se realizó adicionando a 1,000 g de sílica de alta pureza marca Syloid® Grace Co, 5,0 mL de disolución de Ca(NO₃)₂ para cargas nominales de 8, 12 y 16% de fase activa. La mezcla se agitó con ultrasonido, se secó a 105°C y se calcinó a 650°C. A cada uno de los catalizadores preparados se le realizó espectrofotometría infrarroja con transformada de Fourier (IRTF), isoterma de adsorción-desorción con N₂ a 77 K, difracción de rayos X (DRX) y microscopía electrónica de barrido (MEB).

RESULTADOS Y DISCUSIÓN En el espectro IRTF de la sílica se observan las bandas características del SiO₂ que corresponde a los modos de vibraciones de estiramiento simétrico y asimétrico del enlace Si-O-Si, los modos de vibración de flexiones de enlaces Si-O-Si y O-Si-O, y las vibraciones de enlace Si-OH. También se observan otras bandas relacionadas con vibraciones de estiramiento de los grupos hidroxilo cercano a los 3400 cm⁻¹ y esta es la señal que cambia en los catalizadores estudiados (Figura 1).

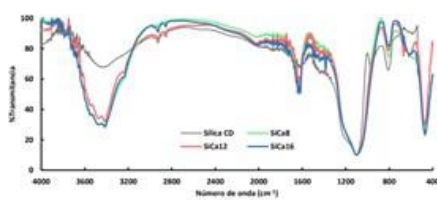


Figura 1. IRTF de la sílica y catalizadores.

Tabla 1. Propiedades de textura del soporte y catalizadores.

Muestra	Área superficial (BET) (m ² /g)	Área superficial externa (m ² /g)	Volumen de poro (BJH) (cm ³ /g)	Tamaño promedio de poro (nm)
Sílica	257	212	0,70	7,90
SiCa8	221	197	0,42	6,38
SiCa12	214	189	0,31	4,86
SiCa16	181	157	0,16	3,31

Las isotermas tanto del soporte como de los catalizadores son del Tipo IV típica de materiales mesoporosos con anillos de histéresis H3 según clasificación IUPAC.³ Después de la incorporación de la fase activa al soporte se observa una reducción de todas sus propiedades de textura como se observa en la Tabla 1. Esto indica que el soporte, aunque mantiene su estructura mesoporosa, el crecimiento de cristales de CaO bloquea la red porosa. De los resultados de microscopía electrónica de barrido se puede observar que el óxido de calcio en todas las muestras se distribuye homogéneamente sobre la superficie externa de la sílica (Figura 2) y la difracción de rayos X confirma que este recubrimiento forma una capa muy delgada porque sólo se obtienen señales de la sílica amorfa.

CONCLUSIÓN: De los resultados se concluye, que el óxido de calcio se dispersó homogéneamente formando una delgada película sobre la sílica, disminuyendo gradualmente las propiedades de textura de los catalizadores con el aumento de la carga.

Referencias

1. Banković-Ilić, I. B.; Miladinović, M. R.; Stamenković, O. S.; Veljković, V. B. *Renew. Sustain. Energy Rev.* **2017**, *72* (January), 746–760.
2. Marinković, D. M.; Stanković, M. V.; Veličković, A. V.; Avramović, J. M.; Miladinović, M. R.; Stamenković, O. O.; Veljković, V. B.; Jovanović, D. M. *Renew. Sustain. Energy Rev.* **2016**, *56*, 1387–1408.
3. Cychosz, K. A.; Thommes, M. *Engineering* **2018**, *4* (4), 559–566.



SÍNTESIS DE CARBÓN ACTIVADO A PARTIR *Zea mays* L. (maíz morado) IMPREGNADO CON Np-Ag PARA EL DESARROLLO DE SUPERCAPACITORES

Huarote Emily, Cárdenas-Riojas Andy, Planes Gabriel A., Monje Ivonne E., Calderón Juan C., López Meza E, Baena-Moncada Angélica M.

Universidad Nacional de Ingeniería ,Lima, Perú, Universidad Nacional de Río Cuarto, Córdoba, Argentina

ehuaroteg@uni.pe

Palabras claves: Supercapacitores, nanopartículas, Carbón activado.

Desarrollar nuevos materiales sostenibles para la conversión y almacenamiento de energía es esencial para disminuir la dependencia energética de los combustibles fósiles. Se plantea el uso de biomasa residual de maíz morado como precursor carbonoso y agente reductor para la formación de nanopartículas, actuando como material de electrodo para supercapacitores. El extracto etanólico obtenido del pulverizado de coronta (tusa) fue utilizado para reducir el precursor AgNO₃. Posteriormente, el residuo sólido de la extracción fue tratado químicamente para formar carbón activado (CA). Finalmente, las nanopartículas de plata formadas se depositaron sobre el CA utilizando la técnica de autoensamblado capa por capa. La caracterización del extracto etanólico demuestra la presencia de antocianinas, que se evidencia mediante: Reacción de Shinoda (Carranza V. y Huayanay V. 2009), viraje de color a diferentes pH (Olga L., 2016), y el método del pH diferencial (Rafael S. 2017). Los análisis FTIR, confirman la presencia de los diferentes grupos funcionales (alcohol, aldehído, alquenos, entre otros). Se obtuvieron nanopartículas de plata (Np-Ag) esféricas con tamaños entre 40 – 49 nm, que se caracterizaron por UV-Vis, DLS, DRX y FE-SEM/EDS. El análisis morfológico y de composición evidencia la presencia de porosidad en el CA y la presencia de Np-Ag en su superficie La capacitancia específica del CA determinada por voltamperometría cíclica es 173 F g⁻¹. Estos resultados preliminares demuestran que los materiales compuestos de CA/Np-Ag a partir de biomasa residual de maíz morado se perfilan como una alternativa económica y eco-amigable, para el desarrollo de electrodos en supercapacitores.

Referencias

1. Carranza Vega D. E. & Huayanay Viera J. A. Determinación de metabolitos secundarios del tallo de croton alnifolius l. (tunga). Tesis de Pregrado. Universidad Nacional de Trujillo. Perú. 2009.
2. Olga L. Investigación Fitoquímica. Métodos en el estudio de productos naturales. Lima – Perú. Fondo Editorial. Lima. 2016. Pp. 254
3. Rafael Sánchez, E. Extracción y Cuantificación de Antocianinas de maíz morado (*Zea mays* L.) utilizando dos solventes a diferentes temperaturas y tiempos de extracción. Tesis de Pregrado. Universidad Nacional de Cajamarca. Perú. 2017.



ESTUDIO ESPECTROSCÓPICO Y CINÉTICO DE LA RELACIÓN ENTRE DERIVADO DE TETRAZINA E IONES CÚPRICOS. EVALUACIÓN COMO SENSOR COLORIMÉTRICO DE COBRE.

Guillermo E. Quintero, Carlos Rojas-Romo, Margarita E. Aliaga

Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile. Universidad de Chile, Santiago, Chile.

gequintero@uc.cl

Palabras claves: Iones cúpricos, tetrazina-derivados, catálisis.

Introducción: El cobre cataliza la formación de especies reactivas de oxígeno en el medio intracelular. Estas especies dañan biomoléculas por estrés oxidativo. Una homeostasis de cobre perturbada está asociada a trastornos como la enfermedad de Menkes, Wilson, Alzheimer, etc¹. Por tanto, la detección de niveles de cobre es de gran relevancia.

Métodos: En este trabajo fue sintetizado el derivado de tetrazina 3,6-bis(3,5-dimetil-1H pirazolil)-1,2,4,5-tetrazina (**TzBp**) de acuerdo a la literatura². El derivado y su reacción con iones cúpricos (Cu(II)) fueron estudiados por Resonancia Magnética Nuclear (RMN), Espectrometría de masas de alta resolución (HRMS), Espectroscopía UV-Vis y Fluorescencia de Emisión.

Resultados y conclusiones: **TzBp** presentó una respuesta selectiva hacia el ion Cu(II), que involucra el descenso de su absorbancia a 294 nm debido a la interacción con este ion. Este efecto fue dependiente de la concentración de iones cúpricos obteniéndose un límite de detección (LD) de 3,24 μM . Además, a través de estudios cinéticos se demostró que **TzBp** experimenta una reacción de descomposición dependiente y catalizada por Cu(II). Esta reacción fue seguida espectrofotométricamente a una longitud de onda de 294 nm a diferentes pH. Se determinó una constante de velocidad de segundo orden de 40,08 $\text{M}^{-1}\text{s}^{-1}$ bajo condiciones de pH y temperatura de 5,5 y 25 $^{\circ}\text{C}$, respectivamente. A partir de los resultados obtenidos en la presente investigación, se propone al compuesto **TzBp** como una sonda colorimétrica útil para la determinación de Cu(II) en matrices acuosas. Estudios para la determinación de los parámetros analíticos y de selectividad se encuentran en ejecución.

Referencias:

1. Clerc, M.; Heinemann, F.; Spingler, B.; Gasser, G. A Luminescent NOTA-Based Terbium(III) “Turn-Off” Sensor for Copper. *Inorganic Chemistry* **2020**, 59 (1), 669– 677.
2. Zhu, J.; Hiltz, J.; Lennox, R. B.; Schirmacher, R. Chemical Modification of Single Walled Carbon Nanotubes with Tetrazine-Tethered Gold Nanoparticles via a Diels– Alder Reaction. *Chemical Communications* **2013**, 49 (87), 10275-10277.



ESTUDIO ESPECTROSCÓPICO DE LA INTERACCIÓN 7-DIETILAMINOCUMARINA-BENZOTIAZOL Y CUCURBIT[7]JURILO. EFECTO DE LA PRESENCIA DE SULFITO

Kevin Droguett Muñoz, Olimpo García Beltrán, Margarita Aliaga Miranda

Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile. Universidad de Ibagué, Ibagué, Colombia.

kdroguett@uc.cl

Palabras claves: Cucurbit[7]urilo, 7-dietilamino cumarina-benzotiazol, sonda fluorescente, sulfito

Resumen: Esta investigación se centra en demostrar la existencia de una interacción anfitrión-huésped entre una sonda derivada de 7-dietilamino cumarina-benzotiazol con el macrociclo CB[7], lo cual es comprobado por medios espectroscópicos, concluyendo que existe una interacción 1:1, interacción que mejora la detección de sulfitos de la sonda.

Introducción: Las propiedades fotofísicas de sondas derivadas de 7-dietilaminocumarina se ven afectadas por la polaridad del solvente. Así mismo, diversas investigaciones han demostrado como la inclusión de este tipo de sondas en cavidades hidrofóbicas, como son los macrociclos, puede variar sus propiedades al modificar la polaridad del medio⁽¹⁾.

Materiales y métodos: En este trabajo se realiza un estudio espectroscópico (UV-Vis y de emisión) de la interacción entre la sonda derivada de 7-dietilaminocumarina-benzotiazol (**BA**) y el macrociclo cucurbit[7]urilo (CB[7]). El modo de interacción fue evaluado usando Resonancia Magnética Nuclear (RMN).

Resultados y conclusiones: Resultados demuestran que **BA** es capaz de formar un complejo de inclusión de tipo anfitrión huésped con CB[7], con estequiometría 1:1. Interesantemente, la interacción entre **BA** y CB[7] favorece la respuesta de la sonda hacia iones sulfito generando una transformación química en **BA** asociada a una reacción de Michael, lo cual ocurre incluso dentro de la cavidad del CB[7], siendo esto comprobado por medio de fluorescencia y espectrometría de masa.

Finalmente, se obtiene que la formación de este complejo de inclusión mejora la respuesta de la sonda en términos de límites de detección y cuantificación hacia iones sulfito.

Referencias:

1. Lee, J.; Samal, S.; Selvapalm, N.; Kim, H.; & Kim, K. Cucurbituril homologues and derivatives: New opportunities in supramolecular chemistry, Acc. Chem Res. 2003, 36 621–630.



ESTUDIO DE LA CONDUCTIVIDAD TÉRMICA APLICADO A CADENAS SIMPLES DE POLIETILENO UTILIZANDO LA FUNCIÓN DE GREEN

Álvaro García, Eider Iván Vivas, Javier Vergara, Ricardo Vivas-Reyes

Grupo GICIS, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Cartagena, Colombia

rvivasr@unicartagena.edu.co

Introducción: Hoy en día los diferentes estudios sobre conductividad han cobrado vital importancia pues de la eficiencia de dichos procesos depende mucho de nuestro futuro. En particular los estudios para mejorar propiedades térmicas de los materiales poliméricos voluminosos es un problema abierto que congrega gran número de investigaciones para entender la conductividad a este nivel.

Métodos Se calcula la conductividad térmica del polietileno de alta densidad usando dinámica molecular en equilibrio Green-Kubo. Las cadenas de polietileno fueron modeladas empleando un modelo simplificado de una sola cadena usando el metilo como un solo átomo con un campo de fuerza que determina las interacciones entre los átomos unidos.

Resultados y Conclusiones. La conductividad térmica de una cadena de polietileno (26 W/mK) alcanza valores mayores al aumentar la longitud de la cadena, este enfoque proporciona estrategias útiles para optimizar las propiedades térmicas intrínsecas de las nano estructuras poliméricas. Esto indica que poseen una orientación de aproximadamente 4 órdenes de magnitud menores a las cadenas de ultra alta densidad, lo que quiere decir que existe un margen de mejora para las nano fibras. Por otro lado, los resultados muestran que la conductividad térmica aumenta al aumentar la longitud de la cadena mientras que la tendencia se debilita al disminuir la longitud, indicando que el enfoque de la función de Green-Kubo es útil para optimizar las propiedades térmicas intrínsecas de las estructuras poliméricas como aumentar la conductividad térmica del electrolito aumentando el alineamiento de las cadenas poliméricas en la región cristalina, sin desmejorar la conductividad iónica que esta se presenta en la región amorfa.

Referencias

1. Frisch, M.J., Trucks, G.W.; Schlegel, H.B., Gaussian 09; Molecular wave function calculator to obtain a series of atomic and molecular properties; Gaussian Inc, Wallingford CT, 2004.
2. Volz S and Chen G 2000 Phys. Rev. B 61 2651.
3. Chamley M, Textor M and Acikgoz C 2011 React. Funct. Polym. 71 329 Wang RY, Segalman RA, Majumdar A. Appl Phys Lett 2006; 89:173113. Jin JZ, Manoharan MP, Wang Q, Haque MA. Appl Phys Lett 2009; 95:033113. Losego MD, Moh L, Arpin KA, Cahill DG, Braun PV. Appl Phys Lett 2010; 97:011908.



PETROQUÍMICA Y GEOQUÍMICA

ILLCL-510

EFFECT OF MONO AND DIVALENT IONS ON WETTABILITY ALTERATION DURING ADJUSTED BRINE COMPOSITION WATERFLOODING ON SANDSTONE ROCK.

Fabián L. Monares Bueno, Gustavo Maya, Eduardo Manrique, José Antonio Henao.

Universidad Industrial de Santander, Instituto Colombiano del Petróleo ECOPEPETROL, Colombia.

leonardomonares@hotmail.com

INTRODUCTION: Recent researches highlight the wettability alteration as a consequence of the different mechanisms involved in techniques such as ABCW and LSW. Therefore, the understanding of this recovery process is of great interest. This work focuses on determining the impact of mono and divalent inorganic ions on the WA of sandstone-rock.

METHODOLOGY: To establish relations between type and concentrations of the ions with the crude oil and their interaction with the surface, methodologies for measuring the contact angle captive drop in environmental conditions were used. Mono and divalent inorganic salts were used in different concentrations for wettability evaluations using an optical tensiometer.

RESULTS AND CONCLUSION: In the evaluation of aged Sandstone rock slices, there was a decrease in oil wettability at 5.000 ppm when salts containing chloride and K₂SO₄ were evaluated, while the opposite happened for the other solutions containing sulfate ion. At 3.000 ppm, an increase in oil wettability was observed using salts containing divalent cations Ca²⁺ and Mg²⁺, with the exception of CaSO₄ evaluated only at 1.000 ppm due to its low solubility. These results indicate the ions with the greatest influence on the wettability of sandstone rocks and how they could be manipulated to obtain the most beneficial wettability change in an Adjusted Brine Composition Waterflooding. The observations were correlated using coreflooding displacements.

Wettability was studied by contact angle measurement on reservoir systems. This evaluation seeks to provide information and tools that allow designing new protocols to maximize Colombian oil recovery using ABCW and Low Salinity Waterflooding, including its combination with polymer-flooding.

REFERENCES:

1. Al-Saedi, H. N.; Flori, R. E.; Brady, P. V. Effect of Divalent Cations in Formation Water on Wettability Alteration during Low Salinity Water Flooding in Sandstone Reservoirs: Oil Recovery Analyses, Surface Reactivity Tests, Contact Angle, and Spontaneous Imbibition Experiments. *J. Mol. Liq.* **2019**, *275*, 163–172.
2. Rayhani, M.; Simjoo, M.; Chahardowli, M. Insights into Effects of Water Chemistry on the Sandstone Wetting Characteristics. *J. Pet. Sci. Eng.* **2020**, *195* (August), 107929.
3. Liu, Z.; Liang, Y.; Wang, Q.; Guo, Y.; Gao, M.; Wang, Z.; Liu, W. Status and Progress of Worldwide EOR Field Applications; **2020**; Vol. 193.



ACONDICIONAMIENTO DE DATOS GEOQUÍMICOS PARA MAPEO GEOQUÍMICO REGIONAL EN COLOMBIA

Jiménez J.F., Pérez A., Mendoza O.G., Mendoza O., Prieto G.

Servicio Geológico Colombiano

ifjimenez@sgc.gov.co

Palabras Claves: mapeo geoquímico regional, levelling.

INTRODUCCIÓN: Dentro del proceso de elaboración del Atlas geoquímico de Colombia, el acondicionamiento de los datos analíticos es un proceso fundamental que permite garantizar no solo la calidad de la información sino la base analítica y estadística para realizar la integración de información histórica y reciente en la producción de mapas geoquímicos regionales. Este acondicionamiento permite, mediante un proceso matemático sencillo, que los datasets utilizados en el mapeo geoquímico puedan integrarse y subsanar algunos efectos de batch mediante levelling. Estos efectos obedecen a variabilidad temporal en la realización de los análisis, cambios en tiempos de reacción o temperaturas de extracción, variabilidad en las técnicas analíticas, métodos de digestión o cambios en la fracción granulometría del material geológico analizado (Pereira et al. 2015).

Dentro de las técnicas de levelling se destacan la media y mediana que implican la división de cada grupo de datos por sus parámetros de tendencia central. También el levelling por Z-score en el cual cada resultado es transformado con base en el Z-score de su grupo o el levelling por Gauss que ajusta los datos a una distribución normal. El presente trabajo muestra el acondicionamiento de los múltiples sets de datos, incluida la aplicación de levelling en la producción de mapas geoquímicos del Atlas geoquímico de Colombia.

MÉTODOS: Se realizó un control de calidad para evaluar la calidad de la información incluidos los límites de detección y la consistencia entre las diversas técnicas analíticas (ICP-MS, AAS, XRF, EE, ICP-AES y AFS entre otras) y los métodos de digestión de las muestras (ataque tetrácido, agua regia, fusión, pastillas prensadas y perlas fundidas entre otras) de cada metodología. Posteriormente se realizaron interpolaciones por IDW modificado (distancia inversa ponderada) para cada variable, con tamaño de celda de 1x1 km. Sobre la interpolación se delimitaron los efectos de batch caracterizados por la presencia de patrones regulares sin concordancia con la geología y orientación de las estructuras regionales. Posteriormente se evaluaron los factores que pueden generar dicho efecto mediante diagramas de caja y bigotes, gráficos de probabilidad, histogramas y dispersogramas. A continuación, se generaron interpolaciones con cada uno de los métodos de levelling y se seleccionó el método más simple que lograra atenuar el efecto de batch (el método de la mediana fue el más adecuado por su efectividad y simpleza). Por último, se retorna a las unidades de concentración originales mediante una operación matemática simple y se genera una nueva interpolación con los datos nivelados.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Se generaron mapas geoquímicos regionales de distribución elemental con siete clases correspondientes a los percentiles 30, 60, 80, 90, 95 y 98 y 100. El mapa de Ho presentó un efecto de batch muy marcado debido a resultados obtenidos en un laboratorio diferente y con una digestión más efectiva en el ataque químico de este elemento de tierras raras, y adicionalmente, se evidencia otro efecto de batch por variaciones en los tiempos de reacción y la utilización de una temperatura de extracción superior. En los gráficos de boxplot, el lote con efecto de batch presenta concentraciones medias superiores en comparación con el boxplot del lote de análisis que rodea completamente al primero (medianas de 0.87 ppm y 0.34 ppm). Al aplicar el levelling por mediana el efecto de batch es superado y empiezan a ser evidentes en la interpolación los trends geoquímicos sobre las márgenes oriental y occidental de la cordillera oriental con tendencia NE. El mapa de Be presentó un efecto de batch por cambio en la técnica analítica (ICP-MS e ICP-AES) y metodológico (ataque químico). Se realizó levelling por mediana y se suavizó significativamente dicho efecto. El mapa de Na presentó un efecto de batch por cambios en la digestión ácida de unas muestras y fusión con mezcla metaborato y tetraborato de litio en otras. La interpolación generada luego del levelling presentó alta concordancia con las unidades geológicas, desapareciendo de esta forma el efecto de batch.

Finalmente, el Y mostró un efecto de batch muy marcado sin explicación analítica evidente y no fue posible su nivelación. Se estableció un problema de contaminación en el proceso de molienda, específicamente en la pulverización realizada con bolas de nitruro de silicio, dado que su núcleo está enriquecido en este elemento y luego del desgaste del material, se genera la liberación de Y en esta etapa del proceso de preparación de las muestras. En conclusión, la trazabilidad del origen de los datos y de las diversas metodologías analíticas es fundamental para evaluar los posibles factores que puedan generar un efecto de batch. En este sentido, cada situación específica de levelling requiere un ejercicio de ensayo y error para seleccionar el método más adecuado y simple para finalmente culminar el proceso de acondicionamiento de los datos geoquímicos.

REFERENCIAS:

1. Pereira, B., Vandeuren, A. & Sonnet, P., 2015. Geochemical mapping based on multiple geochemical datasets: A general method, and its application to Wallonia (Southern Belgium). Journal of Geochemical Exploration, 158(AUGUST), pp.34-43.



EFFECTO DE FORMULACIONES SURFACTANTE/NANOPARTÍCULAS EN LA SEPARACIÓN DE CRUDOS PESADOS PRESENTES EN SUPERFICIES TIPO ARENISCA

Michell A. Jiménez^{1,2}, Lizeth N. Melo¹, Leidy C. Márquez¹, Diego F. Pinto¹, Daniel Molina V³, Emiliano Ariza³, Adan Y. León^{1,2}

¹Grupo de Investigación Recobro Mejorado, GRM, ²Grupo de Investigaciones en Corrosión, GIC, ³Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular, LEAM, Universidad Industrial de Santander - UIS, A.A 678 Bucaramanga, Colombia.

michell2208108@correo.uis.edu.co

Palabras Clave: EOR, formulaciones, surfactante, SiO₂.

INTRODUCCIÓN: La adherencia de crudo en rocas porosas hace difícil su extracción, especialmente si son crudos pesados, por lo anterior, nuevas formulaciones surfactantes/nanopartículas (NPs) fueron evaluadas como herramienta en el recobro mejorado (EOR). Estas mezclas modifican la mojabilidad del medio poroso, incrementando la eficiencia en la recuperación de crudo [1-3].

MÉTODOS: Se realizaron pruebas de detergencia sobre arena Ottawa 80/100 embebida en crudos pesados (12,5 a 16 °API) a 60 °C por 120 minutos, empleando soluciones con 10.000 ppm de NaCl y 5.000 ppm de surfactante A, en presencia de SiO₂-NPs con concentraciones de 100, 400 y 800 ppm.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Los resultados de las pruebas evidenciaron que el porcentaje de recuperación de los crudos en presencia del surfactante estuvieron en el intervalo de 40 – 67 %p/p, mientras que el uso de la mejor formulación de surfactante con SiO₂-NPs a 800 ppm promovió rendimientos de recuperación en el orden de 62 – 97 %p/p. Por otra parte, se observó que el incremento en la cantidad de crudo recuperado está relacionado con el contenido de las fracciones SARA en el orden de saturados > aromáticos > resinas > asfáltenos. A partir de los resultados, se determinó que el porcentaje de crudo recuperado presenta mayor variación con el incremento de la concentración de las nanopartículas en la solución. Los resultados de innovación muestran que el desarrollo de formulaciones surfactantes/NPs permite mejorar las propiedades de interacción del sistema roca/fluido, lo cual indica que su implementación se puede considerar en estudios potenciales de escalamiento.

REFERENCIAS:

1. Agista, M.N.; Guo, K. y Yu, Z. A State-of-the-Art Review of Nanoparticles Application in Petroleum with a Focus on Enhanced Oil Recovery. *Appl. Sci.* **2018**, *8*, 871 (1–29). <https://doi.org/10.3390/app8060871>
2. Kong, L.; Sun, J. y Bao, Y. Preparation, characterization and tribological mechanism of nanofluids. *RSC Adv.* **2017**, *7*(21), 12599-12609. <https://doi.org/10.1039/C6RA28243A>
3. Li, X.; Bai, Y.; Sui, H. y He, L. Understanding desorption of oil fractions from mineral surfaces. *Fuel.* **2018**, *232*, 257–266. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.05.112>



PROCESOS, TECNOLOGÍA E INNOVACIÓN.

ILJCL-587

PRESSURIZED LIQUID EXTRACTION OF PHENOLIC COMPOUNDS FROM BRAZIL NUT (BERTHOLLETIA EXCELSA HBK) SKIN.

Wilson V. Vásquez, M. Pilar Cano and Tiziana Fornari.

INTRODUCCIÓN

Brazil nut (*Bertholletia excelsa* HBK) is a nut native from the Amazon region with large industrial production, which in turn generates large amounts of by-products without current outstanding value. Brazil nut skin (BNS) by-product was studied in the perspective of obtaining a food bioactive ingredient, rich in phenolic compounds.

METODOS

BNS from Perú was defatted using supercritical CO₂ and then extracted by Pressurized Liquid Extraction (PLE), evaluating the effect of temperature (50, 100, 150 and 200oC) and solvent (ethanol and methanol in water at 50, 75 and 100 %, v/v) on the extraction yield and total phenolic compounds (TPC) content.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

The influence of temperature on yield and TPC was evidenced for both types of solvents and their mixtures with water. The addition of water to the alcohol had a poor influence on yield and TPC values at low temperatures, but significant influence at higher temperatures. Then, with methanol 50% at 200 oC, the higher yield was obtained (38.4%, w/w) and the TPC content was 5435 mg GAE/100g of defatted skin, and in the case of 50% ethanol the yield was slightly lower (32.9%, w/w) and the TPC content was 4673 mg GAE/100g of defatted skin. The effect of temperature and type of aqueous solvent on the extraction performance can be attributed to several factors, including increased solutes solubility, disruption of solute-matrix interactions, increased diffusion rate and solvent polarity. The analysis developed suggests the potential use of Brazil nut skin as a source of a phenolic-rich ingredient with potential bioactive function.

REFERENCIAS

John, Jenny A., and Fereidoon Shahidi. 2010. "Phenolic Compounds and Antioxidant Activity of Brazil Nut (*Bertholletia Excelsa*)." *Journal of Functional Foods* 2(3): 196–209.

Prgomet, Iva et al. 2019. "A Box-Behnken Design for Optimal Extraction of Phenolics from Almond By-Products." *Food Analytical Methods* 12(9): 2009–24.

Tena, Maria T. 2018. "Pressurized Liquid Extraction." *Encyclopedia of Analytical Science*: 78–83.

PALABRAS CLAVES

Brazil-Nut-Skin, Pressurized-Liquid-Extraction, Phenolic-Compounds, Yield

INSTITUCIONES FINANCIADORAS

Vasquez thanks the scholarship "Presidente de la República" postgrad program from the Ministry of Education of the Republic of Peru. Also, we acknowledge the financial support of Spanish research projects ALIBIRD P2013/ABI2728), RTA2015-00044-C02-02 and PID2020-118300RB-C21



CIENCIA + MEDIO AMBIENTE + ECONOMÍA = BIOECONOMÍA, LA FÓRMULA DEL PRESENTE PARA UN MEJOR FUTURO.

Lili Johanna Rodríguez Gallo¹, Yesmith Santos Panqueva¹, Bárbara De Las Mercedes Moreno Murillo¹, Carlos Eduardo Narváez Cuenca¹, Fabián Parada Alfonso¹, Francisco José Arias Aragonés².

¹ Universidad Nacional de Colombia, Bogotá-Colombia

² Institución Universitaria Mayor de Cartagena, Cartagena de Indias-Colombia

lilirodriguezgallo@gmail.com

PALABRAS CLAVES:

Bioeconomía; Desarrollo_sostenible; Química verde; Agroindustria

INTRODUCCIÓN

La bioeconomía es un área emergente e interdisciplinaria en Latinoamérica y el Caribe, plantea un modelo económico sostenible mediante el aprovechamiento de biorecursos, requiriendo una mirada holística de la CTeI[1]. Este trabajo es una primera aproximación conceptual sobre el tema y expone algunas propuestas para el aprovechamiento de biomásas promisorias.

MÉTODO

Las propuestas seleccionadas surgen de integrar resultados de investigación básica, realizada en torno a subproductos biológicos y/o agroindustriales [2-4], con conceptos económicos y realidades sociales. Este trabajo indagada diversos aportes en el área, como uno de los resultados de una tesis que se está desarrollando en Economía.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Algunas iniciativas pueden aportar a promover el desarrollo rural sostenible, y con ello el área de la bioeconomía en el país ya que: (i)emplean CTeI para plantear posibles aplicaciones tecnológicas para algunas biomásas, (ii)desarrollan y utilizan técnicas verdes de extracción (iii)proponen procesos para valorizar las cadenas productivas asociadas. Dentro de las propuestas seleccionadas, el empleo de semillas de moringa en biofiltros favorece la reducción de E. coli 99.99%[2] y los extractos de la pepa y almendra de mango contienen propiedades antioxidativas[3] y anti proliferativas[1] de células cancerígenas. Una vez constatada la viabilidad técnica, antes de avanzar en el escalonamiento tecnológico de cada proceso, es necesario realizar estudios de ciclo de vida y de viabilidad económica, teniendo entre las alternativas la conformación interdisciplinaria de un spin-off o la postulación a diversas convocatorias, con el fin de proceder hacia posibles aplicaciones en entornos similares a los reales y posteriormente en entornos relevantes.

REFERENCIAS

- [1] Rodríguez,-A.G., Mondaini,-A.O., Hirschfeld,-A.A.(2017)Bioeconomía en América Latina y el Caribe. Serie Desarrollo Productivo, CEPAL.
- [2] Infante,-N., Morato,-J., Rodríguez,-R.(2020)Biofiltros funcionalizados con M. oleífera y sistema hidropónico NFT para el tratamiento de aguas residuales. Rev. Latinoam. Ambi. Cienc.,(11):257-260.
- [3] Sánchez,-P., Gutiérrez,-L., Vargas,-S., Martínez,-H., Parada, F., Narváez, C.(2019)Valorisation of mango peel: Proximate composition, supercritical fluid extraction of carotenoids, and application as an antioxidant additive for an edible oil. J. Supercrit. Fluids,(152):104574.
- [4] Ballesteros,-D., Álvarez,-G., Morantes,-S., Sánchez,-A., Ibáñez,-E., Parada, F., Cifuentes, A.(2019)An integrated approach for the valorization of mango seed kernel: Efficient extraction solvent selection, phytochemical profiling and antiproliferative activity assessment. Food Res. Internat.,126:108616.

INSTITUCIONES FINANCIADORAS

Agradecimientos a la Universidad Nacional de Colombia por el apoyo financiero dado al proyecto código HERMES 47233.



RECUPERACIÓN DE COMPUESTOS BIOACTIVOS PRESENTES EN RESIDUOS VEGETALES GENERADOS EN PLAZAS DE MERCADO

William Alexander Díaz López, Vladimir Ernesto Vallejo-Castillo, Esteban Hernán Arteaga Cabrera, Kimberly Yaritzza Vallejo Escobar, Gregory Ordoñez Gómez, Oswaldo Osorio Mora.

Universidad de Nariño.

williamdiaz@udena.edu.co

Palabras claves: Residuos, Ultrasonido, Polifenoles, Antioxidantes.

Introducción: La recuperación de compuestos bioactivos es una alternativa de aprovechamiento de residuos vegetales y representa gran valor para la industria alimentaria. El objetivo de este trabajo fue extraer mediante ultrasonido compuestos fenólicos y determinar la actividad antioxidante de residuos de repollo (*Brassica oleracea*) y arveja (*Pisum sativum*).

Métodos: Cada extracto empleó como solvente una mezcla etanol-agua a 50%, asistido con ultrasonido a diferentes intervalos de tiempo. La cuantificación de polifenoles y flavonoides, se realizó con el método Folin-Ciocalteu y colorimétrico de cloruro de aluminio respectivamente, la capacidad antioxidante se determinó mediante los métodos DPPH y ABTS¹.

Resultados y conclusiones: El análisis estadístico indicó que el mayor contenido de polifenoles en repollo se obtuvo al minuto 30 con $2219,36 \pm 39,74$ mgGAE/100gFw y para flavonoides al minuto 20 con $767,65 \pm 37,83$ mgCE/100gFw, la actividad antioxidante se determinó al minuto 60 para DPPH y ABTS con $2237,98 \pm 127,37$ y $2242,64 \pm 125,90$ μ MTrolox/100g, respectivamente.

En arveja se obtuvo un contenido de polifenoles de $3026,22 \pm 145,26$ mgGAE/100gFw en 50 minutos y para flavonoides al minuto 90 con $1162,25 \pm 28,6$ mgCE/100gFw, la actividad antioxidante se determinó al minuto 50 para DPPH y ABTS con $2843,93 \pm 151,32$ y $2841,6 \pm 149,58$ μ MTrolox/100g, respectivamente. Se confirma que la aplicación de ultrasonidos en extracción de compuestos bioactivos reduce tiempos, costos y es eficiente para obtener extractos de residuos de cítricos con una actividad antioxidante efectiva. La extracción asistida con ultrasonidos presentó un efecto directo en el contenido de compuestos fenólicos y actividad antioxidante. Los resultados se reportados se encuentran dentro del rango informado por autores ²³.

Referencias:

1. Galván D'Alessandro, L.; Vauchel, P.; Przybylski, R.; Chataigné, G.; Nikov, I.; Dimitrov, K. Integrated Process Extraction-Adsorption for Selective Recovery of Antioxidant Phenolics from *Aronia Melanocarpa* Berries. *Sep. Purif. Technol.* **2013**, 120, 92–101. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2013.09.027>.
2. Jaiswal, A. K.; Rajauria, G.; Abu-Ghannam, N.; Gupta, S. Effect of Different Solvents on Polyphenolic Content, Antioxidant Capacity and Antibacterial Activity of Irish York Cabbage. *J. Food Biochem.* **2012**, 36 (3), 344–358. <https://doi.org/10.1111/j.1745-4514.2011.00545.x>.
3. Nithiyantham, S.; Selvakumar, S.; Siddhuraju, P. Total Phenolic Content and Antioxidant Activity of Two Different Solvent Extracts from Raw and Processed Legumes, *Cicer Arietinum* L. and *Pisum Sativum* L. *J. Food Compos. Anal.* **2012**, 27 (1), 52–60. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2012.04.003>.



Generación y cuantificación de Formaldehído in situ para la Síntesis de Nopol en un Microreactor de Flujo Continuo

Diana C. García¹, Jorge H. Sánchez², Juan D. Martínez², Edwin A. Alarcón¹, Aída Luz Villa¹.

¹Grupo Catálisis Ambiental, Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Antioquia, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia. ²Grupo de Pulpa y Papel, Departamento de Ingeniería Química, Universidad Pontificia Bolivariana, P.O. Box 56006, Medellín, Colombia.

dianac.garcial@udea.edu.co

Palabras clave: Formaldehído, DoE, Parformaldehído, Nopol.

Introducción: El formaldehído monomérico es un compuesto químico que no se encuentra disponible comercialmente debido a su alta reactividad. En la producción de nopol, se requiere β -pineno y una fuente anhidra de formaldehído para su generación in situ, siendo el paraformaldehído la fuente más usada por su bajo costo y fácil aplicación.

Métodos: Se determinó la cantidad de formaldehído despolimerizado utilizando un diseño de experimentos factorial de 3x4 con una repetición teniendo como variables de entrada el flujo de nitrógeno en 3 niveles y la temperatura de descomposición del formaldehído en 4 niveles y como variable respuesta la concentración de formaldehído absorbida.

Resultados y conclusiones: A partir del diseño de experimentos (DoE) se obtuvo una ecuación empírica que se ajustó a un modelo cuadrático con un nivel de confianza del 95% y un r^2 ajustado del 94.15%. Se encontró que existe una correlación negativa entre la concentración y el flujo y una correlación positiva entre la temperatura y la concentración; por lo tanto, se obtuvo una mayor concentración de formaldehído con la mayor temperatura (80°C) y el menor flujo (0.6 mL/min). Las concentraciones de formaldehído variaron en un rango de 1.05- 13.08 % p/p, para las temperaturas y flujos empleados en esta experimentación. Finalmente, se realizó la reacción de condensación de Prins en un microreactor de flujo continuo y se cuantificó el formaldehído reaccionante.

Referencias:

1. Walker, J. F. Formaldehyde Tank Cars., 3rd. Editi.; Reinhold publishing corporation: New York, 1964.
2. Casas-Orozco, D.; Alarcón, E.; Villa, A. L. Kinetic Study of the Nopol Synthesis by the Prins Reaction over Tin Impregnated MCM-41 Catalyst with Ethyl Acetate as Solvent. Fuel 2015, 149, 130–137. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2014.08.067>.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE AGREGADOS ENZIMÁTICOS ENTRECruzADOS (CLEAs) DE UNA NOVEDOSA PEROXIDASA DE *Panicum maximum* PARA LA DEGRADACIÓN DE ÍNDIGO CARMÍN

Angie V. Pérez N., Diana P. Vargas-Delgadillo, John J. Castillo, Oveimar Barbosa.

Universidad del Tolima

angievp19@gmail.com

Palabras clave. CLEA, colorante, inmovilización, peroxidasa.

Introducción. La peroxidasa de *Panicum maximum* (PPM) exhibe gran potencial para la degradación de colorantes. Sin embargo, presenta una baja estabilidad operacional que dificulta su uso en procesos de biodegradación. En este sentido, se sintetizaron CLEAs de PPM para mejorar sus propiedades biocatalíticas y degradar el colorante índigo carmín.

Métodos. Se empleó PPM previamente aislada y purificada. Los CLEAs de peroxidasa se obtuvieron usando etanol como agente precipitante y glutaraldehído como agente entrecruzante. Se realizó la caracterización funcional de la enzima soluble y los agregados enzimáticos. Los CLEAs fueron evaluados en la degradación del índigo carmín.

Resultados y conclusiones. Los CLEAs de peroxidasa demuestran un incremento significativo de su actividad específica y estabilidad en condiciones drásticas (pH, temperatura y solventes orgánicos) en comparación con la enzima soluble. La concentración y tipo del precipitante, concentración de glutaraldehído y tiempo de insolubilización afectan la actividad y rendimiento de la agregación y entrecruzamiento enzimático. Los CLEAs presentaron una eficiencia catalítica superior en la degradación de índigo carmín en comparación con la enzima nativa. Se concluye que la estrategia de inmovilización libre de soportes a través del entrecruzamiento de agregados enzimáticos permitió la estabilización de PPM incrementando su eficiencia catalítica en la degradación de índigo carmín.

Referencias.

1. Centeno, D. A.; Solano, X. H.; Castillo, J. J. A New Peroxidase from Leaves of Guinea Grass (*Panicum Maximum*): A Potential Biocatalyst to Build Amperometric Biosensors. *Bioelectrochemistry* **2017**, 116, 33–38. <https://doi.org/10.1016/j.bioelechem.2017.03.005>.
2. Morales, A.; Barbosa, O.; Rueda, N.; Fonseca, Z.; Torres, R.; Rodrigues, R. C.; Ortiz, C.; Fernandez-Lafuente, R. Optimization and Characterization of CLEAs of the Very Thermostable Dimeric Peroxidase from *Roystonea Regia*. *RSC Adv.* **2015**, 5 (65), 53047–53053. <https://doi.org/10.1039/c5ra06464c>.



OBTENCIÓN DE BIOCATALIZADORES EN FASE SOLIDA DE GLUCOSIDASA DE ASPERGILLUS NIGER Y SU APLICACIÓN EN LA SÍNTESIS DE GLICOSIDOS DE CARVACROL.

Jenny Alejandra Avila Ospina, Luis Oveimar Barbosa, Diana Paola Vargas.

Universidad del Tolima.

jenny_aleja@hotmail.com

Palabras claves: Glucosidasas, Terpenos, catálisis heterogénea.

Introducción: Las glucosidasas se han utilizado exitosamente en reacciones de glicosilación de terpenos como el carvacrol. Además, mediante la inmovilización y modificación química es posible mejorar sus propiedades biocatalíticas, permitiendo un mejor control de la reacción, disminución en los costos del proceso y otras ventajas asociadas a la catálisis heterogénea.

Métodos: BGL fue inmovilizada sobre soportes de glioxil agarosa y posteriormente modificada de manera secuencial usando etilendiamina (EDA) y ácido trinitrobencensulfónico (TNBS). Simultáneamente, BGL fue modificada en fase homogénea e inmovilizada en carbón activado. Los derivados obtenidos fueron caracterizados funcional y operacionalmente y usados en la síntesis de glicósidos de carvacrol.

Resultados y conclusión: BGL fue inicialmente inmovilizada covalentemente sobre glioxil-agarosa (GLx) obteniéndose rendimientos de inmovilización superiores al 70%. El derivado así obtenido (GLx-BGL) fue incubado en EDA 1M a pH 4,75 por 2 horas. Este tratamiento permitió la obtención del derivado GLx-BGL-EDA producto de la modificación de los grupos carboxílicos de los ácidos aspárticos y glutámicos de la estructura 3D de BGL. Una porción de este derivado fue incubada en TNBS por 1 hora, obteniéndose el derivado GLx-BGL-EDA-TNBS. Por otra parte, la modificación de BGL en fase homogénea con EDA y con TNBS tras sucesivas etapas de diálisis permitió la obtención de los derivados solubles de BGL-EDA y BGL-EDA-TNBS, respectivamente, los cuales fueron inmovilizados sobre carbón activado (CA) obteniéndose los derivados CA-BGL-EDA y CA-BGL-EDA-TNBS. Todos los derivados obtenidos fueron caracterizados mostrando características muy diferentes según las condiciones de reacción. Finalmente se evaluó su eficiencia catalítica en la síntesis de glicósidos de carvacrol.

Referencias:

1. Barbosa, O.; Ortiz, C.; Berenguer-Murcia, Á.; Torres, R.; Rodrigues, R. C.; Fernandez Lafuente, R. J. B. A., Strategies for the one-step immobilization–purification of enzymes as industrial biocatalysts. **2015**, 33 (5), 435-456.
2. Rodrigues, R. C.; Godoy, C. A.; Volpato, G.; Ayub, M. A.; Fernandez-Lafuente, R.; Guisan, J. M. J. P. B., Immobilization–stabilization of the lipase from *Thermomyces lanuginosus*: Critical role of chemical amination. **2009**, 44 (9), 963-968.
3. Barbosa, O.; Ruiz, M.; Ortiz, C.; Fernández, M.; Torres, R.; Fernandez-Lafuente, R. J. P. B., Modulation of the properties of immobilized CALB by chemical modification with 2, 3, 4- trinitrobenzenesulfonate or ethylendiamine. Advantages of using adsorbed lipases on hydrophobic supports. **2012**, 47 (5), 867-876.



REMOCIÓN DE FENOL EN SOLUCIONES ACUOSAS USANDO CARBÓN ACTIVADO PREPARADO A PARTIR DE CUESCO DE PALMA AFRICANA.

Cristian H. Ospina Téllez¹, Diana P. Vargas- Delgadillo², Luis Oveimar Barbosa².

¹Estudiante de Licenciatura en educación básica con énfasis en ciencias naturales y educación ambiental, Facultad de Ciencias de la educación. Universidad del Tolima, Grupo de investigación en materiales porosos con aplicaciones ambientales y tecnológicas GIMPOAT. ²Departamento de Química, Facultad de Ciencias. Universidad del Tolima, Grupo de investigación en materiales porosos con aplicaciones ambientales y tecnológicas GIMPOAT.

cristianospinate@gmail.com

Palabras clave: Adsorción, carbón activado, cuesco de palma africana, remoción de fenol.

Introducción: El fenol es una sustancia ampliamente utilizada a nivel industrial, que suele encontrarse en aguas residuales, generando un riesgo para los ecosistemas debido a su toxicidad. El uso de materiales adsorbentes como alternativa tecnológica para su remoción, constituye una opción viable para la mitigación del impacto antrópico sobre el ambiente.

Metodología: El carbón activado fue obtenido mediante la activación química de cuesco de palma con CaCl₂; la carbonización se llevó a cabo empleando CO₂ y posteriormente N₂, el material fue lavado y secado. Se caracterizó textural, estructural y químicamente mediante diversas técnicas y se probó su capacidad de adsorción de fenol.

Resultados y Conclusiones: Se obtuvo un carbón activado micro-mesoporoso, con un área superficial de 528 cm²/g y un volumen de poro de 0.20 cm³/g, con una química superficial variada; constituida por grupos carboxílicos, fenólicos y lactónicos. El material carbonoso preparado logró una capacidad máxima de adsorción de fenol de 108.54 mg/g, además, los resultados experimentales de adsorción de fenol fueron ajustados a los modelos de Langmuir y Freundlich, presentando mayor ajuste al modelo de Langmuir; lo cual sugiere una adsorción en monocapa sobre una superficie homogénea, en la cual hay una interacción despreciable entre las moléculas. El carbón activado preparado presenta características texturales y químicas adecuadas para la adsorción de fenol en soluciones acuosas, siendo una alternativa para la remoción de este contaminante común en aguas residuales.

Referencias:

1. Marsh, H.; Rodríguez-Reinoso, F. Activated Carbon; Elsevier Science, 2006.
2. Thommes, M.; Kaneko, K.; Neimark, A.V., Olivier, J.P.; Rodríguez-Reinoso, F.; Rouquerol, J. & Sing, K.S. Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report). Pure Appl. Chem. 2015. 87, 1051– 1069.

OBTENCIÓN DE DERIVADOS DE B-GALACTOSIDASA (B-GAL) DE *KLUYVEROMYCES LACTIS* Y *ESCHERICHIA COLI* A TRAVÉS DE ESTRATEGIAS DE INMOVILIZACIÓN Y MODIFICACIÓN QUÍMICO-ESTRUCTURAL

Leon Pardo Diego A., Barbosa Oveimar Luis O., Vargas Delgadillo Diana P.
Universidad del Tolima.

daleonp@ut.edu.co

Palabras clave: β -galactosidasa, inmovilización, glicosilación, Timol.

Introducción: Las β -galactosidasas son biocatalizadores específicos en reacciones de glicosilación¹. Sin embargo, son inestables a condiciones drásticas de reacción. De allí, que sea indispensable una mejora de sus propiedades biocatalíticas. Para ello, se usaron estrategias de inmovilización y modificación química en fase sólida que permitieron obtener derivados estables y activos.

Métodos: β -galactosidasas (BG) de *Kluyveromyces lactis* y *Escherichia coli* fueron inicialmente inmovilizadas sobre soportes de glioxil agarosa²(GLx) y posteriormente modificadas químicamente de manera secuencial usando etilendiamina (EDA)³ y ácido trinitrobencensulfónico (TNBS)³. Los derivados obtenidos fueron caracterizados funcional y operacionalmente y usados como biocatalizadores en la síntesis de glicósidos de timol¹.

Resultados y conclusión: Las b-galactosidasas de *Kluyveromyces lactis* (KI) y *Escherichia coli* (Ec) fueron inmovilizadas covalentemente sobre glioxil agarosa obteniéndose los derivados llamados GLx-BG-KI y Glx-BG Ec, respectivamente. El seguimiento a las cinéticas de inmovilización y a la cantidad de proteína inmovilizada permitió determinar que los rendimientos de inmovilización fueron superiores al 70%. Los derivados GLx-BG-KI y Glx-BG-Ec fueron incubados en EDA 1M a pH 4,75 por 2 horas. Este tratamiento permitió la modificación de los grupos carboxílicos principalmente de los ácidos aspárticos y glutámicos superficiales en la estructura 3D tanto de KI como de Ec. Estos derivados fueron llamados GLX-BG-KI-EDA y GLX-BG-Ec-EDA, respectivamente. Una porción de estos derivados fue incubados en TNBS por 1 hora, obteniéndose los derivados GLX-BG-KI-EDA-TNBS y GLX-BG-Ec-EDA-TNBS. Todos los derivados obtenidos fueron caracterizados funcional y operacionalmente, mostrando características muy diferentes según las condiciones de reacción. Finalmente se evaluó su eficiencia catalítica en la síntesis de glicósidos de timol.

Referencias:

1. Rivas, F., Parra, A., Martínez, A., & García-Granados, A. (2013). Enzymatic glycosylation of terpenoids. *Phytochemistry reviews*, 12(2), 327-339.
2. Bernal, C., Marciello, M., Mesa, M., Sierra, L., Fernández-Lorente, G., Mateo, C., & Guisan, J. M. (2013). Immobilisation and stabilisation of β -galactosidase from *Kluyveromyces lactis* using a glyoxyl support. *International dairy journal*, 28(2), 76-82.
3. Barbosa, O, Ruiz, M, Ortiz, C, Fernández, M, Torres, R, Fernández-Lafuente, R 2012b, Modulation of the properties of immobilized CALB by chemical modification with 2,3,4- trinitrobenzenesulfonate or ethylendiamine. *Advantages of using adsorbed lipases on hydrophobic supports*, *Process Biochemistry*, vol. 47, pp. 867-876.



INMOVILIZACIÓN DE PEROXIDASA DE PALMA REAL (*Roystonea regia*) SOBRE CARBÓN ACTIVADO Y SU APLICACIÓN EN LA DEGRADACIÓN ENZIMÁTICA DE FENOL EN SOLUCIONES ACUOSAS.

Cristian H. Ospina Téllez, Diana P. Vargas- Delgadillo y Luis Oveimar Barbosa.

Universidad del Tolima

cristianospinate@gmail.com

Palabras claves: biocatalizador, peroxidasa de palma real, actividad, degradación.

Introducción: La peroxidasa de palma real (PPR) es una enzima catalíticamente activa para la degradación de contaminantes fenólicos¹. Sin embargo, su baja estabilidad frente al peróxido de Hidrógeno limita su uso. Por tal razón, es indispensable mejorar sus propiedades biocatalíticas a través de la inmovilización sobre carbón activado de origen lignocelulósico.

Métodos: PPR fue extraída de las hojas de palma real, purificada² y caracterizada funcionalmente. Posteriormente, fue inmovilizada sobre carbón activado obtenido del cuesco de la palma africana, determinando el efecto de diferentes factores sobre el proceso de inmovilización. Los biocatalizadores obtenidos fueron evaluados en la degradación de fenol en solución acuosa.

Resultados y conclusiones: El extracto crudo de PPR obtenido exhibió un gran poder catalítico (388,4 U/mg), y una gran estabilidad a pH 5 y 7, a temperaturas menores a 70°C. Las características texturales y químicas del carbón activado fueron congruentes con la PPR obteniéndose rendimientos de inmovilización superiores al 65%, prevaleciendo como mecanismo de inmovilización principalmente el intercambio iónico entre los grupos carboxílicos de la superficie del carbón y los grupos amino de la enzima, en comparación con la inmovilización por interacciones hidrofóbicas. Los derivados obtenidos a través del control del mecanismo de inmovilización fueron evaluados en la degradación de fenol en solución acuosa, determinándose el efecto de la cantidad de biocatalizador, concentración de peróxido, concentración de fenol sobre el porcentaje de remoción de fenol. Los resultados obtenidos mostraron remociones superiores al 50%, evidenciando que los derivados inmovilizados de PPR muestran una gran eficiencia biocatalítica para la degradación de compuestos fenólicos.

Referencias:

1. Sakharov, I.Y.; Vesga, M.; Galaev, I.; Sakharova, I.; Pletjushkina, O. Peroxidase from leaves of royal palm tree *Roystonea regia*: purification and some properties. *Plant Sci.* 2001. 161, 853–860.
2. Dos Santos, J. C.; Barbosa, O.; Ortiz, C.; Berenguer-Murcia, A.; Rodrigues, R.; Fernandez-Lafuente, R. Importance of the Support Properties for Immobilization or Purification of Enzymes. *ChemCatChem.* 2015. 7, 2413 – 2432.



Efecto de las condiciones de extracción en la obtención de pectina a partir de residuos agroindustriales de café (Coffea arábica)

Pérez Mora, W¹. Mojica, J.¹.

¹ Grupo de investigación en procesos Industriales SENA CGI, Centro de Gestión Industrial, Servicio Nacional de Aprendizaje, Bogotá - Colombia.

whperez@unal.edu.co

En el procesamiento agroindustrial del café, la pulpa y cáscara generalmente son desechadas (40% del peso húmedo del fruto). Estos residuos son subutilizados, y su disposición genera contaminación. En este estudio se propone la extracción de pectina para la gestión de estos residuos en el marco de la economía circular. De acuerdo a esto, se presenta el efecto de diferentes factores físicos (pH, temperatura y tiempo) en la extracción de pectina por hidrólisis ácida en residuos del procesamiento del café de San Juan de Rioseco (Cudinarca), y el uso de la metodología de superficie de respuestas para encontrar las mejores condiciones de extracción.

Los parámetros de control fueron el rendimiento y el grado de esterificación (relacionado con la calidad de la pectina). Se encontró una relación inversa temperatura-grado de esterificación, y una relación directa tiempo-rendimiento de acuerdo a un análisis de componentes principales y a gráficos de superficie de respuesta, con los cuales se modeló el sistema y se obtuvieron ecuaciones del modelo que permiten inducir las mejores condiciones de extracción las cuales fueron pH=2, temperatura de extracción 90 °C y tiempo de hidrólisis de 1 hora, con rendimiento de extracción de 0.62% y un grado de esterificación del 66.6% que clasifica la pectina como de alto grado de metoxilación. El proceso se presenta como una posibilidad para el aprovechamiento de estos residuos generando valor agregado al proceso agroindustrial del café y una posibilidad para la minimización de los desechos.

Agradecimientos al centro de gestión Industrial del SENA por el financiamiento del proyecto

Referencias:

1. R.A. Minjares-Fuentes, R.A. M. Femenia, J. Garau, S. Meza-Velázquez, C. Simal and Rosselló, "Ultrasound-assisted extraction of pectins from grape pomace using citric acid: A response surface methodology approach," *Carbohydrate Polymers*, vol. 106, pp. 179-189., 2014.
2. Oliveira, T. M. Rosa, F. P. P. Cavalcante, G. Moates, N. Wellne, S. Mazzetto, K. Waldron, H. M.C and Azeredo, "Optimization of pectin extraction from banana peels with citric acid by using response surface methodology," *Food Chemistry*, vol. 198, pp. 113-118, 2016.



UTILIZACIÓN DE BIOMASA RESIDUAL DE LA PAPA DEL DEPARTAMENTO DE BOYACÁ PARA LA GENERACIÓN DE HIDROCHAR POR CONVERSIÓN HIDROTHERMAL Y SU APLICACIÓN EN SUELO EROSIONADO.

Juliana Maritza Zarate Jimenez¹; María del Pilar Triviño Restrepo; Luis Fernando Lozano Gómez; Yeimy Fernanda Hernández Lasso.

Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia.

juliana.zarate@uptc.edu.co

Palabras clave: Carbonización hidrotermal, Hidrochar, Suelo erosionado.

En Colombia, en el departamento de Boyacá es el segundo productor de papa, con una producción proyectada de 671,204 Toneladas al año¹, razón por la cual se calcula una generación de residuos de papa de un 12,6% que generan una problemática a nivel ambiental.

En esta investigación se utilizó el proceso de carbonización hidrotermal que consiste en hidrólisis y despolimerización de biomasa², para obtener un producto hidrochar a partir de biomasa de papa. Con objeto de desarrollar procesos sostenibles, se estudiaron variables de tiempo (3 a 9 horas) y temperatura (180°C a 220°C). Los datos obtenidos se analizaron por medio de normas ASTM, BET, FTIR y por espectroscopia de UV-Vis. Se escogió el hidrochar de 5h-220°C con mejor propiedad de adsorción, el cual se utilizó para la aplicación en suelos erosionados del Municipio Tunja (Boyacá). Los ensayos se hicieron variando la proporción de hidrochar, mediante la adecuación de columnas de lixiviación. El suelo se analizó por medio de ICP-MS, saturación de bases, relaciones catiónicas y método de Walkley y Black, antes y después del tratamiento³. Para concluir, se evidencio que los ensayos con tratamiento de hidrochar en el suelo permiten aumentar la concentración de macronutrientes como Ca, K, Mg, Na, Al y Fe, pero reducen la concentración para Cu, Zn y Mn para los dos tratamientos de adición hidrochar-suelo, además se determinó que la cinética química describe una reacción de primer orden por el método de las velocidades iniciales para los macronutrientes.

Referencias:

1. Fedepapa, D. Boletín Regional Boyacá-18.Pdf. **2018**, 2 (106), 1–2.
2. Khan, T. A.; Saud, A. S.; Jamari, S. S.; Rahim, M. H. A.; Park, J. W.; Kim, H. J. Hydrothermal Carbonization of Lignocellulosic Biomass for Carbon Rich Material Preparation: A Review. *Biomass and Bioenergy* **2019**, 130 (August), 105384. <https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2019.105384>. IGAC. Metodos analiticos del laboratorio de suelos, imprenta a.; bogota, d.c, 2013.



SUBPRODUCTOS HORTOFRUTÍCOLAS PARA LA BIOECONOMÍA, APROVECHAMIENTO DE BIOMASAS CON TÉCNICAS DE EXTRACCIÓN SOSTENIBLES

Lili Johanna Rodríguez Gallo¹, Bárbara De Las Mercedes Moreno Murillo¹, Carlos Eduardo Narváez Cuenca¹, Fabián Parada Alfonso¹, Francisco José Arias Aragonés², Yesmith Santos Panqueva¹, Nury Gineth Infante³.

¹Universidad Nacional de Colombia, Bogotá-Colombia, ²Institución Universitaria Mayor de Cartagena, Cartagena de Indias-Colombia, ³Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, México D.F.

lrodriguezg@unal.edu.co

Palabras clave: Extractos bioactivos, Química verde, Biomاسas.

Introducción: Desde la química de alimentos son múltiples los aportes que se pueden hacer al área de la bioeconomía. La segunda parte de este trabajo expone rutas promisorias que aprovechan la biomasa disponible, desde la óptica de la biorrefinería, de especies como el cannabis y algunos subproductos hortofrutícolas con propiedades bioactivas.

Método: Las especies seleccionadas han sido estudiadas por el Grupo de Investigación en Química de Alimentos-GiQA (COL0004549) de la Universidad Nacional de Colombia. Las investigaciones se han centrado en obtener extractos mediante técnicas de extracción sostenibles [1-3] y evaluar algunas actividades biológicas de los extractos obtenidos.

Resultados y conclusiones: Entre los descubrimientos están: i) fracciones enriquecidas con THC, compuesto psicoactivo de cannabis [1]. (ii) extractos de semillas de curuba [3], capacho de uchuva y almendra de semilla de mango con actividad antiproliferativa en células cancerosas (iii) actividad antioxidativa en carnes, aceite y mayonesa empleando extractos de semillas de tomate de árbol, papaya y cáscara de mandarina respectivamente, (iv) extractos de epicarpio de tomate de árbol amarillo con actividad acetilcolinesterasa y residuos de café para combatir Alzheimer [2]. Han sido explorados diversos aprovechamientos de residuos agroindustriales empleando técnicas de extracción sostenibles a escala de laboratorio. El siguiente paso para su transferencia hacia la sociedad consiste en constatar sus aplicaciones reales mediante escalonamiento tecnológico en compañía de actores de diversos sectores como farmacéutico y alimentario por sus propiedades bioactivas. Las propuestas expuestas de biorrefinería son alternativas loables para la potencialización de dichas cadenas productivas con alto valor agregado.

Referencias:

1. Gallo, A.; Castro, H.; Garzón, W.; Martínez, J.; Rivera, Z.; King, J.; Parada, F. (2019) Extraction, isolation and purification of tetrahydrocannabinol from the Cannabis sativa L. plant using supercritical fluid extraction and solid phase extraction. *The Journal of Supercritical Fluids*. Vol(146):208-216
2. Escamilla, A. (2020). Obtención de extractos bioactivos a partir de un subproducto del café, empleando técnicas de extracción verdes. Tesis de maestría, Dpto. de Química Universidad Nacional de Colombia. Disponible en <https://repositorio.unal.edu.co/handle/unal/78519>
3. Ballesteros, D.; Alvarez, G.; Carlos, L.; Morantes, S.; Ibáñez, H.; Parada, F.; Cifuentes, A.; Valdés, A. (2020) Foodomics evaluation of the anti-proliferative potential of Passiflora mollissima sedes. *Food Research International*. Vol (130).



OPTIMIZACIÓN DE LA PRODUCCIÓN DE NANOCELULOSA BACTERIANA Y SU POSTERIOR ESCALADO USANDO MÉTODOS CONVENCIONALES.

Carlos Molina-Ramírez¹, Piedad Gañán², Robin Zuluaga², Juan Álvarez-Caballero¹

¹Universidad del Magdalena, ²Universidad Pontificia Bolivariana

carlos.mol.ramirez@gmail.com

PALABRAS CLAVES: Nanocelulosa bacteriana Escalado Optimización.

INTRODUCCIÓN

El uso de residuos agroindustriales para producir nanocelulosa bacteriana (NCB) para mejorar el rendimiento y reducir los costos asociados, ha sido explorada. En este sentido, los bananos sobremadurados ofrecen ventajas. Entonces, este trabajo presenta los hallazgos relacionados con las condiciones de cultivo óptimas para producir NCB y su escalado.

MÉTODOS

Primero se planteó un diseño experimental para verificar cuál de las variables evaluadas tienen efecto significativo sobre el rendimiento de NCB. Luego se optimizaron condiciones medio de cultivo de las variables relevantes. Finalmente, se escaló la producción de NCB a través de la implementación de la metodología de tiempos característicos.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

El obstáculo económico de producir NCB a bajo costo se ha superado. Mediante la aplicación de la metodología de superficie de respuesta (MSR) se estableció que la concentración de glucosa y la relación V/A eran los factores importantes implicados en el proceso de optimización de NCB, mientras el banano sobremadurado sea utilizado como materia prima. Los niveles óptimos de concentración de glucosa 26,4 g/L y una relación V/A 2,2 cm, permitieron aumentar el rendimiento de NCB 42,4 %, respecto al obtenido en la etapa inicial de cribado. Finalmente, se escogió la relación V/A como el criterio técnico para el escalado. El rendimiento de NCB en el biorreactor plástico fue un 20% menor que el obtenido en el recipiente de vidrio, pero la cantidad de NCB obtenida en el escalado fue de 16 g, 3378 % más que la cantidad obtenida en los frascos de vidrio bajo las condiciones óptimas.

INSTITUCIONES FINANCIADORAS

Universidad del Magdalena; Minciencias; Universidad Pontificia Bolivariana.

REFERENCIAS

- (1) Naritomi, T.; Kouda, T.; Yano, H.; Yoshinaga, F. Effect of Ethanol on Bacterial Cellulose Production from Fructose in Continuous Culture. *J. Ferment. Bioeng.* 1998, 85 (6), 598–603. [http://dx.doi.org/10.1016/S0922-338X\(98\)80012-3](http://dx.doi.org/10.1016/S0922-338X(98)80012-3).
- (2) Molina-Ramírez, C.; Castro, C.; Zuluaga, R.; Gañán, P. Physical Characterization of Bacterial Cellulose Produced by *Komagataeibacter Medellinensis* Using Food Supply Chain Waste and Agricultural By-Products as Alternative Low-Cost Feedstocks. *Journal of Polymers and the Environment* 2018, 26 (2). <https://doi.org/10.1007/s10924-017-0993-6>.
- (3) Kralisch, D.; Hessler, N. - Large-Scale Production of BNC: State and Challenges. In *Bacterial NanoCellulose: A Sophisticated Multifunctional Material*; CRC Press, 2016; pp 76–105. <https://doi.org/10.1201/B12936-7>.



EVALUACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE POLIESTIRENO COMO COLECTOR DE CARBÓN EN LA FLOTACIÓN DE UN MINERAL CARBONOSO

Javier Ernesto Vilasó Cadre¹, Delia M. Ávila Márquez¹, Alien Blanco Flores², Iván Alejandro Reyes Domínguez³, Helen Paola Helen Toledo Jaldin².

¹Instituto de Metalurgia. Universidad Autónoma de San Luis Potosí. México, ²Tecnológico de Estudios Superiores de Tianguistenco, División de Ingeniería Mecánica. México, ³Catedrático CONACYT. Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología. México.

jvilasocadre@gmail.com

Palabras Claves: carbón, nanopartículas, poliestireno, flotación.

Introducción: La flotación de carbones de bajo rango es un problema en la industria minera puesto que los colectores hidrofóbicos no son eficaces en este tipo de carbones. Los colectores iónicos funcionan solo en algunos casos. Se han propuesto que las nanopartículas poliméricas son más eficientes que los reactivos tradicionales.

Métodos: Mediante microflotación se evaluaron nanopartículas de poliestireno como colector de carbón. La modificación de la superficie se corroboró mediante mediciones de potencial zeta. Se midió el ángulo de contacto de las nanopartículas sobre una superficie hidrofóbica. Se utilizó un diseño experimental para optimizar la flotación.

Resultados y Conclusiones: Las nanopartículas presentaron cristalinidad, con un tamaño de partícula de 11.9 nm. El reactivo nanométrico fue mejor colector de carbón que el queroseno y el diésel. Las mediciones de potencial zeta demostraron la modificación de la superficie luego del acondicionamiento. El ángulo de contacto fue de 50.4°, disminuyendo con respecto al valor obtenido para el agua de 82.3°. Bajo condiciones óptimas de pH 6.1, tiempo de flotación de 2 min y una dosificación de nanopartículas de 1000 µL, se recupera el 99.5 % del carbón en este mineral con un 72.3 % de ganga.

Referencias:

1. An, M.; Liao, Y.; Gui, X.; Zhao, Y.; He, Y.; Liu, Z.; Lai, Q. An investigation of coal flotation using nanoparticles as a collector. *Int. J. Coal Prep. Util.* 2017, 40, 679-690.
2. Harvey, P.A.; Nguyen, A.V.; Evans, G.M. Influence of Electrical Double-Layer Interaction on Coal Flotation. *J. Colloid Interface Sci.* 2002, 250, 337-343.



QUÍMICA AMBIENTAL Y AGRÍCOLA.

ILICL-676

Determination of polybrominated diphenyl ether (PBDEs) in shrimp and oils of animal origin distributed in the city of Medellín, Colombia.

Jovan Mateus Castañeda Vargas.

Universidad de Antioquía, grupo GDCON

jovan.castaneda@udea.edu.co

Determination of polybrominated diphenyl ether (PBDEs) in shrimp and oils of animal origin distributed in the city of Medellín, Colombia PBDEs, Chromatography, Persistent Polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) have been widely used as flame retardants in various industrial applications, such as electronics, construction, and others due to their physicochemical properties; however, given their high toxicity, bioaccumulation, and persistence in the environment, these compounds have been regulated and restricted on a national and global scale In the present work, validation and analysis of samples of shrimp and oils of animal origin distributed throughout the city based on analysis via gas chromatography– mass spectrometry (GC/MS) of 10 PBDE congeners (BDE-28, BDE-47, BDE-77, BDE-100, BDE-99, BDE-126, BDE - 153, BDE-154, BDE-139, BDE-183) The quantification range of the samples was between 0.005 and 1.00 ng/g; the precision evaluated in terms of relative standard deviation was < 40%, and the accuracy in terms of recovery percentage was between 60% and 140% for all congeners, which ensured adequate performance of the method for the established purpose. Ten samples of shrimp and oils from different animal origins distributed in the city were analyzed. All samples presented values < 0.005 ng/g for all study congeners except a shrimp sample with a concentration of 0.012 ng/g for BDE-100, which was higher than the maximum residue limit allowed by the European legislation. Finally, the present work is the first approach of this type in the country regarding the evaluation of brominated flame retardants in foods for human consumption, and this study may be a useful tool for guiding future related research.

REFERENCES:

1. Alaei, M; Luross, J; Sergeant, DB; Muir, DCG; Whittle, DM; Solomon, K. (1999) Distribution of polybrominated diphenyl ethers in the Canadian environment, *Organohalogen Compounds*, 40, 347-350
2. Environment Agency. (2019). Polybrominated diphenyl ethers (PBDEs): sources, pathways and environmental data. October, 1–33. https://consult.environment-agency.gov.uk/environment-and-business/challenges-and-choices/user_uploads/polybrominated-diphenyl-ethers-pressure-rbmp-2021.pdf
3. Fitzgerald, L., & Wikoff, D. S. (2014). Persistent Organic Pollutants. In *Encyclopedia of Toxicology: Third Edition (Third Edit, Vol. 3)*. Elsevier. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-386454-3.00211-6> Universidad de Antioquía, Grupo de Diagnostico y Control de la contaminación (GDCON)



Potencial antiplaquetario de extractos obtenidos de hojas y frutos de *Phaseolus vulgaris* L

Lyanne Rodríguez¹, Diego Méndez ¹, Basilio Carrasco², Eduardo Fuentes¹, Iván Palomo¹.

¹Thrombosis Research Center, Department of Clinical Biochemistry and Immunohaematology, Faculty of Health Sciences, Interdisciplinary Center on Aging (CIE), Universidad de Talca, Talca, Chile. ²Centro de Estudios en Alimentos Procesados, Talca, Chile.

lyannerodriguez89@gmail.com

La alimentación es la principal herramienta para mantener una buena salud cardiovascular y así disminuir los índices de mortalidad y morbilidad a nivel mundial. El frijol común es la leguminosa alimentaria con mayor valor nutricional, lo cual ha provocado una mayor demanda de este producto en los últimos años.

Se estudió por turbidimetría la actividad antiplaquetaria estimulada con diferentes agonistas (ADP, colágeno, TRAP-6 y convulxin) de extractos etanólicos, acuosos y metanólicos obtenidos de hojas y frutos de *P. vulgaris*. Se evaluó la citotoxicidad y marcadores de activación y secreción plaquetaria por citometría de flujo de los extractos más activos.

Los extractos metanólicos de *P. vulgaris* mostraron una potente actividad antiplaquetaria inducida por ADP y colágeno. Mientras que los extractos metanólicos mostraron un mayor potencial frente al colágeno y convulsin. Esta actividad fue dependiente de la concentración y se relacionó con una inhibición de la activación y secreción plaquetaria. Se mostró que existe una correlación positiva entre el consumo de frijoles y la prevención de eventos cardiovasculares. *P. vulgaris* tiene múltiples compuestos bioactivos que le brindan un valor único como protector cardiovascular, por lo cual recomendamos el consumo frecuente de esta legumbre.

Referencias:

1. Cámara, C. R. et al.. Pinto beans (*Phaseolus vulgaris* L.) as a functional food: implications on human health. *Agriculture*, 3(1), 90-111.
2. Trucchi, et al. (2021). Ancient genomes reveal early Andean farmers selected common beans while preserving diversity. *Nature Plants*, 7(2), 123-128.
3. Ge, et al. (2021). Physicochemical and pH-dependent functional properties of proteins isolated from eight traditional Chinese beans. *Food Hydrocolloids*, 112, 106288.
4. Rodríguez, L. et al. (2021). Antiplatelet activity and chemical analysis of leaf and fruit extracts from *Aristotelia chilensis*. *Plos one*, 16(4), e0250852.



Residuos de tetraciclinas inducen carbonilación in vitro en proteínas musculares de pechuga de pollo

Márquez Lázaro Johana^{1,2}, Méndez Cuadro Darío², Rodríguez Cavallo Erika²

¹Grupo GINUMED-Programa de medicina-Corporación Universitaria Rafael Núñez. ²Grupo de Química Analítica y Biomedicina – Facultad de Ciencias Farmacéuticas – Universidad de Cartagena.

johana.marquez@curnvirtual.edu.co

Palabras claves: Carbonilación, tetraciclinas, LMR, pechuga de pollo

Introducción: Los antibióticos se utilizan en veterinaria para prevenir o tratar enfermedades, y promover el crecimiento. En aves de corral, antibióticos como oxitetraciclina (OTC) y tetraciclina (TC) suelen utilizarse para garantizar el bienestar animal, aunque, su uso conlleva la presencia de sus residuos en el músculo destinado al consumo humano.

Metodología: Muestras de pechuga de pollo contaminadas individualmente con OTC y TC (0.5, 1.0 y 1.5 LMR), se extrajeron para obtener las proteínas sarcoplásmicas y miofibrilares. Seguido, se determinó el contenido de proteínas y la oxidación proteica (medida como índice de carbonilación), mediante Bradford y el inmunoensayo de dot blot, respectivamente.

Resultados y conclusiones: La carbonilación promovida por OTC y TC en proteínas sarcoplásmicas y miofibrilares fue significativamente mayor que el control a todas las concentraciones ensayadas ($p < 0.05$). En ambas fracciones proteicas la respuesta oxidativa fue dependiente de la concentración, siendo máxima a la mayor concentración (1.5 LMR). Así, se evidenció que residuos de OTC y TC pueden promover oxidación irreversible en las proteínas de la carne, incluso a valores considerados como seguros por los entes regulatorios. La carbonilación proteica se ha asociado con disminución de la calidad y pérdida del valor nutricional del alimento debido al decremento de la digestibilidad, este hallazgo es preocupante debido a que expone al consumidor al efecto de proteínas oxidadas que ingresan por la dieta y que han sido relacionadas con daños a nivel intestinal y susceptibilidad a promover enfermedades importantes como el cáncer de colon.

Referencias

1. Bradford, M. M. A Rapid and Sensitive Method for the Quantitation of Microgram Quantities of Protein Utilizing the Principle of Protein-Dye Binding. *Anal. Biochem.* **1976**, 72 (1–2), 248–254. [https://doi.org/10.1016/0003-2697\(76\)90527-3](https://doi.org/10.1016/0003-2697(76)90527-3).
2. Márquez-Lázaro, J. P.; Mora, L.; Méndez-Cuadro, D.; Rodríguez-Cavallo, E.; Toldrá, F. In Vitro Oxidation Promoted by Chlorpyrifos Residues on Myosin and
3. Chicken Breast Proteins. *Food Chem.* **2020**, 326, 126922. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2020.126922>.
4. Palisoc, S.; De Leon, P. G.; Alzona, A.; Racines, L.; Natividad, M. Highly Sensitive Determination of Tetracycline in Chicken Meat and Eggs Using AuNP/ MWCNT Modified Glassy Carbon Electrodes. *Heliyon* **2019**, 5 (7), e02147. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2019.e02147>.



RETENCIÓN DE METALES PESADOS EN RESIDUOS LIGNOCELULÓSICOS AGROINDUSTRIALES DE FIQUE (*Furcraea* sp.)

Jaime Andrés Parra Reyes, Edier Humberto Pérez.

Universidad del Cauca, Colombia.

jparrar@unicauca.edu.co

Palabras Claves: Sorción, Metales, Fique, Isotermas.

Introducción: Como alternativa ambientalmente sostenible para la retención y depuración de metales pesados presentes en aguas superficiales, se evaluó la capacidad máxima de adsorción de los residuos de fique (*Furcraea* sp.) en la remoción de metales pesados (Cr^{3+} , Cr^{6+} y Pb^{2+}), empleando la técnica espectrofotométrica de absorción atómica (AAS).

Métodos: Los residuos de fique se adecuaron, caracterizaron y mediante la técnica analítica estandarizada AAS, se optimizaron los procesos de adsorción de los metales (Cr^{3+} , Cr^{6+} , Pb^{2+}) en este material económico y amigable con el ambiente. Se implementó el diseño experimental de composición central para determinar la capacidad máxima de adsorción.

Resultados y Conclusiones: Los datos experimentales obtenidos muestran que el residuo agroindustrial de fique tiene un alto potencial en los procesos de adsorción y remoción de metales, registrándose remoción por adsorción del 89% para Cr^{3+} , 85% para Cr^{6+} y 99% del Pb^{2+} presente en las muestras de agua. Gran parte de la capacidad de adsorción del fique se debe al contenido de celulosa, hemicelulosa y lignina, esta última considerada la de mayor importancia por su variedad de grupos funcionales que permiten una mayor retención de los metales. Así mismo se determinó la capacidad de adsorción del residuo fique en $169,51 \pm 1,37$ mg/g para Pb^{2+} ; $15,01 \pm 3,28$ mg/g para Cr^{3+} y $13,49 \pm 1,40$ mg/g para Cr^{6+} respectivamente, en todos los casos el proceso se representó mediante isotermas tipo Freundlich, considerando una adsorción multicapa de los metales sobre este material de superficie heterogénea y con sitios de adsorción de diferente afinidad.

Referencias:

1. Beni, A., & Esmaili, A. (2020). Biosorption, an efficient method for removing heavy metals from industrial effluents: A Review. *Environmental Technology & Innovation*, 17, 100503. <https://doi.org/10.1016/j.eti.2019.100503>
2. Neris, J., Luzardo, F., da Silva, E., & Velasco, F. (2019). Evaluation of adsorption processes of metal ions in multi-element aqueous systems by lignocellulosic adsorbents applying different isotherms: A critical review. *Chemical Engineering Journal*, 357, 404–420. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.09.125>
3. Ramírez Calderón, O., Abdeldayem, O., Pugazhendhi, A., & Rene, E. (2020). Current Updates and Perspectives of Biosorption Technology: an Alternative for the Removal of
4. Heavy Metals from Wastewater. *Current Pollution Reports*, 6(1), 8–27. <https://doi.org/10.1007/s40726-020-00135-7>



EFFECTO DE LA ADICIÓN DE LOMBRICOMPOST SOBRE LA DEGRADACIÓN DE CLORPIRIFOS EN MUESTRAS DE SUELO BAJO CONDICIONES CONTROLADAS

SOLARTE ORDÓÑEZ MARICELA¹

¹Universidad de Cauca, grupo en Agroquímica. Ph .D. Ciencias Agrarias. Popayán, Colombia.

msolarteordonez@unicauca.edu.co

Las diferentes prácticas agrícolas, introdujeron el uso de plaguicidas con el fin de suplir la demanda de alimentos a nivel mundial, la cual se veía afectada por diferentes plagas, patógenos y malezas. Estos productos químicos, son usados indiscriminadamente y además encarecen los costos de producción, causan serios disturbios en el ambiente, salud de las plantas y animales, y los consumidores incluidos los mismos productores (1).

Dentro de la amplia variedad de plaguicidas utilizados en la región, se seleccionó como objeto de estudio el insecticida clorpirifos, debido a su uso extensivo y efectos adversos en el ambiente y el hombre (2; 3). Como materia orgánica exógena un lombricompost comercial, con el fin, de determinar el efecto de este en la degradación de este plaguicida en suelo. La degradación del clorpirifos se evaluó mediante incubaciones bajo condiciones de laboratorio (4; 5).. Se estimó el tiempo de permanencia del clorpirifos mediante el cálculo de la vida media ($t_{1/2}$), en diferentes periodos de tiempo (0, 7, 14, 21, 35 y 45 días) utilizando un diseño completamente aleatorio con arreglo factorial, tres tratamientos (T1=0%, T2=20% y T3=50% de adición de lombricompost) con tres réplicas. Los datos se ajustaron a una cinética de primer orden con coeficientes de correlación mayores a 0.9581. No se encontraron diferencias significativas en los valores de los $t_{1/2}$ de los tratamientos T1 y T2, mientras que el $t_{1/2}$ del T3 fue inferior, además, este tratamiento fue el que presentó mayor actividad microbiana (medida como evolución de CO₂), demostrando la bondad del lombricompost en acelerar la degradación del clorpirifos.

REFERENCIAS:

1. Del Puerto, A, Suárez, S y Palacio, D. Efectos de los plaguicidas sobre el ambiente y la salud. Revista cubana de Higiene y Epidemiología. 2014, Vol. 52, 3, págs. 372-387.
2. Arnold, S, y otros. Derivation of human Biomonitoring Guidance Values for chlorpyrifos using a physiologically based pharmacokinetic and pharmacodynamic model of cholinesterase inhibition. Regulatory Toxicology and Pharmacology. 2015, Vol. 71, págs. 235-243.
3. Khalil, Am. Toxicological effects and oxidative stress responses in freshwater snail, *lanistes carinatus*, following exposure to chlorpyrifos. Ecotoxicology and Environmental Safety. 2015, Vol. 116, págs. 137-142.
4. Vivas, C, Martínez, M y Guerrero, J. 14C Tebuconazole degradation in Colombian soils. Communications in Agricultural and Applied Biological Sciences. 2010, Vol. 2, 75, págs. 173-182.
5. Mamy, L y Barriuso, E. Desorption and time-dependent sorption of herbicides in soils. European Journal of Soil Science. 2007, Vol. 1, 58, págs. 174-187.



CONTAMINACIÓN POR MICROPLÁSTICOS EN DIFERENTES MATRICES DE LA BAHÍA DE ASUNCIÓN, PARAGUAY.

Diana Diez-Pérez-Núñez, Inés Arenas, Erenia Maidana, Luz Rodríguez, Christian Trauth, Fátima Yubero

Departamento de Físicoquímica. Dirección de Investigaciones. Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Nacional de Asunción.

ddiezperez@qui.una.py

Palabras claves: microplásticos, agua, arena, sedimento

Los microplásticos son contaminantes emergentes que se definen como pequeñas partículas con tamaños < 5 mm, con propiedades fisicoquímicas diferentes como el tamaño, color, densidad, tipo de polímero^{1,2}. El objetivo del estudio fue cuantificar, de forma exploratoria, la abundancia de microplásticos en diferentes matrices de la Bahía de Asunción, Paraguay. Se colectaron muestras de sedimentos, arena de playa, agua superficial de la bahía y sus afluentes. Los microplásticos fueron extraídos por oxidación húmeda con H₂O₂ y Fe²⁺ y separación por densidad³, previamente verificado con ensayos de recuperación. Las partículas se inspeccionaron bajo microscopio óptico con un aumento de 40X. El porcentaje de recuperación promedio en arena y agua fue de 99,8% y 99,9%, respectivamente. De las 15 muestras analizadas la abundancia de microplásticos fue significativamente mayor ($p < 0.05$) en la arena de la playa (196 ± 49 ítems kg⁻¹) y en el agua de los afluentes (34 ± 16 ítems m⁻³). En la inspección visual se identificaron fragmentos y fibras, de una variedad de colores como el azul, rojo, verde, marrón, negro y transparente. Si bien la inspección visual presenta sesgo debido a falsos positivos y negativos, este estudio demuestra que el contaminante emergente está presente en la bahía, al igual que en otros países y que este trabajo es el pionero de futuras investigaciones como la determinación de la distribución espacial, los factores más influyentes en la dispersión, discriminación por color, tamaños, composición química, entre otros, con los que se podrá ahondar más sobre esta problemática mundial.

Referencias

1. Yuan, W.; Liu, X.; Wang, W.; Di, M.; Wang, J. Microplastic Abundance, Distribution and Composition in Water, Sediments, and Wild Fish from Poyang Lake, China. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* **2019**, *170*, 180–187. <https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2018.11.126>.
2. Masura, J.; Baker, J.; Foster, G.; Arthur, C.; Herring, C. Laboratory Methods for the Analysis of Microplastics in the Marine Environment: Recommendations for Quantifying Synthetic Particles in Waters and Sediments. *Natl. Ocean. Atmos. Adm. U.S.* **2015**, No. July, pp 18.
3. Filella, M. Questions of Size and Numbers in Environmental Research on Microplastics: Methodological and Conceptual Aspects. *Environ. Chem.* **2015**, *12* (5), 527. <https://doi.org/10.1071/en15012>.



OBTENCIÓN DE UN PRESERVANTE PARA EL LÁTEX NATURAL DEL ÁRBOL *Hevea brasiliensis* QUE CONSERVE SUS PROPIEDADES FÍSICOQUÍMICAS.

Gustavo Barrios Atencia, Gilmar Santafé Patiño.

UNIVERSIDAD DE CÓRDOBA, MONTERÍA - COLOMBIA

[gabarríos91@gmail.com](mailto:gabarrios91@gmail.com)

PALABRAS CLAVES: *Hevea brasiliensis*, latex natural, preservante, sZnU.

INTRODUCCIÓN: El látex extraído del caucho natural es materia prima para obtener productos industriales con diferentes aplicaciones. En su extracción se emplean amoniaco^{1,2} y disulfuro de tetrametiluram, sustancias que posteriormente producen N nitrosoaminas carcinogénicas transmitidas al producto final³. Es necesario encontrar nuevas sustancias ecológicamente sustentables que conserven las propiedades fisicoquímicas del látex.

MÉTODOS: Se analizaron ocho mezclas de sulfatos (sulfato de níquel, aluminio, calcio, sodio, cobre, bario, zinc, hierro) con urea a distintas concentraciones observando el tiempo de coagulación del látex agregado, midiendo el pH de cada muestra y evaluando cual tipo de sulfato contribuyó a aumentar la preservación de las mezclas analizadas.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: La mezcla que preservó mejor el látex fue el sulfato de zinc mezclado con urea (sZnU). Posteriormente se realizaron nuevos análisis sobre esta mezcla midiendo las variables de pH, VFA y viscosidad. El propósito fue comparar la eficiencia en la preservación del látex de las mezclas estudiadas con el preservante utilizado actualmente en la industria (TMTD+ZnO+NH₃). Los mejores resultados de VFA se presentaron para el preservante sZnU con valores de 0,0193, mientras que el preservante industrial mostró un valor de 0,0167. Por su parte al medir la viscosidad se encontró que el preservante sZnU mostró valores de 72,8 cP, mientras que el industrial mostró un valor de 41,4 cP. Al utilizar ambos preservantes el pH disminuye con el tiempo, sin embargo, el preservante sZnU permite una mayor estabilización de la mezcla. En general el preservante aquí propuesto contribuye a que el látex conserve en mayor tiempo sus propiedades fisicoquímicas.

REFERENCIAS:

1. Parichkul, A.; Saikhwan, P. *Journal of Food Science and Agricultural Technology*. **2015**, 1(1), 131-135.
2. Singh, M.; Esquena, J.; Solans, C.; Booten, K.; Tadros, T. *Colloids and Surfaces A Physicochemical and Engineering Aspects*. **2014**, 451(1), 90-100. (3) Peláez G.; Velázquez S.; Giraldo D. *Informador Técnico (Colombia)*. **2014**, 78(2), 166-174.

Transformación de terpenos empleando biocarbón activado cítrico ácido.

Jaime-Andrés Becerra¹, Michell Daniella Vásquez¹, Aída-Luz Villa¹

¹Grupo Catálisis Ambiental, Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de Antioquia UdeA, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia.

aida.villa@udea.edu.co

Palabras Clave: Cítricos, Extracción, Biocarbón, Catalizador.

Introducción: El d-limoneno es el principal monoterpeno que compone el aceite esencial que se extrae de las cáscaras de frutas cítricas como las naranjas¹. Este terpeno presenta importantes aplicaciones a nivel industrial². Sin embargo, después del proceso de extracción del aceite de naranja, la disposición final de los residuos sólidos vegetales continúa siendo un gran problema a solucionar. Actualmente las investigaciones se han centrado en la utilización de los residuos cítricos para la preparación de compost, biomasa para la producción de energía, concentrado de animales, entre otros³. En esta investigación se plantea una alternativa para la producción de biocarbón activado para la preparación de catalizadores heterogéneos para reacciones orgánicas.

Métodos: Cáscaras frescas de naranja cultivada en Colombia se emplearon para la obtención de aceite de naranja mediante extracción asistida por microondas (95-97°C, 20-30 min, 400-800 W, CEM Mars), la fase orgánica (aceite de naranja) se separó mediante decantación. El material sólido residual (o cáscaras frescas), se activaron químicamente (H₃PO₄, 90-120°C), se calcinó en atmósfera de nitrógeno (600°C, 7 h) y se neutralizó para obtener biocarbón activado cítrico ácido (BCA-P). Luego se incorporaron sales de Fe y Cu como fase activa mediante el método de impregnación húmeda y el material se calcinó a 300°C en atmósfera inerte para obtener los catalizadores Fe/BAC-P y CuCl/OPAC-P. La oxidación de los terpenos (α -pineno, β -pineno y limoneno) con una solución acuosa de hidroperóxido de terc-butilo (TBHP) y H₂O₂ se llevó a cabo en un reactor por lotes de 2 mL, 50 °C, 750 rpm, acetonitrilo como solvente y el catalizador heterogéneo. La isomerización de epóxido de limoneno y de α -pineno se realizó de forma similar sin emplear agente oxidante. La cuantificación de todas las muestras líquidas se realizaron en un cromatógrafo de gases Agilent 7890A equipado con detectores FID, columna HP5 (0,20 mm x 50 m x 0,5 μ m) y espectrómetro de masas MS Agilent 5975C.

Resultados y Conclusiones: El proceso de extracción del aceite de naranja asistido por microondas es un proceso eficiente en donde se obtuvo un aceite compuesto principalmente por 95.9 – 96% d-limoneno, 1.71- 1.76% β -mirreno, 0.35-0.37% α -pineno, 0.31-0.36% β -pineno, 0.55-0.57 linalool, 0.12- 0.28% farnesol, entre otros; para un rendimiento de 1.5-1.6 mL/150 g de cáscaras. Los materiales sintetizados a partir de los biocarbones activados ácido y modificados con sales metálicas de Cu y Fe presentaron actividad en la reducción de la concentración de los sustratos en la solución. En el proceso de oxidación de los monoterpenos (α -pineno, β -pineno y d-limoneno) se observó una reducción en la concentración obteniéndose conversiones de hasta un 84% dependiendo del tiempo de reacción, cantidad de catalizador empleado y agente oxidante utilizado (TBHP y H₂O₂) obteniéndose algunos productos de reacción oxigenados. Los materiales también presentaron actividad en los procesos de isomerización del monoterpenoides, por ejemplo la transformación del epóxido de α -pineno en aldehído canfolénico.

Tabla 1. Resultados preliminares de la transformación de terpenos con catalizadores de biocarbones activados ácidos.

Catalizador (g)	Agente oxidante	Sustrato	tiempo (h)	Xsustrato (%)	Y _{producto} (%)
Fe/OPAC-P	TBHP	α -Pineno	0.5	46.8	-
Fe/OPAC-P	TBHP	α -Pineno	1	44.4	-
Fe/OPAC-P	TBHP	α -Pineno	3	49.2	-
Fe/OPAC-P	TBHP	α -Pineno	22	52.7	-
OPAC-P	TBHP	α -Pineno ^a	22	14	-



Fe/OPAC-P	-	α -Pinoeno	22	11.8	4.8
Fe/OPAC-P ^a	TBHP	α -Pinoeno	20	68	-
CuCl ₂ /OPAC-P ^b	TBHP	α -Pinoeno	19	67.5	1.3
CuCl ₂ /OPAC-P	H ₂ O ₂	α -Pinoeno	3	59.9	-
CuCl ₂ /OPAC-P	H ₂ O ₂	β -Pinoeno	3	78.6	6.3 (norinona)
CuCl ₂ /OPAC-P	H ₂ O ₂	d-Limoneno	3	84.3	-
CuCl ₂ /OPAC-P	-	Epóxido de α -Pinoeno	3	73.7	20.8 (aldehído canfolénico)
CuCl ₂ /OPAC-P	-	Epóxido de limoneno	3	2.2	-

^a12.5 mg catalizador, 1.16 mL acetonitrilo, 27 mg sustrato, 50°C, 750 rpm, 79.6 μ L TBHP 70%. ^b44.6 mg sustrato. ^c1.44 mL TBHP 70%. ^d2.5 mg catalizador. ^e60.5 mg catalizador.

Referencias:

1. Becerra, J.-A.; Villa, A.-L. Techno-Economic Evaluation of d-Limonene and α -Pinene Separation from Citrus and Turpentine Oils. *Chem. Eng. Technol.* **2020**, 43 (11), 2295–2306. <https://doi.org/https://doi.org/10.1002/ceat.201900691>.
2. Ozturk, B.; Winterburn, J.; Gonzalez-Miquel, M. Orange Peel Waste Valorisation through Limonene Extraction Using Bio-Based Solvents. *Biochem. Eng. J.* **2019**, 151, 107298. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.bej.2019.107298>.
3. Negro, V.; Ruggeri, B.; Fino, D.; Tonini, D. Life Cycle Assessment of Orange Peel Waste Management. *Resour. Conserv. Recycl.* **2017**, 127, 148–158. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.resconrec.2017.08.014>.



OPTIMIZACIÓN DE LAS CONDICIONES PARA LA PREPARACIÓN DE CARBÓN ACTIVADO A PARTIR DE CÁSCARA DE CACAO PARA LA REMOCIÓN DE SALES

Daniel Molina V^{1*}, Adan-Yovani León^{2,3}, Juan-Ricardo Rincón².

¹Laboratorio de Resonancia Magnética Nuclear. ²Grupo de Recobro Mejorado, GRM, ³Grupo de investigación en Corrosión, GIC, Universidad industrial de Santander- UIS, A.A 678 Bucaramanga, Colombia.

dmolina@uis.edu.co

PALABRAS CLAVES: Cáscara cacao, carbón activado

INTRODUCCIÓN: La alta eficiencia de carbones activados utilizados para remover contaminantes en aguas depende de las condiciones de cómo se transformó la materia prima vegetal hasta carbón, el tiempo de reacción y la activación química [1-3]. Se pirolizaron tres tamaños de cáscara de cacao y se evaluó la capacidad de adsorción.

MÉTODOS: Las variables de la pirólisis se optimizaron con un diseño factorial 2³(temperatura, relación de impregnación-RI y tiempo). La calidad de los carbones se determinó por adsorción de azul de metileno (AM) y cloruro férrico utilizando FTIR-ATR y UVVIS. La información se ajustó con isothermas Freundlich, Langmuir y Temkin.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Las mejores condiciones de pirólisis fueron de 480 °C, RI 1.5 y 30 minutos. Bajo estas condiciones, tres tamaños de cáscara (A, B, C) se pirolizaron hasta carbón activado y sus áreas superficiales fueron de 990, 1217 y 969 m²/g, respectivamente. Los análisis de la eficiencia de adsorción (por UVVIS) mostraron que la de AM (50 a 100 mg/l) y FeCl₃ (100 a 250 mg/l) fue B>C>A. Los % de remoción de AM fueron del 97.1 al 89.8 % y del FeCl₃ del 94.4 al 82.3 %. Mediante FTIR se demostró que la absorción depende del contenido de OH, C=O y -C-O. Los datos experimentales se ajustaron a los modelos de adsorción y el de Freundlich mostró menores valores de error seguido de Langmuir y Temkin. La clasificación de las isothermas se estableció de acuerdo al mejor ajuste del coeficiente de determinación R² y sumatoria de errores cuadrados SSE.

REFERENCIAS:

1. Deliyanni, E. A.; Kyzas, G. Z.; Triantafyllidis, K. S.; & Matis, K. A. Open Chemistry, **2016**, 13, 699-708
2. Yakout, S. M., & Sharaf El-Deen, G. Arabian Journal of Chemistry **2016**, 9, S1155-S1162. 3. Pak, S.-H., Jeon, M.-J., & Jeon, Y.-W. International Biodeterioration & Biodegradation **2016**, 113, 195-200.



LA PRESIÓN ANTRÓPICA SOBRE EL AGUA SUBTERRÁNEA: UN ESTUDIO DE CASO EN MÉXICO.

Amado Enrique Navarro Frómata, David Navarrete Rosas.

Universidad Tecnológica de Izúcar de Matamoros.

navarro4899@gmail.com

Palabras claves: acuífero, calidad, nitratos, nivel.

Introducción: Una adecuada gestión del agua subterránea se vincula con el cumplimiento de varios objetivos del desarrollo del milenio. La sobreexplotación de los acuíferos conduce al deterioro de su calidad y la disminución de su disponibilidad. En México muchos acuíferos han sido sobreexplotados y el de Atlixco-Izúcar tiene este riesgo.

Métodos: Se determinaron los índices fisicoquímicos de un grupo de pozos entre los años 2003 y 2013, así como se analizó la profundidad del nivel estático de acuerdo con datos de organismos públicos. Con base en un índice de calidad se comparó este acuífero con otros de México y el mundo.

Resultados y conclusiones: Los resultados permiten diferenciar una zona alta y otra baja. Algunos índices fisicoquímicos están relacionados con las características geoquímicas de cada zona, presentando valores mayores en la zona baja. Otros muestran la influencia de la estacionalidad, aumentando en época de seca por un efecto de concentración o en época de lluvia por la lixiviación del material de los suelos y capas geológicas. Por último, otros muestran la influencia del empleo de fertilizantes. El mayor problema es la contaminación por nitratos, asociada al uso indiscriminado de fertilizantes y aguas residuales en la agricultura. El índice de calidad del agua es similar al de otras regiones de México de agricultura intensa. Sin un carácter conclusivo, se aprecia una disminución del nivel del agua en los pozos someros. En algunos pozos se detectó la presencia de microcontaminantes orgánicos de origen antropogénico lo que indica la contaminación del acuífero por las mismas.

Referencias:

1. Bodrud-Doza, M.; Islam, A.R.M.T.; Ahmed, F.; Das, S.; Saha, N.; Rahman, M.S. Characterization of groundwater quality using water evaluation indices, multivariate statistics and geostatistics in central Bangladesh. *Water Science*, **2016**, 30(1), 19–40. doi: 10.1016/j.wsj.2016.05.001



REMOCIÓN DE FENOL EN SOLUCIONES ACUOSAS USANDO CARBÓN ACTIVADO PREPARADO A PARTIR DE CUESCO DE PALMA AFRICANA

Cristian H. Ospina Téllez¹, Diana P. Vargas- Delgadillo², Luis Oveimar Barbosa².

¹Estudiante de Licenciatura en educación básica con énfasis en ciencias naturales y educación ambiental, Facultad de Ciencias de la educación. Universidad del Tolima, Grupo de investigación en materiales porosos con aplicaciones ambientales y tecnológicas GIMPOAT. ²Departamento de Química, Facultad de Ciencias. Universidad del Tolima, Grupo de investigación en materiales porosos con aplicaciones ambientales y tecnológicas GIMPOAT.

cristianospinate@gmail.com

Palabras clave: Adsorción, carbón activado, cuesco de palma africana, remoción de fenol.

Introducción: El fenol es una sustancia ampliamente utilizada a nivel industrial, que suele encontrarse en aguas residuales, generando un riesgo para los ecosistemas debido a su toxicidad. El uso de materiales adsorbentes como alternativa tecnológica para su remoción, constituye una opción viable para la mitigación del impacto antrópico sobre el ambiente.

Metodología: El carbón activado fue obtenido mediante la activación química de cuesco de palma con CaCl₂; la carbonización se llevó a cabo empleando CO₂ y posteriormente N₂, el material fue lavado y secado. Se caracterizó textural, estructural y químicamente mediante diversas técnicas y se probó su capacidad de adsorción de fenol.

Resultados y conclusiones: Se obtuvo un carbón activado micro-mesoporoso, con un área superficial de 528 m²g⁻¹ y un volumen de poro de 0.20 cm³g⁻¹, con una química superficial variada; constituida por grupos carboxílicos, fenólicos y lactónicos. El material carbonoso preparado logró una capacidad máxima de adsorción de fenol de 108.54mg.g⁻¹, además, los resultados experimentales de adsorción de fenol fueron ajustados a los modelos de Langmuir y Freundlich, presentando mayor ajuste al modelo de Langmuir; lo cual sugiere una adsorción en monocapa sobre una superficie homogénea, en la cual hay una interacción despreciable entre la moléculas. El carbón activado preparado presenta características texturales y químicas adecuadas para la adsorción de fenol en soluciones acuosas, siendo una alternativa para la remoción de este contaminante común en aguas residuales.

Referencias:

1. Marsh, H.; Rodríguez-Reinoso, F. Activated Carbon; Elsevier Science, 2006.
2. Thommes, M.; Kaneko, K.; Neimark, A.V., Olivier, J.P.; Rodríguez-Reinoso, F.; Rouquerol, J. & Sing, K.S. Physisorption of gases, with special reference to the evaluation of surface area and pore size distribution (IUPAC Technical Report). Pure Appl. Chem. 2015. 87, 1051– 1069.



Calidad hídrica de los humedales de la cuenca del río Tebicuary, Paraguay

Derlysa Colmán¹, Alba Giménez², Lilian García², Saori Nakagoe², Rebeca González², Rosa Degen³, Diana Diez-Pérez-Núñez²

¹Departamento de Físicoquímica, Dirección de Investigaciones, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Asunción. ²Estudiantes de la carrera de Bioquímica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Asunción.

³Departamento de Botánica, Dirección de Investigaciones, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Asunción.

Palabras Claves: Humedales, calidad, cuenca, Tebicuary.

Resumen: En los humedales el sistema hídrico es la unidad funcional principal donde se desarrollan gran parte de las dinámicas hidrológicas, pero la vulnerabilidad que presentan por el aumento de actividades antropogénicas genera alteraciones que acarrearán pérdidas de calidad de hábitat, principalmente para las especies dependientes directa y exclusivamente del agua¹. El objetivo del trabajo fue determinar el índice de calidad de agua (ICA) en humedales de la cuenca del río Tebicuary. Se colectaron muestras de aguas superficiales de humedales lénticos y lóuticos². Se determinaron parámetros físicoquímicos y biológicos por métodos estandarizados y posteriormente se calculó el ICA³. De los doce puntos de muestreo, el menor valor de ICA se encontró en el punto 1 (73,00) mientras que el valor máximo fue de 86,33, correspondiente al punto 10. El 75 % de las muestras analizadas son de aceptable calidad y corresponden a humedales lóuticos, mientras el 25 % se encuentran medianamente contaminados y corresponden a humedales lénticos, ubicados en zonas de cultivos a gran escala y actividad ganadera.³ Estos resultados son preliminares para evaluar el efecto de la calidad del agua en especies acuáticas como *Eichhornia crassipes*, pues las actividades como el uso y cambio de uso de suelo para la agricultura y el bombeo de aguas para riego de cultivos y la descarga de efluentes cloacales en zonas urbanas son características del área de estudio por lo que pueden afectar a especies acuáticas e indirectamente al ser humano.

Referencias:

1. Vreys, N.; Amé, M. V.; Filippi, I.; Cazenave, J.; Valdés, M. E.; Biston, M. A. Arch. Environ. Contam. Toxicol [Online]. **2018**, 9,155–161. <https://doi.org/10.1007/s00244-018-00593-7> (accedido Octubre 15, 2019)
2. Pesce, S. F.; Wunderlin, D. A.; Use of Water Quality Indices To Verify the Córdoba City (Argentina) on Suquía River. Wat. Res[Online]. **2000**, 34(11), 2915–2926. [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(00\)00036-1](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(00)00036-1) (accedido Octubre 15, 2019)
3. NSF (National Sanitation Foundation). Consumer Information: Water Quality Index (WQI) Home Page. www.nsf.org/consumer/just_for_kids/wqi.asp (accedido marzo 29, 2021)



Niveles de mercurio total, parámetros hematológicos y bioquímicos en habitantes del Consejo Comunitario Aires de Garrapatero (Santander de Quilichao, Cauca).

Karina Caballero-Gallardo^{1,2*}, Javier Galvis-Ballesteros¹, Jenny Palomares-Bolaños¹, Maria Alcalá-Orozco¹, Jesús Olivero-Verbel¹,

¹Grupo de Química Ambiental y Computacional, Facultad de Ciencias Farmacéuticas, Universidad de Cartagena, campus de Zaragocilla. Cartagena 130014, Colombia. ²Grupo de Toxicología Funcional. Facultad de Ciencias Farmacéuticas, Universidad de Cartagena, campus de Zaragocilla. Cartagena 130014, Colombia.

kcaballero@unicartagena.edu.co

Introducción: La exposición a mercurio (Hg) constituye un problema de salud pública, especialmente para comunidades vulnerables que viven en zonas de minería aurífera¹. El objetivo del estudio consistió en determinar los niveles de Hg total (Hg-t) en cabello, sangre, parámetros hematológicos y bioquímicos en habitantes del Consejo Comunitario Aires de Garrapatero.

Métodos: Muestras de cabello y sangre fueron obtenidas de mineros (35) y no mineros (52). Los niveles de Hg-t en cabello y sangre fueron medidos en un analizador directo de Hg, la muestra de sangre fue analizada en un equipo automatizado de hematología y el plasma fue utilizado para análisis bioquímico.

Resultados y Conclusiones: De los 35 mineros, 14.3% presentaron niveles de Hg-t mayores de 1 µg/g, valor de referencia de la USEPA. Diferencias significativas no fueron encontradas entre el promedio de Hg-t en cabello para mineros (0.54±0.11 µg/g, rango:0.05- 3.46) y no mineros (0.49±0.09 µg/g, rango:0.03-2.22), este mismo patrón fue observado en sangre. En mineros, el análisis de correlación de Spearman entre Hg-t en cabello y parámetros morfométricos, hematológicos, bioquímicos e ingesta de pescado mostró asociación significativa (p<0.05) para MCH (ρ=0.346), MCHC (ρ=0.509) y Hg-t en sangre con triglicéridos (ρ=0.349). En el grupo no mineros asociaciones significativas (p<0.05) estuvieron relacionadas entre Hg-t en cabello con RBC, HGB, HTC y triglicéridos. En general los resultados mostraron que ambos grupos presentan niveles de Hg-t similares. Sin embargo, se resalta la necesidad de realizar monitoreos continuos y campañas de promoción de la salud por ser poblaciones expuestas a vertimientos contaminantes por explotación minera.

Referencias:

1. Olivero-Verbel, J.; Caballero-Gallardo, K.; Negrete-Marrugo, J., Relationship between localization of gold mining areas and hair mercury levels in people from Bolivar, north of Colombia. *Biological Trace Element Research* 2011, 144 (1), 118-132.



APROVECHAMIENTO DE LA CÁSCARA DE SOJA PARA LA GENERACIÓN DE PRODUCTOS DE INTERÉS INDUSTRIAL

Beatriz Pava-Gómez¹, Ariel Sarotti¹, Rolando Spanevello¹ y Alejandra Suárez¹

¹Grupo de Investigación en Química Verde, Universidad Nacional de Rosario - CONICET, Suipacha 571, Rosario – Santa Fe, Argentina.

pavagomez@iquir-conicet.gov.ar

Palabras claves: Levoglucosenona, carbón activado.

En Argentina se genera como subproducto en el proceso de extracción del aceite de soja más de 400 mil toneladas al año de cáscara de soja. Nuestro trabajo se centra en ofrecer una alternativa bioeconómica su uso. La pirólisis convierte la biomasa sólida en carbón, bio-aceite, junto con gases carbonatados. Sin embargo, esta debe ser específica para generar productos de interés industrial e intensiva para optimizar la producción y el consumo energético.

Se realizó una la pirólisis selectiva de la cáscara, con el propósito de degradar su cadena polimérica, para generar levoglucosenona en el bioaceite y carbón con propiedades adsorbtivas. Se realizaron diseños de experimentos para diferentes metodologías, en la búsqueda de encontrar condiciones óptimas que favorecieran la formación de productos deseados.

Los resultados obtenidos muestran que el pretratamiento de sumergir la cáscara con cantidades catalíticas de H₃PO₄ (2.5 % p/p), pirolizada a 310 °C por 20 min genera hasta 3.5 g de levoglucosenona por cada 100 g de celulosa que contenga la cáscara pretratada (determinado por análisis de RMN sobre los bioaceites). Así mismo, la pirólisis deja como productos entre 4-5 % p/p en bioaceites y entre 45-48 % p/p en carbón por cáscara pretratada.

El carbón generado del proceso anterior fue activado, demostrando que al ser pirolizado en presencia de KOH a 400 °C en atmósfera de nitrógeno, este alcanza un buen poder de adsorción, determinado por ensayo con azul de metileno (AM), hasta alcanzar equilibrio de adsorción-desorción, pasando de 90 mg AM / g carbón a 430 mg AM / g carbón, para el pretratamiento 1:1 en peso con KOH.

Referencia:

1. Comba, M. B.; et al. Eur. J. Org. Chem., 2018, 590-604.



Muestreo pasivo de contaminantes emergentes utilizando láminas de corcho miniaturizadas como fase sorbente

Alejandra Molina-Balmaceda, Inmaculada Cerrato, Daniel Arismendi, Inés Ahumada, Pablo Richter.

Laboratorio de Química Ambiental, Departamento de Química Inorgánica y Analítica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile. Santos Dumont 964, Independencia, Santiago, RM, Chile.

alejandra.molina.b@ug.uchile.cl

Palabras Claves: Corcho, Muestreo Pasivo, Triclosán.

Introducción: Se utilizó corcho, un material biodegradable que presenta variedad de biopolímeros en su estructura, como fase sorbente en muestreo pasivo. Este muestreo consiste en la difusión natural de los analitos desde el medio de muestreo hacia la fase sorbente en el muestreador, obteniendo una concentración promedio en el tiempo (TWA).

Metodología: Los contaminantes seleccionados fueron ácido mefenámico, 17- α -etinilestradiol y triclosán. La calibración de los muestreadores se realizó buscando el ajuste con un modelo de régimen cinético (2). Los muestreos fueron sincrónicos durante 24 horas en la cuenca del Río Mapocho y en la planta de tratamiento de aguas residuales El Treal.

Resultados y Conclusiones: En cuanto a la calibración, tanto TCS como EE2 presentaron isotropía con sus calibrantes. El régimen cinético dura aproximadamente 60 horas, permitiendo muestrear durante largos tiempos de exposición. Para MEF no existe isotropía con su calibrante. Se realizó el muestreo en el río y en la planta de tratamiento de aguas residuales, comparando con muestreos convencionales. Sólo TCS está presente tanto en el río como en el afluente y efluente de la planta, independiente del tipo de muestreo. El muestreo pasivo entrega valores menores que los otros muestreos pero con la misma tendencia. Esto se debe a que es una concentración promedio que depende de las variables del medio de muestreo. El muestreo pasivo es útil en monitoreos ambientales a tiempos prolongados ya que contempla variaciones en las condiciones del río que otros muestreos no. Es una alternativa tanto ecológica como económicamente ventajosa respecto a otros tipos de muestreo.

Referencias

1. Taylor, A. C. et al. Applications for Passive Sampling of Hydrophobic Organic Contaminants in Water—A Review. *Critical Reviews in Analytical Chemistry*. **2019**, 0(0), 1–35. (2) Ahmadi, F. et al. Time Weighted Average Concentration Monitoring Based on Thin Film Solid Phase Microextraction. *Environmental Science and Technology*. **2017**, 51(7).



EVALUACIÓN DE MÉTODOS DE EXTRACCIÓN PARA POLIHIDROXIBUTIRATO PRODUCIDO POR *Bacillus megaterium* B2.

Diana C. Uribe Ribero, Marianny Y. Combariza Montañez, Mabel J. Quintero Silva

Centro de Estudios e Investigaciones Ambientales, Parque Tecnológico Guatiguará, Universidad Industrial de Santander.

marianny@uis.edu.co

Palabras claves: Polihidroxitirato, extracción, *Bacillus megaterium*.

Introducción : El polihidroxitirato, un biopolímero potencial que reemplaza a los plásticos de origen fósil, es sintetizado por muchos microorganismos en forma de inclusiones lipídicas intracelulares. Para su extracción comúnmente se utilizan procesos que involucran solventes clorados. Por lo que un método de extracción alternativo y con bajo impacto ambiental es requerido.

Métodos: El Polihidroxitirato se obtuvo mediante cultivo celular de *Bacillus megaterium* B2 utilizando mucílago de cacao como fuente de carbono. Para los métodos de extracción se usaron agentes químicos (SDS, NaClO y C₂H₅OH), disrupción mecánica (ultrasonido) y tratamiento con CO₂ supercrítico. El biopolímero fue caracterizado por MALDI-TOF, FTIR, TGA y CHNS.

Resultados y conclusiones: La especie *Bacillus* fue capaz de consumir y bioconvertir eficazmente el mucílago de cacao en polihidroxitirato (PHB). En el procesamiento ecológico para la recuperación de PHB a partir de la biomasa, se utilizó CO₂ supercrítico o ultrasonido para disrupción celular y los agentes químicos para solubilizar el material no PHB. Dando como resultado una pureza del 98% y un rendimiento cercano al 41,3% obtenido con la extracción utilizando solventes clorados. Se identificó en el espectro infrarrojo la desaparición de las señales 1647 y 1543 cm⁻¹ correspondientes a la flexión N-H que son debido a impurezas por detritos celulares que se corroboró con la disminución del %N en el análisis elemental. Por TGA y MALDI-TOF se confirmó su identidad como polihidroxitirato. Las propiedades fisicoquímicas y espectroscópicas del PHB son similares a las del PHB estándar y al PHB extraído con solventes clorados. Efectivamente se redujo el costo y el impacto ambiental.

Referencias:

1. Mutiara, I.; Razaad, N.; Li, Y.; Zhao, L.; Mo, Y.; Wang, J. Start a Research on Biopolymer Polyhydroxyalkanoate (PHA): A Review. *Polymers*. **2014**, *6*, 706–754.
2. Yustinah; Hidayat, N.; Alamsyah, R.; Roslan, A. M.; Hermansyah, H.; Gozan, M. Production of Polyhydroxybutyrate from Oil Palm Empty Fruit Bunch (OPEFB) Hydrolysates by *Bacillus Cereus* Suaeda B-01. *Biocatal. Agric. Biotechnol.* **2019**, *18*, 101019.



ESTUDIO DE LA ADSORCIÓN DE MERCURIO SOBRE CARBONES ACTIVADOS FUNCIONALIZADOS

Diana P. Vargas- Delgadillo, Oscar D. Caicedo y Luis Oveimar Barbosa.

Universidad del Tolima

dpvargasd@ut.edu.co

Palabras claves: carbones, activación, funcionalización, mercurio.

Introducción: Debido al impacto ambiental que el mercurio causa sobre los ecosistemas y los seres vivos, es necesario implementar alternativas tecnológicas que permitan su remoción. La adsorción con carbones activados funcionalizados, ha sido usada para la remoción de este tipo de contaminantes gracias a sus propiedades y versatilidad. [3].

Métodos: Los carbones activados fueron preparados mediante activación química de semilla de mango con soluciones de CaCl₂ y H₂SO₄ a diferentes concentraciones y luego carbonizados. Los materiales se funcionalizaron con Na₂S durante 24 h, 473 K, se caracterizaron empleando adsorción física de N₂ a 77K, SEM-EDX, titulaciones Boehm y espectroscopia infrarroja.

Resultados y conclusiones: Se obtuvieron carbones activados de tipo meso macroporosos, con diferencias en sus características estructurales, texturales y químicas. Áreas superficiales entre 15 – 33 m²g⁻¹ y volúmenes de poro entre 0,009-0,018 cm³g⁻¹, estos parámetros son bajos comparados con los obtenidos para otros carbones activados, sin embargo, la química superficial que presentan es rica en grupos oxigenados. El proceso de funcionalización permitió la incorporación del azufre en la matriz carbonosa de los materiales y un aumento de la capacidad de adsorción del ion metálico Hg²⁺ entre el 21- 49%, evidenciando un incremento en la afinidad de la superficie carbonosa por el adsorbato de interés. Pese a que los materiales carbonosos preparados tienen bajas áreas superficiales, otras características de estos materiales como lo son la química superficial, fueron de mayor relevancia en su aplicación en la remoción de ion metálico Hg²⁺ en fase acuosa.

Referencias:

1. Hadi, P.; To, M.H.; Hui, C.W.; Lin, C. S. K.; McKay, G. Aqueous mercury adsorption by activated carbons. Water Res. 2015. 73, 37-55.
2. Bowen Zhanga Samuel Petcher.; Hui Gao Peiyao Yan.; Diana Cai.; George Fleming.; Douglas J. Parker.; Samantha Y.Chong.; Tom Hasellac. Magnetic sulfur-doped carbons for mercury adsorption. J. Colloid Interf Sci. 2021|. 603, 728-737.
3. Vareda, J. P.; Valente, A. J.M.; Durães, L. Assessment of heavy metal pollution from anthropogenic activities and remediation strategies: A review. J. Environ Manag. 2019. 246, 101-118.



Determinación de los parámetros de estrés oxidativo en larvas de peces medaka (*Oryzias latipes*) expuestas a toxinas del grupo ácido okadaico.

Carlos García, Diego Figueroa, Iskra A. Signore, Héctor Contreras, Miguel L. Concha.

Universidad de Chile

cgarciamed@gmail.com

Palabras Claves: *Oryzias latipes*, ácido okadaico.

La incidencia de floraciones de algas nocivas es un grave problema de salud pública y ambiental debido a su relación con la producción de toxinas. El grupo del ácido okadaico está constituido por poliésteres de ácidos grasos, que como contaminantes puede ser analizados mediante biomarcadores celulares y/o químicos.

Larvas de peces Medaka fueron expuestas a concentraciones de ácido okadaico y dinofisistoxina-1 (1-20 ug/ml) para determinar las alteraciones de marcadores bioquímicos. Superóxido dismutasa, catalasa, glutathion peróxidasa, así como marcadores oxidativos (malondialdehído) fueron analizados entre 1 a 96 hde exposición. Las toxinas fueron analizadas por LC-MS/MS.

Dosis agudas (12,4-24,4 uM OA/DTX-1) produjeron una disminución de la actividad de SOD ($\approx 25\%$), CAT ($\approx 55\%$), GPx y GR ($\approx 35\%$). Mientras que los niveles de MDA aumentaron a las mismas concentraciones de OA/DTX-1. Las toxinas del grupo AO tiende a alterar simultáneamente induciendo daños morfológicos en larvas del pez medaka.

Referencias:

1. Figueroa, D., A. Signore, O. Araneda, H.R. Contreras, M. Concha, and C. García. 2020. Toxicity and differential oxidative stress effects on zebrafish larvae following exposure to toxins from the okadaic acid group. *J Toxicol Environ Health A*. 83(15-16):573-588.
2. EFSA. 2008. Opinion of the Scientific Panel on Contaminants in the Food chain on a request from the European Commission on marine biotoxins in shellfish – okadaic acid and analogues. *EFSA Journal*. 6(1):589.
3. Hellou, j. N.W. Neil, and T.W. Moon. 2012. Glutathione, glutathione S-transferase, and glutathione conjugates, complementary markers of oxidative stress in aquatic biota. *Environ Sci Pollut Res*. 19:2007–2023.



QUÍMICA ANALÍTICA

ILACL-452

EXPERIMENTAL ENDPOINT CALCULATION FROM THE THEORETICAL COULOMETRIC TITRATION CURVE FOR POTASSIUM HYDROGEN PHTHALATE CERTIFICATION

J.L. Smith¹, J. A. Ágreda¹, A. Sandoval¹, H. Torres²

¹Universidad Nacional de Colombia, ²Instituto Nacional de Metrología

jlsmitho@unal.edu.co

key-words: Theoretical coulometric titration curve, data fitting, endpoint titration, potassium hydrogen phthalate, certified reference material

Introduction: The coulometric titration is a potential primary method for the certification of potassium hydrogen phthalate (KHP) as certified reference material. Therefore, the calculation of the endpoint is crucial in those titrations. In this work, we calculated the titration endpoint fitting the theoretical titration curve to the experimental data.

Methods: The coulometric titration is performed in three steps: initial, main, and final. The initial and final titration endpoints were calculated by fitting the theoretical curve to the experimental data, using the R software and its algorithms *nlm* and *optim*. The construction of the theoretical titration curve considers the charge and mass balances for all species present in the coulometric cell. The numerical calculations were made considering two equivalent functions: before and after the AgCl precipitation.

Results and conclusions: The numerical results calculated with the function before the AgCl precipitation give a smoother curve than the after AgCl precipitation function. Then, the data fitting with the function before the AgCl precipitation gives more reliable results. Furthermore, the latter function allows us to estimate the net amount of CO₂ and HCl in the initial titration and a more confident result for the amount of KHP, which includes the determination of its acidic constants in the particular conditions used for this work. Our results have a mean variation of 0.005 % compared with the results given by the traditional but not chemically supported (arbitrary) fractional-exponential function.

References:

1. Villela, R. L. A.; Borges, P. P.; Vyskočil, L. Comparison of Methods for Accurate End Point Detection of Potentiometric Titrations. *J. Phys. Conf. Ser. OPEN ACCESS*. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/575/1/012033>.
2. Máriássy, M.; Pratt, K. W.; Spitzer, P. Major Applications of Electrochemical Techniques at National Metrology Institutes. *Metrologia* **2009**, 46 (3), 199–213. <https://doi.org/10.1088/0026-1394/46/3/007>.
3. Liandi, M.; Bing, W.; Luis Ortiz-Aparicio, J.; Velina Lara Manzano GUM, J.; Kozłowski, W.; Dumańska, J.; Pawlina, M.; Pietrzak INM, A.; Mauricio Castillo Forero, A.; Torres Quesada, H.; Andrés España Sánchez, C.; Orlando Cristancho Amaya, R.; Felipe Peralta Bohórquez INMETRO, A.; Pereira Sobral, S.; Paschoal Borges INTI, P.; Hatamleh, N.; Puelles, M.; Iglesias, A.; Lozano KRISS, H.; Jo, K.; Hwang NIM, E. Report of the CCQM K34.2016 Assay of Potassium Hydrogen Phthalate Final Report; 2018.



CADMIUM QUANTIFICATION BY SQUARE WAVE ANODIC STRIPPING VOLTAMMETRY USING BISMUTH FILM ELECTRODE: “IN SITU” INTERNAL STANDARD CALIBRATION AND SINGLE-POINT STANDARD ADDITION

María Camila Gonzalez-Basto¹, Andrea del Pilar Sandoval-Rojas¹, Jesús Alberto Ágreda Bastidas¹, Carlos Andrés España-Sánchez².

¹Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C., Colombia, Instituto Nacional de Metrología de Colombia, Bogotá

²Subdirección de Metrología Química y Biomedicina, Instituto Nacional de Metrología de Colombia, Bogotá D.C.

macgonzalezba@unal.edu.co

key-words: Bismuth film electrode, cadmium

Introduction: The present investigation proposes combining the bismuth oxidation signal as an “in situ” internal standard with the single-point standard addition methods for quantifying Cd²⁺ by square wave anodic stripping voltammetry. The latter compensates for the poor reproducibility and passivation of the working electrode between measurements.

Methods: A standard reference material of cadmium in solution was studied in terms of precision (%RSD) and trueness (bias). Eight replicates of a single-point standard addition with internal standard calibration curves were performed. The results were compared with four replicates of multipoint standard addition with and without the internal standard calibration.

Results and Conclusions: The bismuth oxidation signal from bismuth film – Glassy carbon electrode (BiFE/GCE) is used as an “in situ” internal standard for quantifying Cd²⁺ by square wave anodic stripping voltammetry. The latter allows us to compensate for random variations between measurements, and it increases repeatability. At the same time, it simplifies the standard and sample preparation protocol, eliminating the need to add external standards. Additionally, the single-point standard addition calibration was a practical alternative to passivation of the BiFE/GCE working electrode observed when more than two standards are used for the multipoint calibration curves. The proposed methodology has been shown to improve results in terms of precision and trueness, (RSD = 6.7%, bias = 5.3%), compared to the multipoint standard addition without internal standard (RSD = 43.3%, bias = 74.0 %) or even with internal standard (RSD = 16.1%, bias = 45.0%).

References:

1. Wang, J., Kirgöz, Ü. A., & Lu, J. (2001). Stripping voltammetry with the electrode material acting as a built-in internal standard. *Electrochemistry communications*, 3(12), 703-706.
2. Ellison, S. L., & Thompson, M. (2008). Standard additions: myth and reality. *Analyst*, 133(8), 992-997.
3. Brown, R. J., Roberts, M. R., & Brett, D. J. (2009). Stripping voltammetry using sequential standard addition calibration with the analytes themselves acting as internal standards. *Analytica Chimica Acta*, 635(1), 1-5.



DIAFILTRACIÓN ANALÍTICA: UNA NUEVA APROXIMACIÓN ANALÍTICA DEL MÉTODO DE LAVADO EN PROCESOS DE RETENCIÓN EN FASE LÍQUIDA ASISTIDA POR POLÍMEROS.

Arturo Espinosa-Duque, Mayra A. Mora, Manuel Palencia

Universidad del Valle, Cali-Colombia, Mindtech Research Group (Mindtech-RG), Mindtech s.a.s, Barranquilla-Colombia

arturo.espinosa@correounivalle.edu.co

Palabras clave: Ultrafiltración, polímero, membrana, lavado.

RESUMEN: Las interacciones polímero-analito son de gran importancia en el estudio de procesos industriales y biológicos. Estas pueden estudiarse mediante “Diafiltración Analítica” y el modelamiento del proceso en términos de variables fácilmente medibles. Sin embargo, los modelos actuales no son satisfactorios, por lo que modelos más exactos y consistentes es requerida. El análisis funcional del modelo, así como la comparación con resultados experimentales de la diafiltración continua de cationes metálicos, se desarrolló en: (i) ausencia de agentes retenedores (sistema de retención cero), (ii) presencia de una membrana de polietileno sulfonato (PES) y, (iii) en presencia de una membrana PES y polímeros retenedores. Los resultados demostraron que el modelo permite la simulación de la concentración del analito en la celda, permeado, y de los perfiles de elución de los sistemas analizados. El sistema de retención cero, mediante la comparación con los resultados experimentales, propició el monitoreo del efecto que ejercen los agentes retenedores. Las simulaciones del modelo en presencia de estos componentes evidenciaron predicciones acertadas del comportamiento experimental, sin embargo, en los ciclos de elución (N) primigenios ($N < 3$), la equivalencia entre la simulación y la tendencia real era imprecisa, debido a que las asunciones implicadas en el desarrollo teórico pierden validez en los primeros instantes de la diafiltración. Finalmente, el modelo permitió la determinación de constantes de equilibrio (k_a) y de asociación (K_a) para interacciones analito agente retenedor débiles y fuertes respectivamente, evidenciando que la aproximación teórica introducida en este trabajo, además de predecir acertadamente el comportamiento experimental, presenta potenciales aplicaciones analíticas.

Referencias:

1. Huang, Y.; Feng, X. Polymer-enhanced ultrafiltration: Fundamentals, applications and recent developments. *J. Membr. Sci.* **2019**, 586, 53-83.
2. Rivas, B. L.; Pereira, E. D.; Palencia, M.; Sánchez, J. Water-Soluble Functional Polymers in Conjunction with Membranes to Remove Pollutant ions from Aqueous Solutions. *Prog. Polym. Sci.* **2011**, 36 (2), 294-322.
3. Palencia, M. Liquid-Phase Polymer-Based Retention: Theory, Modeling, and Application for the Removal of Pollutant Inorganic Ions. *J. Chem.* **2015**, 2015, 1-9.



ANÁLISIS RESIDUAL DE PLAGUICIDAS ORGANOCLORADOS Y ORGANOFOSFORADOS EN AGUACATE HASS (*Persea americana* Mill. cv.)

Juan Pablo Betancourt-Arango¹, Cesar Augusto Ossa-Jaramillo², Gonzalo Taborda Ocampo³

¹Licenciatura en Biología y Química, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia. ²Licenciatura en Biología y Química, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia. ³Doctor en Ciencias Químicas, Universidad de Caldas, Manizales, Colombia.

cesar.201320604@ucaldas.edu.co

Palabras Clave: QuEChERS, análisis cromatográfico, arcillas funcionales, inocuidad.

De acuerdo con la agenda interna de competitividad del Departamento de Caldas, el Aguacate tipo Hass, es uno de los productos hortofrutícolas de mayor importancia y proyección en la región Caldense. Por las condiciones favorables del trópico y la gran biodiversidad de plagas, se hace necesario el uso de plaguicidas para su control, lo que conlleva a un potencial peligro para la salud de los consumidores por la residualidad que pudiera quedar de estos químicos tóxicos en el producto final de consumo. La investigación planteada está enmarcada en la inocuidad alimentaria del Aguacate Hass, producido por pequeños y grandes productores del Norte del Departamento de Caldas, lo cual es necesario implementar y validar técnicas de análisis de plaguicidas organoclorados y organofosforados. De esta forma, se llevó a cabo el estudio de dicho producto en la cáscara y la pulpa mediante el uso de los kits de extracción en fase sólida QuEChERS usando dos fases estacionarias, las cuales fueron C_{18} y arcillas funcionales, para la obtención de dichos analitos, y realizar en relación su respectiva separación e identificación por técnicas mucho más sensibles y selectivas como son la cromatografía de microcaptura de electrones (GC - μ ECD), y la cromatografía con detección de nitrógeno y fosforo (GC - NPd).

Referencias:

1. Anastassiades, M., Lehotay, S., Stajnbaher, D., & Schenck, F. (2003). Fast and easy multiresidue method employing acetonitrile extraction/partitioning and “dispersive solid-phase extraction” for the determination of pesticide residues in produce. *Journal of AOAC International*, 86(2), 412–431.
2. Benavides, S., & Echeverri, J. (2014). Validación De Un Método Para El Análisis De Residualidad De Plaguicidas En Aguacate Hass. *Revista de La Facultad de Ciencias*, 3(2), 94–107. <https://doi.org/10.15446/rev.fac.cienc.v5n1.56185>
3. Cossio-Vargas, L. E., Salazar-García, S., González-Durán, I. J. L., & Medina-Torres, R. (2008). Fenología del Aguacate Hass en el clima semicálido de Nayarit, México. *Revista Chapingo. Serie horticultura*, 14(3), 319-324.



DETERMINATION OF SILICON IN WHEAT LEAVES WITH ATR-FTIR AND CHEMOMETRICS

Felipe Beltran, Yohana Cabrera, Andres Cabrera

Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia. University of Copenhagen, Copenhagen, Denmark

ancabreraor@unal.edu.co

The beneficial effects of silicon for plants have been noticed for more than a century, but only during the last two decades has its role in high productivity agriculture systems thoroughly studied. The presence of silicon in plants contributes to stress-relief mechanisms for environmental events such as drought and pathogen attacks. Because of the importance of crops such as wheat, barley, rice, and other grasses that accumulate Si, understanding the relationship between this element and plant science is the focus of numerous scientific efforts. Si quantification is a difficult and costly task, and destructive wet chemistry methods are commonly used. With the recent development of chemometric tools, analysis of silicon in complex matrices has been proved feasible for certain matrices.

In this work, we developed a method for silicon determination in wheat leaves using infrared spectroscopy and chemometrics. Dried leaves from wheat grown in a greenhouse were analyzed using attenuated total reflection infrared spectroscopy (ATR-FTIR) and inductively coupled plasma-optical emission spectroscopy elemental analysis (ICP-OES).

Using varying sets of wave numbers selected by a genetic algorithm, a series of models based on multivariate ordinary least squares regression was built using baseline-corrected ATR-FTIR spectra from wheat leaves samples. Models built with these sets showed a strong correlation with the silicon content determined by elemental analysis. The performance in prediction of each model was assessed using repeated k-fold cross-validation, showing a maximum error of prediction (RMSEP) of 0.1% wt. with minimum model complexity of 4 selected variables. However, a strong dependence on the matrix was noted when compared with other plant tissues.

References:

1. Casey, W., Kinrade, S., Knight, C., Rains, D. & Epstein, E. (2004) Aqueous silicate complexes in wheat, *Triticum aestivum* L. *Plant, Cell & Environment* 27, 51–54.
2. Epstein, E. (1994). The anomaly of silicon in plant biology. *Proc Natl Acad Sci USA* 91.
3. Głazowska, S., Murozuka, E., Persson, D. P., Castro, P. H. & Schjoerring, J. K. (2018). Silicon affects seed development and leaf macrohair formation in *Brachypodium distachyon*. *Physiologia Plantarum* 163, 231–246 (2018).
4. Melucci, D. et al. (2019) ATR-FTIR Spectroscopy, a New Non-Destructive Approach for the Quantitative Determination of Biogenic Silica in Marine Sediments. *Molecules* 24, 3927.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE ÓXIDO DE ZINC (ZnO) DOPADO CON Ag CON POTENCIAL ACTIVIDAD EN FOTOCATÁLISIS

Briyitte Salazar, William Vallejo.

Universidad del Atlántico

bretsi-094@hotmail.com

Palabras Claves: dopaje, síntesis, fotocatalisis

Introducción: La modificación de semiconductores con el fin de mejorar y/o desarrollar nuevas propiedades catalíticas, es una rama de investigación de gran desarrollo y de especial interés debido a las ventajas que estos ofrecen para desarrollar procesos de oxidación avanzada, entre los cuales se encuentra los procesos de degradación de un gran número de moléculas orgánicas. Los procesos de oxidación avanzada surgen como una alternativa para el tratamiento de aguas contaminadas ^(6,7). El ZnO es un semiconductor prometedor en el área de la fotocatalisis heterogénea debido a su baja toxicidad, abundancia, menor costo, actividad fotocatalítica y versatilidad para obtenerse en diferentes formas físicas. Además, es un semiconductor con buenas propiedades conductoras a altas temperaturas y un ancho de banda de 3.37 eV las cuales se pueden mejorar permitiendo la formación de películas con elevados niveles de dopaje y buenos contactos con la capa semiconductor activa o por tratamientos térmicos ^(1,2).

Métodos: Sintetizar óxido de zinc (ZnO) por medio de la técnica sol-gel. Sintetizar ZnO dopado con Ag utilizando la técnica sol-gel. Caracterizar los compuestos sintetizados por medio de la técnica de difracción de rayos X (DRX), reflectancia difusa y microscopía de barrido electrónico.

Resultados y conclusiones: Las técnicas Difracción de Rayos X, Espectroscopia Raman y Reflectancia Difusa, indicaron que hubo un crecimiento del compuesto en forma de hexagonal Wurtzita, además también se demostró la inserción del metal dopante dentro de la estructura del ZnO principalmente para el dopaje con plata donde se observó una disminución del band gap para Ag:ZnO al 2% reportándose un valor de 2,56 eV. los resultados de fotodegradación indicaron que en todos los casos el proceso de dopado mejoró el porcentaje de degradación y la eficiencia más elevada se obtuvo para el compuesto de óxido de zinc dopado con plata al 2%, con un porcentaje de degradación de 35,98 % después de 235 minutos de irradiación.

Referencias:

1. J. Chacón. Ma. Leal. M. Sánchez. E. Bandala. Tratamiento de agua residual proveniente de la industria textil mediante fotocatalisis solar. Instituto Mexicano de Tecnología del Agua.. Cancún, México, 27-31 de octubre, 2002
2. S. Maioco, C. Vera, N. Rajchenberg, R. Aragón. Síntesis de óxidos conductores transparentes de óxido de zinc dopado con aluminio por coprecipitación química. Avances en Ciencias e Ingeniería. Buenos Aires Argentina. Vol. 4, Nº. 4, 2013, págs. 7-13
3. M. Samadi, M. Zirak, A. Naseri, E. Khorashadizade, A. Moshfegh. Recent progression doped ZnO nanostructures for visible-light photocatalysis. Thin Solid Films, Volumen 605, 30 de Abril de 2016, Pág. 2-19.
4. M. Ramírez. Caracterización de películas delgadas de ZnO:Ga³⁺ obtenidas por la técnica de sol-gel. En: Ingeniería en física aplicada 2015. Universidad Tecnológica de la Mixteca. Oaxaca México (2015).
5. M. Alonso. Desarrollo de Películas de Óxido de Zinc para celdas fotovoltaicas. Universidad Veracruzana. Centro de Investigación en Micro y Nanotecnología. México (2014). Pág. 19.



DISCRIMINACION DE PAPELES DE UN DOCUMENTO ANTIGUO PERUANO MEDIANTE ANÁLISIS DE COMPONENTES PRINCIPALES, XRF PORTÁTIL Y FTIR

Celina Luízar Obregón, Marco A. Zamalloa Jara, Flor L. Rojas Arizapana, Yuri J. Chura Huayllani, Janet F. Gonzales Bellido, Mariela Alvarez Cabeza, Jorge Olivera Olivera.

Universidad Nacional de San Antonio Abad del Cusco.

celina.luizar@unsaac.edu.pe

PALABRAS CLAVE: XRF; FTIR, papel colonial

La documentación histórica se ha registrado desde la aparición de la escritura sobre diferentes materiales como papel, papiro, tejidos, entre otros. El uso y manipulación de estos materiales de soporte ha acompañado el desarrollo tecnológico del hombre en el mundo. En hispano América, se ha reportado la elaboración y uso de papel en el México pre-hispánico y se ha descrito la llegada del papel europeo a América del Norte como consecuencia de la colonia española. Esto no se ha discutido antes para Sudamérica. Este estudio es el primero de su tipo en evaluar papeles existentes en el Archivo Regional del Cusco, que datan desde 1569 a 1830, con el fin de describir su composición química, relacionarlos entre sí y sentar las bases para futuras intervenciones de conservación. En este evento se presentarán los resultados de un documento de 1569 cuyo análisis elemental implicó el uso de un espectrofotómetro XRF portátil Olympus Delta Premium, en modo Soil, en tres rangos de energía de hasta 40 KeV, en tiempos de 30 s, 45 s, and 45 s, todo esto por duplicado, en cada punto de evaluación. El análisis de FTIR por transmitancia se realizó con un espectrofotómetro infrarrojo con transformada de Fourier Nicolet 380 y pastillas de KBr a partir de muestras de papel de aproximadamente 8 mg de sectores no deteriorados. Las micrografías se obtuvieron con un microscopio USB portátil 600x. El análisis elemental con XRF demostró que los elementos presentes de manera general son S, Fe, Ca, Cl, K, Mn, Cr, Zn, Ti, V, Ag, Cd, Pb, Sr, As, Rb, Cu, y Hg. Los espectros infrarrojos de los folios antiguos comparados con los del papel contemporáneo, así como el análisis de componentes principales de los datos espectroscópicos permiten hipotetizar la naturaleza y origen del papel evaluados.

REFERENCIAS:

1. Hassan, R. R. A., Ali, M. F., Fahmy, A.-G. A., Ali, H. M., & Salem, M. Z. M. (2020). Documentation and Evaluation of an Ancient Paper Manuscript with Leather Binding Using Spectrometric Methods. *Journal of Chemistry*, 2020, 1-10. <https://doi.org/10.1155/2020/6847910>
2. Yan, Y., Wen, C., Jin, M., Duan, L., Zhang, R., Luo, C., Xiao, J., Ye, Z., Gao, B., Liu, P., & Tang, Y. (2019). FTIR Spectroscopy in Cultural Heritage Studies: Non-destructive Analysis of Chinese Handmade Papers. *Chemical Research in Chinese Universities*, 35(4), 586-591. <https://doi.org/10.1007/s40242-019-9026-4>



CONTAMINACIÓN POR MERCURIO EN PECES DE LOS RÍOS CAUCA Y QUINAMAYÓ: DETERMINACIÓN DEL RIESGO PARA LA SALUD DE LAS COMUNIDADES AFRODESCENDIENTES DEL DEPARTAMENTO DEL CAUCA (COLOMBIA)

Karina Caballero-Gallardo^{1,2*}, Angela Calderon-Ocoro, V1, Neda Alvarez-Ortega^{1,2}, Jenny Palomares-Bolaños¹, Maria Alcalá-Orozco¹, Jesús Olivero-Verbel¹,

1* Grupo de Química Ambiental y Computacional, 2 Grupo de Toxicología Funcional. Facultad de Ciencias Farmacéuticas, Universidad de Cartagena, campus de Zaragocilla. Cartagena 130014, Colombia

Correspondencia: kcaballerog@unicartagena.edu.co

Palabras clave: Quinamayó, Cauca, Salud, Minería.

El mercurio (Hg) es un elemento tóxico distribuido y encontrado a nivel mundial en altas concentraciones en ambientes acuático. El objetivo de este estudio consistió en determinar las concentraciones de Hg total (Hg-t) en peces consumidos por las comunidades afrodescendientes, así como calcular el riesgo a través de la ingesta. Un total de 108 peces fueron obtenidos de los ríos Cauca (25), Quinamayó (55) y comerciales (28) y analizados los niveles de Hg-t empleando un analizador directo RA-915M Zeeman mercury, pirólisis RP-91c y software RP-915P. El riesgo fue estimado de acuerdo con el cociente de peligro (THQ) e ingesta semanal. El promedio de Hg-t en peces del río Cauca, Quinamayó y comerciales fueron $0.36 \pm 0.05 \mu\text{g/g}$ (rango: 0.17-0.64), $0.72 \pm 0.22 \mu\text{g/g}$ (rango: 0.25-1.75) y $0.04 \pm 0.02 \mu\text{g/g}$ (rango: 0.004-0.14), respectivamente. Las especies *Saccodon dariensis*, *Brycon henni*, *Andinoacara pulcher*, *Astyanax fasciatus* y *Prochilodus magdalenae* presentaron niveles de Hg-t superiores a los recomendados por la OMS ($0.5 \mu\text{g/g}$), los más bajo fueron encontrados en especies comerciales. Con respecto al riesgo para la salud humana, las especies de los ríos Cauca y Quinamayó que pueden ser consumidas una vez por semana incluyen *Pimelodus grosskopfii*, *Hypostomus hondae*, *Astyanax fasciatus*, *Oreochromis niloticus*, *Rineloricaria magdalenae* y *Hypostomus hondae*; y más de dos veces por semana incluyen especies comerciales (*Oreochromis niloticus*, *Piaractus brachypomus*, *Prochilodus platensis*, *Oreochromis sp.*, *Leporinus muyscorum*). En conclusión, las altas concentraciones de Hg-t encontradas en estos ríos podrían representar un riesgo para las comunidades afrodescendientes, por lo que es importante advertir a la población sobre el consumo de las mismas.

Referencias

1. Alcalá-Orozco, M.; Caballero-Gallardo, K.; Olivero-Verbel, J., Biomonitoring of Mercury, Cadmium and Selenium in Fish and the Population of Puerto Nariño, at the Southern Corner of the Colombian Amazon. Archives of Environmental Contamination and Toxicology 2020, 79 (3), 354-370.



ANÁLISIS DE DROGAS PSICOACTIVAS Y SUS METABOLITOS EN AGUAS RESIDUALES DE HOSPITAL EXTRAÍDOS CON DISCO ROTATORIO Y ANÁLISIS CUALITATIVO CG-MS Y CUANTITATIVO LC-MS

Fiscal-Ladino, J.; Posada-Lotero M.; Taborda-Ocampo, G.; Rosero-Moreano, M.

Universidad de Caldas.

jhon.fiscal@ucaldas.edu.co

Palabras Claves: LC-MS, Aguas residuales, Drogas.

El estudio de las drogas psicoactivas por parte de la población se ha convertido en un punto principal para las entidades de regulación, debido a que existen actualmente una gran cantidad de compuestos que están apareciendo cada día, generando un efecto más fuerte y a su vez más peligroso para la persona que lo consume, entre ellas se encuentran las más comunes como son la cocaína, las metanfetaminas, el THC, los opioides, el LSD, las benzodiacepinas entre otras.

En la actualidad, existen varios métodos de extracción que se han utilizado para determinar este tipo de compuestos entre ellos, se tienen la extracción en fase sólida (SPE), a la vez las técnicas miniaturizadas como la microextracción en fase sólida (SPME), incluso se han utilizado técnicas más recientes como el QuEChERS, o el disco rotatorio RDSE.

Para la identificación de este tipo de compuestos se realizó un análisis en aguas residuales en los que por literatura se han demostrado que quedan residuos de largo, mediano y corto plazo, dependiendo del tipo de molécula, dentro de las aguas residuales podemos encontrar la orina que sería la principal fuente de eliminación de estas moléculas, y los demás fluidos corporales de eliminación.

El estudio buscó desarrollar una metodología para análisis, identificación y cuantificación de diferentes tipos de sustancias ilícitas y sus metabolitos en muestras de aguas residuales de hospital en Manizales, específicamente en el afluente de la planta de tratamiento de aguas residuales, esta metodología es novedosa, reproducible y de alta sensibilidad que se ha impulsado en el grupo de investigación, con el desarrollo de la tecnología de extracción por desorción en disco rotatorio RDSE y su posterior análisis por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas con derivatización y su confirmación por cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas, se logró hacer un primer acercamiento sobre el tipo de drogas psicoactivas de abuso más utilizado en cada zona evaluada.

Como resultados de esta investigación fueron detectadas al menos 14 tipos diferentes de drogas psicoactivas legales (cafeína) e ilegales (cocaína $0.309 \mu\text{g L}^{-1}$) y sintéticas (MDMA) y de origen y extracción natural (THC $1.0 \mu\text{g L}^{-1}$), y algunos de sus metabolitos (benzoilecgonina $0.636 \mu\text{g L}^{-1}$, THC-A $0.010 \mu\text{g L}^{-1}$, CBD-A $<0.1 \mu\text{g L}^{-1}$) de las cuales se estableció que las sustancias con mayor recurrencia identificada en el estudio fue la cocaína principalmente, sustancias farmacéuticas legales en su mayoría como la lidocaína, fenacetina ($<0.1 \mu\text{g L}^{-1}$) y el levamisol ($0.2 \mu\text{g L}^{-1}$), el THC y el dronabinol, datos que fueron corroborados por LC-MS (orbitrap).

Referencias:

1. Alves, E., Ferreira, A. S. [Agonia, Afonso, C. M., Cravo, S. M., Netto], A. [Duarte P., Carvalho, F., & Dinis-Oliveira, R. J. (2015). , S376.
2. Arias Constantí, V., Sanz Marcos, N., Trenchs Sainz de La Maza, V., Curcoy Barcenilla, A. I., Matalí Costa, J., & Luaces Cubells, C. (2010). , 134(13), 583–586.
3. Baciú, T., Borrull, F., Aguilar, C., & Calull, M. (2016). , 131, 420–428.
4. Bade, R., Ghetia, M., Nguyen, L., Tsharke, B. J., White, J. M., & Gerber, C. (2019). , 6, 953–960.
5. Bassotti, E., Merone, G. M., D'Urso, A., Tartaglia, A., ... de Grazia, U. (2020), 110330.



CARACTERIZACIÓN DE PIGMENTOS LIPOFÍLICOS EN *Chlorella vulgaris* UTILIZANDO ESPECTROMETRÍA DE MASAS MALDI TOF

Stefanny Y. Claro; Luis M. Díaz-Sánchez; Cristian Blanco-Tirado; Marianny Y. Combariza.

Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

stefy.clatri@gmail.com

Palabras clave: Pigmentos lipofílicos, *Chlorella vulgaris*, SFE, MALDI.

Introducción: El ciclo del carbono y el funcionamiento de las cadenas tróficas acuáticas en el planeta dependen del fitoplancton [1]. En este trabajo, los pigmentos no polares presentes en cultivos de microalgas (*Chlorella vulgaris*) se aislaron (mediante SFE y ultrasonido) y se identificaron utilizando reacciones de transferencia electrónica en MALDI-TOF-MS.

Métodos: El cultivo de *Chlorella vulgaris* se realizó bajo condiciones previamente reportadas. Pellets de biomasa fueron colectados por centrifugación (7000 rpm, 10 min) y liofilizados. Los pigmentos se aislaron de los pellets mediante extracción con CO₂ supercrítico [2] y radiación ultrasónica [3]. Los extractos se caracterizaron mediante UV-Vis y MS.

Resultados y conclusiones: Los rendimientos de extracción más altos se obtuvieron utilizando radiación ultrasónica, 30%; comparados con los obtenidos mediante SFE, 10%. Los espectros medidos utilizando espectroscopia UV-Vis presentaron señales características atribuidas a la presencia de carotenoides y clorofilas en los extractos de *C. vulgaris* ($\lambda=400-500$ nm). Lo anterior, fue corroborado mediante el análisis por MS MALDI-TOF, donde se identificaron mezclas de pigmentos de diferentes polaridades e.g. luteína (C₄₀H₅₆O₂), β -caroteno (C₄₀H₅₆), linoxantina (C₄₀H₅₆O₂), clorofila a (C₃₅H₇₂MgN₂O₆), clorofila b (C₃₅H₇₀MgN₂O₆) y sus derivados. Las matrices MALDI α -CNFV's (8,2 eV) permitieron obtener señales con mejores descriptores analíticos comparados con los obtenidos con una matriz comercial -DCTB (8,5 eV). Asimismo, en los extractos también se logró identificar ácidos grasos utilizando DHB como matriz MALDI. MS MALDI se propone como una técnica analítica rápida y robusta que permite la identificación de estos compuestos, utilizados como biomarcadores sensibles a factores externos en los ecosistemas.

Referencias:

1. P. Santhanam et al., "Basic and Applied Phytoplankton Biology". Springer Singapore, 2018.
2. K. Kitada et al., "Supercritical CO₂ extraction of pigment components with pharmaceutical importance from *Chlorella vulgaris*," J. Chem. Technol. Biotechnol., vol. 84, no. 5, pp. 657–661, 2009.
3. M. Stramarkou et al., "Effect of Drying and Extraction Conditions on the Recovery of Bioactive Compounds from *Chlorella Vulgaris*". J. Appl. Phycol., vol. 29, no. 6, pp. 2947–2960, 2017.



EFFECTOS DE LA DISPERSIÓN DE LA MUESTRA Y DE LOS MODELOS ÓPTICOS DE MIE Y FRAUNHOFER EN LA DISTRIBUCIÓN DEL TAMAÑO DE PARTÍCULA EN ARCILLAS DETERMINADA POR DIFRACCIÓN LÁSER.

Madelen Pérez Cano, Daniel Ricardo Durán Riveros

Servicio Geológico Colombiano, Bogotá, Colombia

mperezcano@sgc.gov.co

Palabras claves Difracción-láser, arcillas, modelo-ópticos, ISO-13320:2020

Introducción: Las propiedades de los materiales cerámicos se ven influenciadas por el tamaño de partícula de las arcillas usadas en su preparación. Se propone un método por difracción láser según los lineamientos de la norma ISO 13320:2020 para la determinación de la distribución de tamaño de partícula en arcillas.

Métodos: Muestras de arcillas se caracterizan por difracción láser y difracción de rayos X. Las diferencias significativas estadísticamente para elegir el tratamiento de dispersión de la muestra y el modelo óptico se evalúan mediante un diseño de experimentos factorial utilizando dos factores categóricos con dos niveles (2^2) y 2 réplicas.

Resultados y conclusiones A través del análisis de varianza ANOVA y con el criterio estadístico del valor de probabilidad (valor p) se identifica que tanto el modelo óptico usado como el tipo de dispersión de la muestra influyen significativamente en el tamaño de partícula de los percentiles D10, D50 y D90 ya que, en ambos factores, el valor p es menor al nivel de significancia elegido ($\alpha=0.05$).

Con un diagrama de Pareto se identifica que el modelo óptico es el factor que mayor influencia tiene sobre el ensayo. Con los análisis estadísticos se fijan como parámetros óptimos: la dispersión previa de la muestra con pirofosfato de sodio al 0.3% y el modelo óptico de Mie para muestras con tamaños de partícula menores a 50 μm . El coeficiente de absorción se evalúa para el modelo de Mie. El método de ensayo propuesto cumple con los %CV permitidos por la norma ISO 13320:2020.

Referencias:

1. Ozer, M.; Orhan, M.; Isik, N. S. Effect of particle optical properties on size distribution of soils obtained by laser diffraction. *Environ. Eng. Geosci.* 2010, 16 (2), 163–173.
2. International Organization for Standardization. ISO 13320:2020. Particle size analysis — Laser diffraction methods; Chemin de Blandonnet, Switzerland: 2020.
3. E29 Committee. Practice for reporting particle size characterization data; ASTM International: West Conshohocken, PA, 2019
4. Kowalenko, C. G.; Babuin, D. Inherent Factors Limiting the Use of Laser Diffraction for Determining Particle Size Distributions of Soil and Related samples. *Geoderma* 2013, 193–194, 22–28.



CUANTIFICACIÓN DE AMORFOS POR EL MÉTODO DE RIETVELD USANDO LiF Y RUTILO COMO ALTERNATIVAS DE ESTÁNDARES INTERNOS EN LA CARACTERIZACIÓN DE MATERIALES GEOLÓGICOS POR DIFRACCIÓN DE RAYOS X (DRX).

Madelen Pérez Cano, Gina Fernanda Almeida Monsalve, Daniel Ricardo Durán Riveros

Servicio Geológico Colombiano

gfalmeida@sgc.gov.co

Palabras claves DRX, amorfos, estándar-interno, materiales-geológicos.

Introducción: Los amorfos definen varias propiedades físicas y químicas de los ambientes geológicos donde se encuentran. Se cuantifican los amorfos por DRX con el método de adición de estándar interno. El LiF y el rutilo se proponen como estándares de bajo costo para el análisis cuantitativo por el método de Rietveld.

Métodos: Sobre muestras volcánicas e hidrotermales con diferentes contenidos de amorfos se adicionan los estándares internos LiF y rutilo al 10% y al 20%. Las muestras con y sin estándar se caracterizan por DRX. Con los datos cuantitativos del amorfo se evalúan los factores: tipo y concentración de estándar interno.

Resultados y conclusiones: Se caracterizan los estándares internos encontrándose que son aptos para el uso previsto. Se trazan con el material de referencia certificado ZnO-674b. De la caracterización de las muestras por DRX sin y con adición de estándar interno se evidencia que no hay una afectación significativa en la identificación de las fases por la adición de los estándares.

Usando pruebas de comparación de Tukey a un nivel de confianza del 90% ($\alpha = 0.10$) se observa que no hay diferencias significativas entre las medias de las respuestas obtenidas para los factores tipo y concentración del estándar. Tanto el LiF como el rutilo pueden usarse como estándares internos al 10% ó al 20% para la cuantificación de amorfos por Rietveld. Se fijó el 10% como porcentaje óptimo de trabajo. Para la repetibilidad evaluada no se encontraron variaciones significativas del contenido de amorfo con el criterio estadístico F ($\alpha = 0,05$) $F_{calculado} < F_{crítico}$.

Referencias:

1. De-La Torre, A. G.; Bruque, S.; Aranda, M. A. G. Rietveld quantitative amorphous content analysis. *J. Appl. Crystallogr.* 2001, 34 (2), 196–202.
2. Madsen, I. C.; Scarlett, N. V. Y.; Kern, A. Description and Survey of Methodologies for the Determination of Amorphous Content via X-Ray Powder Diffraction. *Z. Krist.* 2011, 226 (12), 944–955.
3. Pecharsky, V. K.; Zavalij, P. *Fundamentals of Powder Diffraction and Structural Characterization of Materials*, Second Edition, 2a ed.; Springer: New York, NY, 2008.
4. Melo, O. O.; López, L. A.; Melo, S. E. *Diseño de Experimentos Métodos y Aplicaciones*; Universidad Nacional de Colombia Facultad de Ciencias, 2020.



APLICACIÓN DEL MÉTODO CIEMAT DE EXTRACCIONES SECUENCIALES SOBRE MUESTRAS GEOLÓGICAS ENRIQUECIDAS CON COMPUESTOS DE MERCURIO.

Gutiérrez Carranza Luis Alejandro, Romero Zamudio Ingrid Kelly, Valenzuela Garzón Luz Angela, Gómez Christian Fernando, Becerra Lorena.

Servicio Geológico Colombiano, Bogotá, Colombia

lgutierrez@sgc.gov.co

Palabras claves: Extracciones secuenciales, Movilidad, Mercurio.

Introducción: Las extracciones secuenciales contribuyen en la estimación de la movilidad del mercurio en matrices geológicas, debido a que cada fracción se relaciona con las formas químicas presentes. Este trabajo trata la aplicación del método CIEMAT a muestras de sedimento calcinado enriquecidas con diferentes compuestos de mercurio.

Métodos: El procedimiento de extracción secuencial se realizó sobre muestras enriquecidas en dos rangos de concentración; la determinación de mercurio en las muestras sólidas se realizó mediante el analizador directo de mercurio DMA-80, mientras que las fracciones fueron analizadas mediante la técnica de generación de hidruros y absorción atómica.

Resultados y conclusiones: En los resultados obtenidos mediante la técnica de generación de hidruros y absorción atómica de cada una de las fracciones, se observa porcentajes de recuperación superiores al 82 % para las muestras enriquecidas y del 100 % en el material de referencia, lo cual sugiere que la extracción es efectiva. El perfil de extracción de Hg en las fracciones permite diferenciar el mercurio móvil y semimóvil del mercurio inmóvil. Se observa que los compuestos HgCl₂, HgSO₄ y HgO en altas concentraciones se extraen principalmente en la fracción 1, mientras que el compuesto HgS se extrae mayoritariamente en la fracción 4.

Los resultados obtenidos mediante el analizador directo de mercurio en las muestras enriquecidas, sugieren que la homogeneidad de las muestras debe ser mejorada para obtener menor desviación de las réplicas; para ello, se pueden incrementar los tiempos empleados en el micromolino y en la rueda homogeneizadora.

Referencias:

1. Bloom, N. S.; Preus, E.; Katon, J.; Hiltner, M. Selective extractions to assess the biogeochemically relevant fractionation of inorganic mercury in sediments and soils. *Anal. Chim. Acta* **2003**, 479 (2), 233–248.
2. Fernández-Martínez, R.; Rucandio, I. Assessment of a sequential extraction method to evaluate mercury mobility and geochemistry in solid environmental samples. *Ecotoxicol. Environ. Saf.* **2013**, 97, 196–203.
3. Reis, A. T.; Davidson, C. M.; Vale, C.; Pereira, E. Overview and challenges of mercury fractionation and speciation in soils. *TrAC - Trends Anal. Chem.* **2016**, 82, 109–117.



CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA DE ELECTRODOS DE CARBONO PARA BATERÍAS DE FLUJO REDOX DE VANADIO.

Jose M. Machado-Loaiza, Santiago Navales-Parra, Manuela Jaramillo, Catalina Orozco-Silva, Lucas Blandón-Naranjo,
Diana C. Orozco-Gallo.

Escuela de Ciencias, Universidad EAFIT. Medellín, Colombia Universidad de Antioquia. Medellín, Colombia,
Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín. Medellín, Colombia

dcorozcog@eafit.edu.co

Palabras Clave: Baterías, Redox, Vanadio.

Introducción: En Colombia existe la necesidad de acoplar generación de energía eléctrica alternativa con sistemas de almacenamiento en las zonas no interconectadas. Las baterías de Flujo Redox de Vanadio (VFRB) presentan ventajas como son desacople de energía y potencia, alta eficiencia, buena confiabilidad, alta flexibilidad, respuesta rápida y larga vida útil¹⁻³.

Métodos: Los electrodos son componentes fundamentales de las VFRB, en particular de carbono, gracias a su alta conductividad y resistencia a la corrosión. Por tal motivo, se realizarán caracterizaciones fisicoquímicas que incluyen CV, EIS, cronoamperometrías, SEM y DRX para calcular las propiedades importantes de estos materiales para su operación en baterías.

Resultados y Conclusiones: El desarrollo de las VFRBs incluye: los electrodos, los cuales pueden ser de papel de carbón, telas de carbón o barras de grafito que serán estudiados para evaluar su comportamiento en la batería; los canales de flujo, interdigitados o en serpentin, siendo los últimos los más utilizados y que mejores resultados han presentado gracias al buen transporte iónico por convección; finalmente, la concentración del electrolito, que nos daría las condiciones ideales de conductividad y podrían influenciar la capacidad de carga y descarga de la batería. Nuestro objetivo es caracterizar diferentes materiales de carbono como son: carbono vítreo, barras de grafito y telas de carbono, que nos permitan seleccionar el material que garantice una mayor vida útil y resistencia al medio electrolítico para su posterior implementación en las VFRBs.

Referencias:

1. Houser, J.; Clement, J.; Pezeshki, A.; Mench, M. M. Influence of Architecture and Material Properties on Vanadium Redox Flow Battery Performance. *J. Power Sources* **2016**, *302*, 369–377. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2015.09.095>.
2. Gandomi, Y. A.; Aaron, D. S.; Houser, J. R.; Daugherty, M. C.; Clement, J. T.; Pezeshki, A. M.; Ertugrul, T. Y.; Moseley, D. P.; Mench, M. M. Critical Review—Experimental Diagnostics and Material Characterization Techniques Used on Redox Flow Batteries. *J. Electrochem. Soc.* **2018**, *165* (5), A970–A1010. <https://doi.org/10.1149/2.0601805jes>.
3. Cecchetti, M.; Casalegno, A.; Zago, M. Local Potential Measurement through Reference Electrodes in Vanadium Redox Flow Batteries: Evaluation of Overpotentials and Electrolytes Imbalance. *J. Power Sources* **2018**, *400* (June), 218–224. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2018.08.033>.



EVALUACIÓN DEL DESEMPEÑO DE UN ELECTROLIZADOR DE BAJO COSTO PARA LA PRODUCCIÓN DE HIDRÓGENO A PARTIR AGUA DE MAR.

Daniel Ignacio Rojas Valderrama, Ana Londoño Soto, Elizabeth Miranda Montoya, Manuela Rios Villa, Catalina Orozco Silva, Lucas Blandón-Naranjo, Diana Constanza Orozco Gallo

Universidad EAFIT, Medellín, Colombia, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia, Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín, Medellín, Colombia.

corozcos@eafit.edu.co

Palabras Claves: Electrolizadores, Grafito.

Introducción Un método común de producción de hidrógeno es la electrólisis del agua^{1,2}. Para ello, se emplean electrodos de grafito y agua de mar considerando que es una fuente rica en electrolitos que ofrece disminuir el consumo de agua dulce y favoreciendo la producción de cloro¹.

Metodología Para evaluar la viabilidad técnica de un electrolizador con electrodos de grafito y un electrolito complejo como el agua de mar, se realiza una caracterización fisicoquímica de los electrodos aplicando técnicas como CV, EIS, cronoamperometría y las condiciones de operación que minimicen la producción de Cl₂.

Resultados y Conclusiones Se evaluaron diferentes materiales de carbono como carbón vítreo, barras de grafito y grafito HB y 2B al ser materiales aptos para realizar electrólisis. Su comportamiento fue estudiado bajo diferentes condiciones de pH, obteniendo una menor concentración de cloro gaseoso a condiciones de pH neutro. Además, se obtuvieron los coeficientes de difusión de NaCl en cada medio, dando como resultado, valores promedio independientes del pH, con un valor más alto en condiciones ácidas.

Para los diferentes materiales se calcularon los ECSA mediante voltametría cíclica y utilizando la Randles-Sevcik en sistemas K₄(FeCN)₆. Las resistencias por doble capa y transferencia de carga se calcularon a través de EIS, lo que nos permite comparar las resistencias de los materiales para seleccionar el más adecuado para la maximizar la producción de hidrógeno. Finalmente, se evaluaron diferentes densidades de corriente para garantizar unas condiciones óptimas de operación y para obtener una mejor vida útil.

Referencias:

1. De Silva Muñoz, L.; Bergel, A.; Féron, D.; Basséguy, R. Hydrogen Production by Electrolysis of a Phosphate Solution on a Stainless Steel Cathode. *Int. J. Hydrogen Energy* **2010**, 35 (16), 8561–8568. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2010.05.101>.
2. Vickers, J.; Peterson, D.; Randolph, K.; Irwin, L.; Desantis, D.; Hamdan, M.; Stetson, N.; Miller, E.; Satyapal, S. DOE Hydrogen and Fuel Cells Program Record Title: Cost of Electrolytic Hydrogen Production with Existing Technology; 2000.



COMPORTAMIENTO ELECTROQUÍMICO DE CANNABIDIOL SOBRE UN ULTRAMICROELECTRODO DE ORO

Manuela Jaramillo Vanegas, José Manuel Machado Loaiza, Catalina Orozco Silva, Diana Constanza Orozco Gallo, Gastón D. Pierini, Sebastian N. Robledo, Lucas Blandón Naranjo.

Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia, Universidad EAFIT. Medellín, Colombia, Universidad Nacional de Río Cuarto, Argentina.

lhblandonn@eafit.edu.co

Introducción El crecimiento de la industria de cannabis genera la necesidad de desarrollar métodos analíticos para cuantificar rápidamente metabolitos de interés de acuerdo con el marco regulatorio[1]. Se estudió el comportamiento electroquímico de Cannabidiol sobre ultramicroelectrodos de oro como primera etapa para el desarrollo de métodos electroanalíticos de cuantificación.

Métodos Se midió el área electroactiva y la constante heterogénea de transferencia del ultramicroelectrodo de oro mediante voltametría cíclica; la capacitancia y la resistencia de doble capa y de transferencia de carga mediante EIS. Se construyeron curvas de calibración usando SWV, DPV y cronoamperometría para evaluar las mejores condiciones analíticas.

Resultados y conclusiones El área electroactiva y la constante heterogénea de transferencia (solución de $K_4Fe(CN)_6$ 5 mM en KNO_3 0.1 M) mostraron valores de acuerdo a lo reportado en la literatura para este material [2]. El estudio electroquímico de CBD (1mM en TBAF 0.1 M/ CH_3CN) mostró el CBD responde a un control difusional a altas velocidades de barrido y un control mixto a bajas velocidades de barrido. Los estudios realizados por SWV, DPV y cronoamperometría mostraron comportamientos lineales para diferentes concentraciones, con rangos lineales entre 1×10^{-3} y 1×10^{-6} M. Se obtuvieron respuestas electroquímicas correspondientes a las de los estándares cuando se realizaron mediciones usando extractos comerciales de cannabis.

Referencias

1. Ramírez, J.M. La industria del cannabis medicinal en Colombia. FEDESAROLLO, diciembre del 2019. <https://www.repository.fedesarrollo.org.co/handle/11445/3823>
2. Beriet, C.; Pletcher, D. A microelectrode study of the mechanism and kinetics of the ferro/ferricyanide couple in aqueous media: The influence of the electrolyte and its concentration. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 1993, 361, 93–101.
3. Balbino, M. A.; de Oliveira, L. S.; Eleotério, I. C.; Oiye, E. N.; Ribeiro, M. F. M.; McCord, B. R. The Application of Voltammetric Analysis of Δ^9 -THC for the Reduction of False Positive Results in the Analysis of Suspected Marijuana Plant Matter. *Journal of Forensic Sciences*, 2016, 61, 1067–1073.



DEGRADACIÓN DE LA AMOXICILINA MEDIANTE PROCESOS TIPO FENTON CATALIZADOS CON ARCILLAS DELAMINADAS

Crispin A. Celis Zambrano, Diana Lorena Lugo Castañeda, Alejandro Pérez Flórez, Alejandro Pérez Flórez, Alejandro Pérez Flórez.

Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia

crispin.celis@javeriana.edu.co

Palabras claves: Amoxicilina, Arcilla, Fenton, Oxidación

Introducción: La presencia de antibióticos en el medio ambiente, especialmente en el agua, ha sido una problemática ambiental debido a que contribuye en la generación de genes resistentes a antibióticos. Entre las alternativas más prometedoras para la remoción de este tipo de compuestos están los procesos Tipo Fenton catalizados con arcillas.^{1,2}

Métodos: La arcilla delaminada se impregnó por vía húmeda con los metales Fe y Cu (5%) obteniendo cuatro sólidos. El seguimiento de la degradación de la amoxicilina y la determinación de los productos intermediarios se llevaron a cabo mediante cromatografía líquida de alta eficiencia acoplado a espectrometría de masas.

Resultados y conclusiones: Se obtuvieron porcentajes de remoción de la amoxicilina del 100 % para los procesos Tipo Fenton catalizados con arcillas delaminadas con fases activas de Fe y Cu, siendo las mejores condiciones de tratamiento pH 3 y pH 11 respectivamente, peróxido de hidrogeno a una concentración de 0,2 M, 2 g de catalizador y 20 ppm de concentración inicial del contaminante para el procesos catalizados con Fe y 1 ppm para los procesos catalizados con fase activa Cu. Se lograron determinar 8 sub productos de degradación y dos posibles rutas de oxidación de la amoxicilina. Estos resultados son promisorios para la eliminación de amoxicilina en procesos de tratamiento terciario de aguas residuales.

Referencias:

1. Liu, Y.; Zhao, Y.; Wang, J. Fenton/Fenton-like Processes with in-Situ Production of Hydrogen Peroxide/Hydroxyl Radical for Degradation of Emerging Contaminants: Advances and Prospects. *J. Hazard. Mater.* **2021**, 404 (PB), 124191. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2020.124191>.
2. Yang, C.; Wang, L.; Yu, Y.; Wu, P.; Wang, F.; Liu, S.; Luo, X. Highly Efficient Removal of Amoxicillin from Water by Mg-Al Layered Double Hydroxide/Cellulose Nanocomposite Beads Synthesized through in-Situ Coprecipitation Method. *Int. J. Biol. Macromol.* **2020**, 149, 93–100. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2020.01.096>.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE ELECTRODOS BASADOS EN CARBÓN A PARTIR DE TELAS DE ALGODÓN MODIFICADAS CON POLIPIRROL PARA SU APLICACIÓN EN DISPOSITIVOS DE ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA

Arias Ofelia, López, Elvis O, Calderón Juan C, Planes Gabriel A, Baena-Moncada Angélica M

Universidad Nacional de Ingeniería, Lima, Perú. Universidad Nacional de Río Cuarto, Córdoba, Argentina

ofelia.arias.p@uni.pe

Las energías renovables son catalogadas como una solución para frenar el calentamiento global ante el extenso consumo de hidrocarburos, pero aún son intermitentes. Una solución sería almacenarlas para su uso continuo. Los supercapacitores basados en materiales carbonosos son una alternativa para almacenar energía debido a su alta potencia y durabilidad. Los electrodos se obtuvieron a partir de telas de algodón (CTA) impregnadas con/sin rGO y carbonizadas a 800°C en atmósfera de N₂. Luego, fueron pulverizados y preparados en tintas usando nafión como aglutinante, posteriormente fueron modificados con polipirrol (PPy) mediante electropolimerización en medio ácido por voltamperometría cíclica a 50 mV s⁻¹. Los electrodos de CTA con/sin rGO fueron analizadas por SEM y Raman. Con SEM, se visualizaron morfologías en formas de fibras lisas (sin rGO) y rugosas (con rGO). La relación de las intensidades de las bandas D y G del espectro Raman es de 0,97 (sin rGO) y 1,24 (con rGO), mostrando un aumento de la cantidad de defectos cuando la tela es modificada con rGO. A partir de los análisis electroquímicos con celda de tres electrodos se calculó una capacitancia específica de 39 y 182 F g⁻¹ a 5 mV s⁻¹ en 1 mol L⁻¹ de H₂SO₄ para los CTA y CTA-rGO, respectivamente. La modificación superficial con PPy a los CTA-rGO incrementó la capacitancia específica (~ 400 F g⁻¹) gracias a la contribución pseudocapacitiva del PPy. Por lo tanto, estos materiales son una alternativa interesante para el uso en electrodos para aplicaciones en supercapacitores. Supercapacitores, CTA, rGO, PPy.

Referencias:

1. Ahmed, N., Islam Khan, T., and Augustine, A. "CLIMATE CHANGE AND ENVIRONMENTAL DEGRADATION: A SERIOUS THREAT TO GLOBAL SECURITY," Eur. J. Soc. Sci. Stud., vol. 3, no. July, pp. 161–172, 2018, doi: 10.5281/zenodo.1307227.
2. Lukatskaya, M. R., Dunn, B., and Gogotsi, Y. "Multidimensional materials and device architectures for future hybrid energy storage," Nat. Commun., 2016, doi: 10.1038/ncomms12647. Wang, Z. et al., "Polymers for supercapacitors: Boosting the development of the flexible and wearable energy storage," Mater. Sci. Eng. R Reports, vol. 139, p. 100520, Jan. 2020, doi: 10.1016/j.mser.2019.100520.



DEGRADACIÓN DE COLORANTES EN AGUAS RESIDUALES PROVENIENTES DE LA INDUSTRIA TEXTIL A PARTIR DE LA REACCIÓN FENTON Y ANÁLISIS PRELIMINARES PARA EVALUAR PROCESOS ELECTROQUÍMICOS.

Mallerliny Quintero Rodríguez¹, Jaiver Osorio Grisales², Henry Reyes Pineda¹, Ricardo Antonio Torres - Palma³, Ricardo Enrique Palma - Goyes⁴

- ¹. Grupo de Investigación en Ciencias Ambientales (INCIAM), Facultad de Ciencias Agroindustriales, Universidad del Quindío, Carrera 15 No. 12N, Armenia, Quindío, Colombia.
- ². Grupo de investigación en Electroquímica y Ambiente (GIEMA), Facultad de Ciencias Básicas, Universidad Santiago de Cali, Carrera 8 No. 8-17, Santiago de Cali, Valle del Cauca, Colombia.
- ³. Grupo de Investigación en Remediación Ambiental y Biocatálisis (GIRAB), Instituto de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia.
- ⁴. Departamento de Química, Universidad del Valle, Santiago de Cali, Calle 13 No. 100-00, CP 760032, Colombia..

mquinteror_3@uqvirtual.edu.co

Palabras claves: Electro-Fenton Agua-residual-textil, tratamiento-agua, contaminantes

Introducción: Se plantea una solución para el mejoramiento de los procesos ambientales en las industrias textiles mediante la degradación de colorantes en sus aguas residuales utilizando un proceso Fenton. Se analizaron muestras en condiciones reales de operación, se caracterizaron y se determinaron concentración y condiciones óptimas.

Métodos: Caracterización fisicoquímica de las aguas residuales, evaluación de otros parámetros fisicoquímicos que afectan el proceso de la industria textil y estudio de estabilidad del proceso Fenton a diferentes concentraciones de colorantes. Floculador de 6 puestos, reactor electroquímico, voltamperometría, TOC, DBO, pH y GCMS.

Resultados y conclusiones: Se determinó como dosis óptima una concentración de 570 ppm de hierro y 38 ppm de peróxido de hidrógeno para el proceso Fenton. Se observó que no hay oxidación directa en el ánodo, toda la oxidación es indirecta y la concentración de sales en la muestra inicial es muy pequeña, lo que conlleva a la necesidad de adicionar cloruro de sodio para alcanzar una concentración promedio de vertido en aguas residuales de otras industrias textiles que producen prendas de algodón.

Referencias:

1. Zazou, H.; Afanga, H.; Akhouairi, S.; Ouchtak, H.; Addi, A. A.; Akbour, R. A.; Assabbane, A.; Douch, J.; Elmchaouri, A.; Duplay, J.; Jada, A.; Hamdani, M., Treatment of textile industry wastewater by electrocoagulation coupled with electrochemical advanced oxidation process. *Journal of Water Process Engineering* 2019, 28, 214-221.
2. Paździor, K.; Bilińska, L.; Ledakowicz, S., A review of the existing and emerging technologies in the combination of AOPs and biological processes in industrial textile wastewater treatment. *Chemical Engineering Journal* 2019, 376.
3. Martínez-Pachon, D.; Echeverry-Gallego, R. A.; Serna-Galvis, E. A.; Villarreal, J. M.; Botero-Coy, A. M.; Hernandez, F.; Torres-Palma, R. A.; Moncayo-Lasso, A., Treatment of wastewater effluents from Bogota - Colombia by the photo-electro-Fenton process: Elimination of bacteria and pharmaceutical. *Sci Total Environ* 2021, 772, 144890.



DETERMINACIÓN DE GLICOMACROPÉPTIDO-C (GMP_c) EN MUESTRAS DE LECHE MEDIANTE CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA DE ALTA EFICIENCIA (HPLC).

Viviana Morales Sánchez, Juan Velasco, Jhon Fiscal-Ladino, Gonzalo Taborda Ocampo, Milton Rosero-Moreano

Universidad de Caldas

Palabras clave: Glicomacropéptido, cromatografía, analito, lactosuero, calibración.

Introducción: Colombia es el país de la región andina con la **industria láctea** más grande. En América Latina ocupa el cuarto puesto por debajo de Brasil, Argentina y México. Además, representa el 24,3 % del producto interno bruto agropecuario. Al año, Colombia produce alrededor de 7 000 millones de litros de leche, en donde el 50 % es procesado por las grandes compañías procesadoras de lácteos, mientras que el 50 % restante es vendido de manera informal en los lugares que se produce. La adición fraudulenta del lactosuero a la leche puede determinarse por la presencia de un glicomacropéptido (GMP), un compuesto específico del lactosuero y que debe de estar ausente en leche no adulterada. Para identificar este tipo de adulteración se ha realizado un análisis cromatográfico por HPLC-UV de lactosuero en muestras lácteas a empresas del Sector.[1]

Metodología: Para la identificación del glicomacropéptido (GMP), se utilizó una solución estándar secundaria de lactosuero. Todos los demás reactivos utilizados son grado HPLC. La separación cromatográfica se realizó en un sistema HPLC Thermo Scientific Ultimate 3000, equipado con un detector de longitud de onda variable VWD (Detector UV), un horno y un automuestreador. Dirigido a través del software Chromeleon 7. El glicomacropéptido-C (GMP_c) fueron separadas en una columna Shodex protein KW 802.5 de 30 cm de longitud, diámetro interno de 8mm, y con límite de exclusión para proteínas es de 6×10^6 Da, operando a un flujo de 0.9 mL/min en elución isocrática con una solución buffer de fosfato. El volumen de inyección es de 20 μ L y la temperatura de columna de 23 °C, se realizó una curva de calibración con ocho puntos por duplicado, el tiempo de retención del GMP_c es de 9,752 min.[2] [3].

Resultados y Conclusiones: Se realizará de acuerdo a la normativa MAPA N°7 02//03/2010 Instrucao. Se mezclan 20 mL de la muestra mas 10 mL de ácido tricloroacético se agitar la muestra a velocidad baja-media durante 60 minutos en un agitador mecánico orbital, luego se dispensa las muestras en tubos falcon de 50 mL y centrifugar a 3000 RPM durante 10 minutos, se toman 3 mL del sobrenadante empleando una jeringa con su aguja, Filtrar el sobrenadante usando un filtro de 0.22 μ m (de PDVF/ poliamida / nylon) con baja absorción de proteínas y verterlo en un vial de 2 mL de vidrio ámbar. (Diámetro recomendado del filtro 13mm), llevar la muestra contenida en el vial ámbar al cromatógrafo.

La curva se preparo con lactosuero en polvo parcialmente desmineralizado a partir de una solución madre de 6,5%, con ocho puntos desde 0,065 hasta 2,30%, con un coeficiente de correlación de $R^2 = 0,9995$; de acuerdo a la curva de calibración se puede correlacionar el área cromatográfica con la concentración (%) del analito glicomacropéptido c (GMP_c) presente en lactosuero, lo que convierte el GMP_c en un indicador de lactosuero añadido como adulterante de leche. Por lo tanto, una muestra que indica una concentración de 0.133 % de GMP_c es equivalente a decir que dicha muestra contiene un porcentaje de 0.133 % de lactosuero. En las muestras de leche analizadas se han detectado concentraciones de lactosuero que oscilan entre 1,790% a 0,137%.

Referencias

1. P. Y. C. D. E. Café, U. Iván, L. Reyes, M. C. Laura, and G. Tovar, “Universidad autónoma chapingo,” 2009.
2. INEN, “Instituto Ecuatoriano de Normalizacion,” Inst. Ecuatoriano Norm., p. 21, 2006.
3. C. P. Támara Castro, “Aprovechamiento industrial del lactosuero,” p. 83, 2015.



DETERMINACIÓN DE Pb, Zn, Mg, Cd, As, Ni, Cr EN JABONES POR ICP-OES: EVALUACIÓN DE LOS MÉTODOS DE PREPARACIÓN DE MUESTRA

Briyitte Sofia Salazar Torres, Ana Silveira Paim.

Universidad del Atlántico

bssalazar@mail.uniatlantico.edu.co

Palabras claves: Descomposición, espectrometría, metales, intoxicación.

Introducción: Los jabones son sales de ácidos carboxílicos de origen vegetal o animal, que poseen una cadena larga apolar y una cabeza polar denominados ácidos grasos. Esos ácidos grasos compuestos de sales de sodio o potasio tienen propiedades detergentes, que resultan de la saponificación entre un producto alcalino con ácidos grasos superiores a sus triglicéridos. Estas características facilitan la interacción del jabón con medios polares y apolares, ejerciendo por medio de las micelas, las cuales permiten la limpieza (DRAELOS, 1999; KUNTOM, 2004; FERNANDES, 2009; WADE 2012). La preparación de muestra se da por la descomposición de la matriz usada, existen tres diferentes tipos de descomposición: la descomposición por vía húmeda, consiste en descomponer compuestos orgánicos e inorgánicos en sus elementos constituyentes mediante minerales y calentamiento, en estas digestiones son usados ácidos los cuales actúan en la descomposición de la fracción orgánica de la matriz de la muestra, el poder de oxidación va depender del ácido empleado (DE SOUSA et al., 2015; DE ARAUJO, 2003; MATUSIEWICZ, 2003). La descomposición por vía seca, corresponde a métodos de fusión (descomposición de materiales inorgánicos, ocurre en elevadas temperaturas, pero a presión ambiente) y combustión (descomposición de materiales orgánicos, la quema es realizada por el oxígeno del aire el cual actúa como agente oxidante) (DE SOUSA et al., 2015; DE ARAUJO, 2003). **Métodos:** i) descomposición de jabones por vía seca usando un horno tipo mufla, ii) descomposición por vía húmeda usando un microondas; iii) descomposición por calentamiento convencional, haciendo uso de un ácido fuerte en diferentes concentraciones. iv) Cuantificación por espectrometría de emisión óptica con plasma (ICP OES).

Resultados y conclusiones: Se podrá evaluar los métodos de preparación de muestras, incluyendo las diferentes condiciones, facilidades de trabajo, susceptibilidad de contaminación, tiempo de digestión, precisión, exactitud. Teniendo en cuenta que no todos los metales de estudio son tóxicos y que la mayoría de ellos son esenciales en el proceso de saponificación y elaboración del jabón se espera encontrar en mayor concentración aquellos que son de utilidad y bienestar como por ejemplo el Ca y Mg y, en menor proporción o pequeñas trazas de Pb, Zn, Cd, As, Ni, Cr, gracias a que forman complejos metálicos por agentes quelantes. Ahora bien, al finalizar este proyecto, se espera que esta propuesta contribuya al control de calidad en la elaboración de los jabones.

Referencias:

1. Draelos ZD. (1999). *Cosméticos em dermatologia*. Brasil, Rio de Janeiro: 2 ed. Revinter; 1999.
2. De Araujo, A. (2003). *PREPARO DE AMOSTRAS*. Brasil: Grupo de Análise Instrumental Aplicada - Embrapa Pecuária Sudeste, São Carlos.
3. FERNANDES, P. C. A (2009). *Produção de sabão líquido a partir de óleo alimentar usado*. Brasil: FEUP. Dissertação de mestrado. Orientação: Dra. Lúcia Maria Silveira Santos, FEUP, p. 1 - 43.
4. Kuntom, A. (2004). *Comportamiento de los agentes quelantes en jabones a base de aceite de palma*. Malaysia: Pesiaran Institusi, Bandar Baru Bangi. PALMAS - Vol. 25 No. Especial, Tomo I, 2004
5. WADE, L. (2012). *Química orgánica, Volumen 2, Séptima edición*. México: Pearson educación, 2012. p. 1205-1208.
6. Sousa, R.A; Campos, N.S.; Orlando, R. (2015). *Preparação de amostras para análise elementar*. Brasil: UFJF, Apostila.
7. Matusiewicz, Henryk (2003). *Comprehensive Analytical Chemistry Sample Preparation for Trace Element Analysis Volume 41 || Wet digestion methods*. (), 193–233. doi:10.1016/S0166-526X(03)41006-4
8. Bielemann, N.; Novo, D., Pereira, R.; Mello J., Costa, V.; Mesko, Marcia F. (2017). *Determinação de enxofre em shampoo por espectrofotometria uv vis: avaliação de métodos de preparo de amostras*. *Quim. Nova*, Vol. 40, No. 7, 785-790, 2017. Centro de Ciências Químicas, Farmacêuticas e de Alimentos, Universidade Federal de Pelotas, Campus Capão do Leão.
9. Twyman, R.M. (2005). *Encyclopedia of Analytical Science || SAMPLE DISSOLUTION FOR ELEMENTAL ANALYSIS | Wet Digestion*. (), 146–153. doi:10.1016/b0-12-369397-7/00539-2.
10. Pereira, R.; Crizel, Ma.; La Rosa, D.; dos Santos, C.; Mesko, M. (2019). *Multitechnique determination of metals and non-metals in sports supplements after microwave-assisted digestion using diluted acid*. *Microchemical Journal*, 145(), 235–241. doi:10.1016/j.microc.2018.10.043
11. Bhowmik, D. Chiranjib, K.P. Sampath K. (2010). *A potential medicinal importance of zinc in human health and chronic disease*. *Int J Pharm Biomed Sci*, 1(1), 05-11.
12. Prasad (2008), Zinco A.S. na Saúde Humana: Efeito do Zinco em Células Imunes. *Mol Med* **14**, 353-357.
13. Song, Y.; He, K; Levitan, E. B.; Manson, J. E.; Liu, S. (2006). *Effects of oral magnesium supplementation on glycaemic control in Type 2 diabetes: a meta-analysis of randomized double-blind controlled trials*. , 23(10), 1050– 1056. doi:10.1111/j.1464-5491.2006.01852.x
14. Masood, N; Baloch, G; Ahmed, R; Ahmed I. (2009) *Muhammad Anwar Memon and *Muhammad Sadik Memon. Serum Zinc and Magnesium in Type-2 Diabetic Patients*. *Journal of the College of Physicians and Surgeons Pakistan*, Vol. 19 (8): 483-486.
15. Mccaslin, F. E., Jr.; Janes, J. M. (1959). *The effect of strontium lactate in the treatment of osteoporosis.*; *Proceedings of Staff Meetings of the Mayo Clinic*, Vol. 34 , pp. 329-334
16. Reginster, JY; Deroisy, R; Jupsin I. (1998). *Strontium ranelate: a new paradigm in the treatment of osteoporosis*. *Drugs of Today*. Spain
17. Xie, H.; Kang, Y. (2009). *Role of Copper in Angiogenesis and Its Medicinal Implications*. *Current Medicinal Chemistry*, 16(10), 1304–1314.



PREPARACIÓN Y MODIFICACIÓN DE ELECTRODOS SERIGRAFIADOS PARA EL DESARROLLO DE SENSORES DE BAJO COSTO.

Sebastian Carlosama R, Nefer Miranda L, Paubla Gallego, Sandra Navarro G.

Cecoltec Services SAS, Universidad Pontificia Bolivariana, Universidad Nacional de Colombia Sede, Medellín.

snavarro@cecoltec.com

La nanotecnología ha generado gran impacto en el campo electroquímico, mejorando considerablemente las características analíticas de los métodos de detección, miniaturizando y simplificando la instrumentación analítica. Se desarrolló y caracterizó un sensor electroquímico de alta sensibilidad gracias a la amplificación de señal proporcionada por nanopartículas depositadas sobre electrodos serigrafados. Para esto, se realizó una electrodeposición por medio de cronoamperometría a partir de una solución precursora de oro. A continuación, la aplicación de una voltametría de onda cuadrada permitió investigar el desempeño analítico del sensor desarrollado y se usó Hg (II) como analito modelo para la detección. Las características superficiales de los electrodos serigrafados de carbono modificados con nanopartículas de oro (AuNPs-SPCE), adquiridas mediante SEM-EDS, revelaron una capa prominente de amalgamas de oro cuyo tamaño fue crítico para el desempeño del sensor y se confirmó un 99% de pureza de las AuNPs en la superficie del electrodo de trabajo. Diferentes pruebas electroanalíticas demostraron un aumento significativo de la intensidad eléctrica y el declive de la resistencia al flujo electrónico como consecuencia de las nanopartículas en los AuNPs-SPCE. Bajo condiciones óptimas se obtuvo un intervalo de trabajo con comportamiento lineal de 1 ppb a 20 ppb, con un $R^2 = 0.989$ y un límite de detección (LOD) de 0.3 $\mu\text{g/L}$. Nuestros resultados demostraron ventajas como aumento del área superficial del electrodo, mejora de la sensibilidad y de la transferencia de carga, considerable reducción de los costos de fabricación, además de ser un proceso fácil y rápido.

Referencias:

1. Somé, I. T., Sakira, A. K., Mertens, D., Ronkart, S. N. & Kauffmann, J. M. *Talanta* **152**, 335–340 (2016).
2. Hezard, T. et al. *Electrochim. Acta* **73**, 15–22 (2012).
3. Bv, P. Mercury analysis using the ItalSens Au sensor Mercury analysis using the ItalSens Au sensor. (2015).
4. Bernalte, E., Marín Sánchez, C. & Pinilla Gil, E. *Sensors Actuators, B Chem.* **161**, 669–674 (2012).



DETERMINACIÓN DE BIOMARCADORES EN EXTRACTO ACTIVO DE *Nectandra* sp MEDIANTE UHPLC-DAD- ESI-HRMS

Juanita Pulido Teuta, Mónica Constanza Ávila Murillo, Carlos Eduardo Narváez Cuenca

Universidad Nacional de Colombia.

jpulidot@unal.edu.co

Palabras clave: Alzheimer; LXR; flavonoides; *Nectandra*

Introducción: Los agonistas de LXR modulan ApoE y ABCA1, disminuyendo la placa amiloide en modelos murinos, implicando una alternativa terapéutica del Alzheimer¹. Estudios previos muestran que *Nectandra* sp es agonista de LXR¹, lo cual está relacionado con su composición. Nuestro interés es determinar algunos biomarcadores en búsqueda de caracterizar su perfil activo.

Métodos: Se analizó el extracto activo de *Nectandra* sp, mediante RP-UHPLC-DAD y UHPLC-ESI-HRMS. La identificación se basó en el análisis de orden de elusión, espectro UV-Vis, análisis de ion padre y de iones hija. Se recurrió también a hidrólisis ácida del extracto crudo y análisis de los productos de reacción mediante RP-UHPLC-DAD².

Resultados y conclusiones: Se determinó la presencia de tres picos en tR 7,8 ; 9,4 y 14,3min, a 355 nm se reveló un pico mayoritario (27% área cromatográfica) con UV-Vis máximos a 260,0&348,9 nm y [M-H]⁻ a m/z 447,0936. Además, con menor intensidad se encontraron los compuestos 2-3 , con UV-Vis máximos a 265,5&341,0 y 268,6&313,5 respectivamente. En el análisis de masas se observó que el compuesto 2 presentó un ión padre [M-H]⁻ a m/z 431,098 y el ión [M-ramnosa+H]⁻ a m/z 287,0561. El compuesto 3 presentó un ión padre observado tanto en modo positivo cómo en modo negativo correspondiente al peso molecular de 594,1386 u.m.a y iones hija como [M-kaempferol+H]⁻ a m/z 309,0981. El análisis cromatográfico del extracto luego de una hidrólisis ácida indicó que los compuestos 1-3 reaccionaron y como productos de reacción se encontró: quercetina, kaempferol y ácido p-coumárico. Los compuestos 1-3 fueron identificados como quercitrina, afzelina y kaempferol 7ò3 -(6"-p-coumarylglucoside) respectivamente³.

Referencias:

1. Valencia Rincón, E. Generación de Un Modelo in Vitro Para Evaluar La Actividad Agonista de Extractos Naturales, Obtenidos de Plantas de Las Familias de Lauráceas y Miristicáceas, Sobre Los Receptores X Del Hígado (LXRs). 2019.
2. A.M Nuutila; K Kammiovirta; K.-M Oksman-Caldentey. Comparison of methods for the hydrolysis of flavonoids and phenolic acids from onion and spinach for HPLC analysis. Food Chemistry 2002, 76 (4), 519-525. [https://doi.org/10.1016/S0308-8146\(01\)00305-3](https://doi.org/10.1016/S0308-8146(01)00305-3).
3. Grecco, S. S.; Lorenzi, H.; Tempone, A. G.; Lago, J. H. G. Update: Biological and Chemical Aspects of *Nectandra* Genus (Lauraceae). Tetrahedron Asymmetry 2016, 27 (17), 793–810. <https://doi.org/10.1016/j.tetasy.2016.07.009>.



SEPARACIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE PÉPTIDOS DE UNA MEZCLA COMPLEJA: DISEÑO, DESARROLLO Y VALIDACIÓN DE UN MÉTODO ANALÍTICO POR RP-HPLC UTILIZANDO UNA COLUMNA MONOLÍTICA

Nicolas Mateo Gonzalez Lopez, Kevin Andrey Huertas Ortiz, Diego Sebastian Insuasty Cepeda, Jorge Ariel Martínez Ramírez, Zuly Jenny Rivera Monroy, Javier Eduardo García Castañeda.

Universidad Nacional de Colombia.

nmgonzalezl@unal.edu.co

Palabras Claves Péptidos, Dopaje, Cromatografía RP-HPLC.

Introducción: Algunas moléculas peptídicas, en su mayoría análogas hormonales, son empleadas como agentes dopantes, representando una problemática en el deporte. Los métodos analíticos empleados requieren identificar varios péptidos en mezclas, lo cual es un desafío analítico para los laboratorios antidopaje. Es necesario desarrollar metodologías de detección de péptidos en mezclas complejas.

Métodos: Péptidos liberadores de hormona de crecimiento (GHRP's) prohibidos en el deporte, y péptidos anticancerígenos derivados de LfcinB fueron sintetizados mediante SPPS-Fmoc/tBu. La mezcla de estos péptidos se empleó para desarrollar un método analítico por RP-HPLC utilizando una columna empacada, y se transfirió y validó el método utilizando una columna monolítica.

Resultados y Conclusiones: Empleando una columna monolítica (C18) se desarrolló una metodología para separar y cuantificar péptidos de una mezcla compleja de péptidos, entre los cuales se encuentran los péptidos GHRP-4, GHRP-5, GHRP-6, LfcinB (21-25)_{ns}, LfcinB (20-25), LfcinB (20-25)_s, LfcinB (20-25)_l, y LfcinB (20-30)_s. El uso de la columna monolítica permitió optimizar los tiempos de análisis de los péptidos. Además, teniendo en cuenta que el uso de esta columna no se encuentra dentro de las directrices de la AMA (Agencia Mundial Antidopaje), se comparó esta metodología con la que establece la AMA, demostrando que el uso de la columna monolítica conserva parámetros excelentes de rendimiento, selectividad, sensibilidad y robustez. Se pudo determinar que la metodología analítica es apropiada para el análisis de mezclas complejas de péptidos con diferentes propiedades fisicoquímicas, lo cual puede contribuir al desarrollo futuro de metodologías optimizadas para la detección de péptidos en mezclas complejas.

Referencias

1. O. Barroso, D.J. Handelsman, C. Strasburger, M. Thevis, Analytical challenges in the detection of peptide hormones for anti-doping purposes, *Bioanalysis*, 4, 1577–1590 (2012).
2. P. Judák, S. Esposito, G. Coppieters, P.V. Eenoo, K. Deventer, Doping control analysis of small peptides: A decade of progress, *Journal of Chromatography B*, 1173, 122551 (2021).
3. M. Macian, Evaluación de nuevas herramientas analíticas para mejorar la capacidad de detección en el control del dopaje. Tesis de doctorado, Universitat Jaume, 2016.



CARACTERIZACIÓN DEL PIGMENTO BIXINA AISLADO A PARTIR DE SEMILLAS DE *Bixa orellana* L.

Juan E. León-Jaimes, Luis M. Díaz-Sánchez, Cristian Blanco-Tirado, Marianny Y. Combariza.

Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

juanesleon99@gmail.com

Palabras clave: Pigmento-bixina, *Bixa-orellana*, SFE, MALDI.

Introducción: La bixina, pigmento principal en las semillas de *Bixa orellana*, es ampliamente utilizada en alimentos y cosmética. En esta investigación, la bixina se aisló a partir de semillas de *Bixa orellana* mediante radiación ultrasónica y SFE, con posterior extracción con solventes. Los extractos se caracterizaron mediante técnicas espectroscópicas y MS-MALDI.

Métodos: Semillas de *B. orellana* (100 g) fueron divididas en partes iguales para extracción con radiación ultrasónica, utilizando etanol; y SFE, utilizando CO₂ a 38,3 °C y 1350 psi, posterior extracción etanólica^{1,2}. La caracterización de los extractos crudos y de la bixina se realizó mediante FT-IR, RMN, UV-Vis, MS-LDI y MS-MALDI.

Resultados y conclusiones: Los espectros UV-Vis de ambas metodologías de extracción mostraron la presencia de bixina en los extractos. Aún así, mediante MS-MALDI se identificó bixina (C₂₃H₃₀O₄) junto con γ - y δ - tocoferoles, dos de las ocho formas naturales de la vitamina E, en los extractos obtenidos mediante radiación ultrasónica a partir de las semillas de *B. orellana*, sin tratamiento previo, como ha sido reportado previamente por otros autores³. Por otra parte, en el análisis de los extractos obtenidos mediante radiación ultrasónica previo tratamiento por SFE, se identificó exclusivamente bixina (C₂₃H₃₀O₄), la cual pudo ser caracterizada por FT-IR, RMN y espectrometría de masas LDI y MALDI, donde se observaron señales relacionadas con cationes radicales, M⁺ de bixina, m/z 394,2144, y pocas señales adicionales de background. Se continuarán los estudios de aplicaciones con bixina, para evaluarla como posible matriz que promueva la desorción/ionización de compuestos de interés en reacciones en fase gaseosa en MS-MALDI.

Referencias:

1. Albuquerque, C., Meireles, M. Defatting of annatto seeds using supercritical carbon dioxide as a pretreatment for the production of bixin: experimental, modeling and economic evaluation of the process. *J. Supercrit. Fluids*, 2012;66:86- 95.
2. Giridhar, P., Venugopalan, A., Parimalan, R. A review on annatto dye extraction, analysis and processing—A Food Technology Perspective. *J. Sci. Res. Rep.*, 2014;327-348.
3. Rodrigues, L., Alcázar-Alay, S., Petenate, A., Meireles, M. Bixin extraction from defatted annatto seeds. *Comptes Rendus Chimie. C R Chim*, 2014;17:268-283.



DESARROLLO Y VALIDACIÓN DE UN MÉTODO ANALÍTICO PARA LA DETERMINACIÓN DE CANNABINOIDES EN MATERIAL VEGETAL, EXTRACTOS Y AISLADOS DE CANNABIS POR HPLC

Daniel Mora, Carlos A. Escarraga, Claudia Parrado.

Kelab Analítica SAS, Cota, Cundinamarca.

direccion.cientifica@kelabanalitica.com

Palabras Claves: Cannabinoides, cromatografía líquida, Soxhlet

La industria del cannabis ha experimentado un crecimiento sin precedentes gracias a la legalización en países como Canadá, Uruguay, Colombia y muchos más en América Latina y Europa. Sin duda, el interés por esta nueva industria es alimentado por la esperanza de los beneficios medicinales de los compuestos que constituyen esta planta. Dentro de estos compuestos, los cannabinoides son quizás los más activos y con potencial terapéutico. Los cuales han demostrado tener efectos terapéuticos en una variedad de condiciones tales como trastornos metabólicos, trastornos neurodegenerativos, trastornos del movimiento, anorexia en pacientes con VIH, náuseas, y dolor después de la quimioterapia en pacientes con cáncer.

La producción de medicamentos eficaces y seguros para los pacientes requiere la determinación correcta del contenido de los cannabinoides. En este trabajo, presentamos el desarrollo y validación de una metodología robusta y precisa para la determinación de hasta nueve (9) cannabinoides en varias matrices de cannabis, incluyendo material vegetal, extractos, aislados y formulaciones magistrales. El método fue validado de acuerdo a la norma International Council for Harmonisation ICH, Q2(R1) "Validation of Analytical methodologies". La exactitud del método se evaluó determinando el porcentaje de recuperación de cannabinoides a partir de matrices de referencia como material vegetal y aceites preparadas y caracterizadas en el laboratorio. Muestras de blancos de la matriz vegetal con bajo contenido de cannabinoides se prepararon por medio de un proceso de extracción por Soxhlet y ultrasonido, utilizando Etanol como disolvente orgánico.

Debido a las limitaciones en obtener algunos cannabinoides en cantidades considerables para realizar la validación, fue necesario utilizar extractos previamente caracterizados para determinar su contenido de cannabinoides. A partir de estos extractos, se adicionaron cantidades de cannabinoides en tres niveles de concentración y cada nivel se analizó por triplicado para determinar el porcentaje de recuperación. Los resultados obtenidos (porcentaje de recuperación) para los cannabinoides fueron mayor a 85% en concentraciones de 0.1% (p/p) y >95% para concentraciones de hasta 20% (p/p) contenido de cannabinoides. La linealidad del método se determinó en el rango de 1,0 a 200 µg / mL para cada uno de los 9 cannabinoides con un coeficiente de correlación (R²) de la regresión lineal $\geq 0,992$.

Los resultados obtenidos demuestran que el método por cromatografía líquida de alta eficiencia con detector de Ultravioleta visible, para la identificación y determinación cuantitativa de 9 cannabinoides principales en la matriz de flor seca, extracto de Cannabis y aislado de CBD, es exacto, preciso e idóneo para su uso como método de control de calidad.

Referencias:

1. Namdar D, Charuvi D, Ajjampura V, Mazuz M, Ion A, Kamara I, Koltai H. LED lighting affects the composition and biological activity of Cannabis sativa secondary metabolites. *Ind Crops Prod.* 2019;132:177– 85.



DESARROLLO DE MATERIALES DE REFERENCIA “IN HOUSE”: UN DESAFÍO FORENSE

Natalie Álvarez-Alarcón¹, Dennis Mauricio Ocampo-Chaguendo^{2,3}, Manuel Hernando Nova Fuentes^{1,3}, Liz Wendy Cuadros-Veloza², Diego Alberto Sánchez-Robayo³, William Fernando Garzón-Méndez³, S.E. Melo Martínez⁴, Fabián Parada-Alfonso¹

¹Grupo de Investigación en Química de Alimentos (GiQA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C.-Colombia. ²Centro Internacional de Estudios Estratégicos Contra el Narcotráfico, Dirección de Antinarcóticos, Policía Nacional, Bogotá D.C.-Colombia. ³Grupo de Drogas de Abuso, Laboratorio de Química, Fiscalía General de la Nación, Bogotá D.C.-Colombia. ⁴Facultad de Ciencias Agrarias, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C.-Colombia.

naalvarezal@unal.edu.co

Palabras clave: Materiales de referencia; Homogeneidad; Estabilidad; Pureza; Drogas de abuso.

Resumen: Los laboratorios forenses necesitan emplear materiales de referencia certificados (CRM, por sus siglas en inglés), para garantizar confiabilidad en los resultados obtenidos. De igual forma, algunas técnicas analíticas requieren usar materiales de referencia (RM, por sus siglas en inglés). Sin embargo, existen limitaciones dada la escasa disponibilidad de éstos.

A partir de lo anterior, ha surgido la necesidad de que los laboratorios analíticos desarrollen RM para su propio uso interno, los cuales se conocen como “RM internos” o RM “in house” (RMih). Estos materiales suelen ser desarrollados cuando las matrices de los RM disponibles comercialmente, no coinciden con las muestras que van a ser analizadas o cuando se busca un suministro amplio que esté disponible por mucho tiempo [1,2]. Es importante resaltar que, para desarrollar estos materiales, se deben tener en cuenta algunos aspectos como: selección (adecuación, material natural versus preparado, preparación del material), ensayos de homogeneidad, preparación y envasado, ensayos de estabilidad, ejercicios de asignación de valor, estimación de incertidumbre, documentación y control de calidad, mecanismo para la aprobación del valor asignado, almacenamiento y distribución [3].

En el caso de Colombia, los laboratorios forenses del país requieren RM de drogas de abuso, que estén disponibles y que no representen costos elevados. Por ejemplo, nuestro país es reconocido por ser el principal productor mundial de cocaína con fines ilegales. Sin embargo, los laboratorios que realizan pruebas forenses deben importar estos RM a un costo alto; además, en el país no se han reportado estrategias metodológicas para el desarrollo de RM. Con base en lo mencionado, el presente trabajo abordará una revisión bibliográfica que permita visibilizar los parámetros a tener en cuenta para el planteamiento de una posible metodología en torno al desarrollo de RMih de drogas de abuso en nuestro país.

Métodos: A partir de lo reportado en la literatura, se resaltarán información acerca de parámetros como análisis cualitativo cuantitativo, estudios de homogeneidad, estabilidad y pureza, y estimación de incertidumbre, lo cual pueda aportar al planteamiento de una estrategia metodológica en torno al desarrollo de RMih de drogas de abuso para su uso en laboratorios forenses colombianos.

Referencias:

1. R. P. Archer, R. Treble, and K. Williams, “Reference materials for new psychoactive substances,” *Drug Test. Anal.*, vol. 3, no. 7–8, pp. 505–514, 2011, doi: 10.1002/dta.317.
2. W. Cunningham and S. Capar, “Elemental Analysis Manual for Food and Related Products,” FDA U.S Food and Drug Administration, 2014. <http://www.fda.gov/Food/FoodScienceResearch/LaboratoryMethods/ucm2006954.htm>.
3. Inter American Accreditation Cooperation, “ILAC-G9:2005. Guía para la selección y uso de Materiales de Referencia,” 2007.

AVANCES Y RETOS EN QUÍMICA FORENSE: DROGAS DE ABUSO EN AMÉRICA LATINA

William Fernando Garzón-Méndez¹, Diego Alberto Sánchez-Robayo¹, Manuel Hernando Nova Fuentes^{1,2}, Dennis Mauricio Ocampo-Chaguendo^{2,3}, Liz Wendy Cuadros-Veloza², Natalie Álvarez-Alarcón², Jorge Eliecer Camargo-Mendoza⁴, Sandra Esperanza Melo-Martínez¹, Fabián Parada-Alfonso²

¹Grupo de Drogas de Abuso, Laboratorio de Química, Fiscalía General de la Nación, Bogotá D.C.-Colombia. ²Grupo de Investigación en Química de Alimentos (GiQA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C.-Colombia. ³Centro Internacional de Estudios Estratégicos Contra el Narcotráfico, Dirección de Antinarcóticos, Policía Nacional, Bogotá D.C.- Colombia. ⁴Universidad Nacional de Colombia-Sede Bogotá, Bogotá D.C.- Colombia.

deocampoc@unal.edu.co

Palabras clave: Química forense; trabajo interdisciplinario; técnicas analíticas; drogas de abuso.

La química forense se caracteriza por tener un amplio campo de acción, generando posibilidades de esclarecer diferentes hechos delictivos, por medio de técnicas analíticas. Dentro de este campo, se encuentra la búsqueda de soluciones a diferentes interrogantes que surgen en torno al control y lucha contra el narcotráfico. Para lograr esto, se lleva a cabo el análisis de “muestras simples”, el desarrollo de métodos de análisis complementarios e interpretación de resultados a través de la cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas y cromatografía de alta eficiencia acoplada a Espectrometría de masas con detector Cuadrupole Time-of-Flight (QTOF) entre otras técnicas instrumentales y la generación de bases de datos para su posterior análisis estadístico multivariado. Es importante resaltar que esta tarea implica un trabajo interdisciplinario con el fin de generar políticas de lucha contra el narcotráfico.

Por ejemplo, las drogas sintéticas, dentro de las cuales también se encuentran las Nuevas Sustancias Psicoactivas (NSP), plantean uno de los problemas mundiales más graves, dado el aumento en su producción y amplia oferta. Los estimulantes de tipo anfetamínico son las drogas que más se consumen a nivel mundial después del cannabis y los opioides, debido a que sus niveles de consumo a menudo superan los de la heroína o la cocaína [1]. En la Declaración Política y el Plan de Acción de 2009, la comunidad internacional reconoció que las drogas sintéticas plantean un problema especial debido a la diversidad de los precursores utilizados en el proceso de fabricación y a la facilidad con que se sustituyen [2]. Por esta razón, surge la necesidad de desarrollar metodologías que incluyan el perfilamiento químico de drogas de síntesis y NSP, lo cual busca aportar a la construcción de una base de datos de perfiles de drogas sintéticas, que brinde a las autoridades mayores herramientas para la generación de estrategias de control y de fiscalización de drogas, lo cual resultaría siendo bastante utilidad en Colombia. Para llevar a cabo esto, se deben emplear técnicas analíticas, así como análisis multivariado por conglomerados y análisis discriminante quimiométrico, lo cual deja en evidencia la importancia de la interdisciplinariedad en la química forense [3].

Teniendo en cuenta lo anterior, el presente trabajo tiene como objetivo resaltar el estado del arte en Latinoamérica en torno a las drogas de abuso, debido a que esto posibilita evidenciar los retos que necesitan trazarse desde la Química Forense.

Métodos: El análisis de drogas ocultas/camufladas, el uso de tecnología de última generación como el GC/MS y HPLC/Q-TOF, así como la generación de bases de datos e interpretación de resultados analíticos como espectros de masas, son retos rutinarios para el químico forense que obliga a contar con instrumental de última tecnología, y a interactuar con profesionales de diferentes áreas del conocimiento. A partir de esto, se abordará el estado del arte de drogas de abuso en América Latina.

Referencias:

1. UNODC. (2020). Expansión del mercado de drogas sintéticas – Consecuencias en el control de precursores. Oficina de las Naciones Unidas contra la Droga y el Delito, Vienna.
2. UNODC. (2009). Declaración política y plan de acción sobre cooperación internacional en favor de una estrategia integral y equilibrada para contrarrestar el problema mundial de las drogas. Oficina de las Naciones Unidas contra la Droga y el Delito, Viena.
3. James, M., & Jane, M. (2002). Estadística y Quimiometría para Química Analítica (Cuarta ed.). Madrid: Pearson Educación, S.A.

QUÍMICA DE ALIMENTOS



QuEChERS EXTRACTION AND UHPLC/ESI Q-ORBITRAP-MS ANALYSIS OF PESTICIDE RESIDUES IN TROPICAL FRUITS.

Fausto Prada, Andrés González, Elizeth Matajira, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko

Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

faustoprada@gmail.com

key-words: QuEChERS, HRMS, pesticides, tropical fruits.

Introduction: The demand for tropical fruits is rapidly increasing in many European countries [1]. However, these products must fulfill the maximum residue limits (MRLs) of pesticides to ensure consumers safety [2]. Our aim was to establish a method for the analysis of pesticide residues in tropical fruits, namely, avocado (*Persea americana* Mill.), banana passion fruit (*Passiflora tripartita* (Juss.) Poir.), gulupa (*Passiflora edulis* f. *edulis* Sims), lulo (*Solanum quitoense* Lam.), and goldenberry (*Physalis peruviana* L.).

Methods: Sample extraction and clean-up followed the buffered QuEChERS procedure and the analysis was performed by ultra-high performance liquid chromatography, coupled to electrospray Q-Orbitrap mass spectrometry (UHPLC/ESI Q-Orbitrap-MS) [3].

Results and conclusion: The method allowed the simultaneous detection of 703 pesticides in the fruit samples. Some pesticides showed more than one adduct, namely $[M + H]^+$, $[M + NH_4]^+$, $[M + Na]^+$ or $[M - \text{fragment}]^+$; e.g., aldicarb showed the adduct $[M - C_2H_4NO]^+$ [4]. Screening of pesticides in samples was based both on their retention times (± 0.25 min) and on the mass accuracy ($\Delta\text{ppm} < 4$) of the characteristic ions, those with the highest abundance were selected to increase pesticide molecule detectability. About 74–94% of the pesticides showed ion suppression $< 30\%$ or ion enhancement $< 10\%$, and 87% had recoveries between 70 and 120%. The seven-point calibration curves were constructed in the range 1-100 ag/L equivalent to 2-200 ag/kg. The method proved to be sensitive enough to detect 92% of the pesticides at ≤ 10 ag/kg. UHPLC/ESI Q-Orbitrap-MS along with QuEChERS sample preparation offered a practical screening and quantitative method for the analysis of pesticide residues in routine monitoring programs for food safety.

References:

1. Cornara, L.; Xiao, J.; Smeriglio, A.; Trombetta, D.; Burlando, B. *eFood*. **2020**, *1*, 126-39.
2. EU Maximum Residue Levels, https://ec.europa.eu/food/plant/pesticides_en (last accessed May **2021**)
3. Wang, J.; Leung, D.; Chow, W.; Wong, J. W.; Chang, J. J. *AOAC Int.*, **2020**, *103*, 1547- 59.
4. Paul, A.; Khan, Z.; Bhattacharyya, A.; Majumder, S.; Banerjee, K. *J. Chromatogr. A.*, **2021**, *1648*, 462208.



PHENOLICS COMPOSITION, ANTIOXIDANT AND INHIBITORY ACTIVITY ON METABOLIC SYNDROME-ASSOCIATED ENZYME OF PEUMO (*Cryptocarya alba* Mol., Lauraceae) FRUITS, A PRE-HISPANIC FOOD IN CENTER-SOUTH OF CHILE.

Javier Antileo-Laurie, Cristina Theoduloz, Felipe Jiménez-Aspee, Marlene Fischer, Verónica Olate-Olave, Guillermo Schmeda-Hirschmann.

Universidad de Talca, Chile, Fraunhofer Chile Research, Agro, Foods & Ingredients Business Area Santiago, Chile, Universidad San Sebastián, Valdivia, Chile.

javier.antileo@uss.cl

key-words: Peumo, Phenolics, antioxidants, α -glucosidase.

Cryptocarya alba, known as Peumo, is a tree native to Chile. The fruit is characterized by being odorous, edible bitter-tasting oval drupe, pink/red-skinned, and consumed in rural areas. This work presents the phenolic constituents, their antioxidant capacity and inhibitory effect on metabolic syndrome associated enzymes. The extracts were assessed for antioxidant capacity and inhibitory activity on metabolic syndrome-associated enzymes, and the composition of the extracts was assessed by HPLC-DAD MS/MS.

The main constituents in the cotyledon were 5 and 3-O-CQA, while in the peel was Quercetin-3-O-rhamnoside and other quercetin derivatives. The extracts showed good activity towards α -glucosidase and pancreatic lipase. The boiling process doesn't affect in a significant way the phenolic composition.

Financial support from FONDECYT 1170090 is acknowledged. JA-L thanks Universidad de Talca Doctoral grant during 2017 and ANID Beca Doctorado Nacional Año Académico 2018 N° 21180359. We thank FONDEQUIP EQM 170023 for the HPLC-MS/MS measurements

References:

1. Hoffmann, A. (1991). Flora silvestre de Chile: Zona Araucana. 4. ed. Santiago, Chile.
2. Schmeda-Hirschmann, G., Jiménez-Aspee, F., Theoduloz, C., & Ladio, A.H. (2019). Patagonian berries as native food and medicine. *Journal of Ethnopharmacology*, 241, 111979, 27 pp. doi: 10.1016/j.jep.2019.111979



EXTRACCIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE ANTOCIANINAS A PARTIR DE EXTRACTOS DE *Oenocarpus mapora* OBTENIDOS MEDIANTE EXTRACCIÓN CON LÍQUIDO PRESURIZADO

Julián Mora Varela¹, Harlen Torres Castañeda², Hugo Martínez Correa¹

¹Departamento de Ingeniería, Facultad de Ingeniería y Administración, Universidad Nacional de Colombia sede Palmira.

²Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería y Administración, Universidad Nacional de Colombia sede Palmira.

hgtorresc@unal.edu.co

Palabras claves: Contenido total de fenoles, Arecaceae, Pacífico colombiano, Contenido de antocianinas monoméricas.

Oenocarpus mapora (milpesillos) es una palma (Arecaceae) cuyos frutos son muy utilizados en zonas del Pacífico colombiano como alimento por su alto valor nutricional y es consumido en forma de postres y jugos. Los frutos maduros de *O. mapora* son fuentes de compuestos bioactivos tales como antocianinas y fenoles en general. En la búsqueda de condiciones óptimas para la extracción de antocianinas a partir de frutos maduros de *O. mapora* mediante extracción líquida presurizada dinámica (PLE), se evaluó el efecto del tipo de solvente (mezclas etanol/agua), concentración de ácido cítrico (0 y 0,3%) y la temperatura (60 y 80 °C) utilizando un diseño factorial. A los extractos obtenidos se les evaluó el rendimiento de extracción, el contenido de fenoles totales y el contenido de antocianinas monoméricas. Los resultados indican que el rendimiento de extracción aumenta considerablemente (48,5±5%). El contenido de antocianinas monoméricas también aumenta empleando condiciones ácidas, sin embargo el contenido de fenoles totales disminuye bajo estas condiciones. La mezcla etanol/agua (70:30) es la mejor para la extracción de fenoles totales, mientras que la mezcla etanol/agua/ácido cítrico (70:29,7:0,3) a 60 °C es la mejor condición para la extracción de antocianinas. Se identificaron ácidos fenólicos, ácidos cinámicos y antocianinas, siendo glucósidos de cianidina los principales constituyentes.

Agradecimientos: Los autores agradecen a la Facultad de Ingeniería y Administración de la Universidad Nacional de Colombia por el apoyo en la financiación de este proyecto con código quipu 20101002000.

Referencias:

1. Pereira, D. T. V., Tarone, A. G., Cazarin, C. B. B., Barbero, G. F., & Martínez, J. (2019). Pressurized liquid extraction of bioactive compounds from grape marc. *Journal of Food Engineering*, 240, 105–113. <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2018.07.019>
2. Garzon, G. A., Narvaez-Cuenca, C. E., Vincken, J. P., & Gruppen, H. (2017). Polyphenolic composition and antioxidant activity of acai (*Euterpe oleracea* Mart.) from Colombia. *Food Chem*, 217, 364–372. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2016.08.107>



EVALUACIÓN FITOQUÍMICA Y CAPACIDAD ANTIOXIDANTE DE RESIDUOS DE AGUACATE HASS (PERSEA AMERICANA MILL.) CULTIVADO EN COLOMBIA

Juan Felipe Grisales Mejía¹, Hugo Martínez Correa¹, Harlen Torres Castañeda².

¹Departamento de Ingeniería, Facultad de Ingeniería y Administración, Universidad Nacional de Colombia sede Palmira.

²Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Ingeniería y Administración, Universidad Nacional de Colombia sede Palmira.

jfgrisalesm@unal.edu.co

Palabras claves: Epicarpio, Semilla, DPPH, Fenoles.

En la actualidad, el interés por los antioxidantes naturales se ha incrementado. Por lo general, estos metabolitos secundarios se pueden encontrar en mesocarpio, epicarpio y semilla de frutos. Ejemplo de ello, son epicarpio y semilla de aguacate Hass, fracciones residuales generadas del aprovechamiento de la pulpa. Las fracciones se deshidrataron en hornoconvectivo y se redujo su tamaño de partícula. Los extractos se obtuvieron por ultrasonido empleando acetona/agua, etanol y una mezcla de etanol/agua. La capacidad antioxidante por DPPH se determinó en un lector de microplacas. Los resultados se analizaron a través de ANOVA y Tukey. El extracto seco de epicarpio extraído con acetona:agua (70:30) presentó el mayor valor de CTF (208,467 mgEAG/gES), aunque la capacidad de eliminación de radicales DPPH (1.183,12 μ moles ET/g ES) se ubicó por debajo de la media de todos los extractos. La medición más alta en la capacidad antioxidante la registró el extracto de recubrimiento de semilla (2.651,94 μ moles ET/gES). Se puede concluir que estos productos naturales, considerados fracciones residuales de aguacate Hass, cuentan con un potencial elevado en cuanto a la presencia de compuestos fenólicos y capacidad antioxidante, especialmente en recubrimiento de semilla, que pueden ser aprovechadas en la formulación de diversos productos industriales asociados a sectores farmacéuticos, cosmetológicos y alimenticios.

Referencias:

1. Figueroa, J. G., Borrás-Linares, I., Lozano-Sánchez, J., & Segura-Carretero, A. Comprehensive characterization of phenolic and other polar compounds in the seed and seed coat of avocado by HPLC-DAD-ESI-QTOF-MS. *Food Research International* 2018a, 105, 752-763. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2017.11.082>
2. Figueroa, J. G., Borrás-Linares, I., Lozano-Sánchez, J., & Segura-Carretero, A. Comprehensive identification of bioactive compounds of avocado peel by liquid chromatography coupled to ultra-high-definition accurate-mass Q-TOF. *Food Chemistry* (2018b), 245, 707-716. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2017.12.011>
3. Wang, W., Bostic, T. R., & Gu, L. Antioxidant capacities, procyanidins and pigments in avocados of different strains and cultivars. *Food Chemistry* 2010, 122(4), 1193-1198.



Caracterización química y actividad antiplaquetaria de extractos obtenidos de clones de *Aristotelia chilensis*.

Lyanne Rodríguez¹, Andrés Trostchansky², Hermine Vogel³, Eduardo Fuentes⁴, Iván Palomo⁴.

¹Thrombosis Research Center, Department of Clinical Biochemistry and Immunohaematology, Faculty of Health Sciences, Interdisciplinary Center on Aging (CIE), Universidad de Talca, Talca, Chile. ²Department of Biochemistry, Faculty of Medicine, University of the Republic, Montevideo, Uruguay. ³Department of Horticulture, Faculty of Agronomy, Universidad de Talca, Talca, Chile.

lyannerodriguez89@gmail.com

Las plaquetas juegan un papel importante en la hemostasia, trombosis e inflamación. Su participación en la trombosis está especialmente asociada a las enfermedades cardiovasculares (ECV). Se ha observado que algunos ingredientes bioactivos de frutas y verduras que se consumen habitualmente pueden inhibir la activación plaquetaria y por tanto reducir el riesgo de ECV. *Aristotelia chilensis* (Mol.) Stuntz, también conocida como maqui, es una planta de la familia Elaeocarpaceae que crece en el centro y sur de Chile. Esta baya tiene un alto poder antioxidante asociado a su alto contenido en polifenoles.

Aunque esta especie ha sido ampliamente estudiada por sus propiedades farmacológicas, hasta la fecha no hay informes de estudios relacionados con la actividad antiplaquetaria. Se estudió el potencial antiplaquetario extractos acuosos, etanólicos y metanólicos obtenidos de clones de maqui: Luna Nueva, Morena y Perla Negra, propiedad de la Universidad de Talca. Se realizó la cuantificación de los compuestos fenólicos y antocianinas de los extractos elaborados. Mientras que la agregación plaquetaria se evaluó por turbidimetría y los estudios de activación y secreción plaquetaria por citometría de flujo.

Los extractos acuosos y etanólicos de las hojas y frutos inmaduros de Luna Nueva y Morena mostraron mayor contenido de compuestos fenólicos que se correlacionó con una mayor actividad antiplaquetaria estimulada por ADP, colágeno y PMA. Por otro lado, los extractos metanólicos obtenidos de los frutos de maqui mostraron un mayor contenido de antocianinas y mayor potencial antiplaquetario. Este trabajo es la primera evidencia de actividad antiplaquetaria evaluada en *A. chilensis*. Adicionalmente, solo el fruto maduro se utiliza en la industria nutracéutica, por lo que la evaluación de las hojas y frutos inmaduros le brinda un valor agregado a esta especie, aumentando así el interés por las plantas nativas con propiedades biológicas.

Referencias:

1. World Medical Association Declaration of Helsinki: ethical principles for medical research involving human subjects. *Jama*. 2013;310(20):2191-4. 2.
2. Benjamin EJ, Blaha MJ, Chiuve SE, Cushman M, Das SR, Deo R, et al. Heart disease and stroke statistics—2017 update: a report from the American Heart Association. *Circulation*. 2017;135(10):e146-e603.
3. Vogel H, González B, Catenacci G, Doll U. Domestication and sustainable production of wild crafted plants with special reference to the Chilean maqui berry (*Aristotelia chilensis*). *Julius Kühn-Archiv*. 2016(453):50-2.
4. Fuentes E, Fuentes M, Caballero J, Palomo I, Hinz S, El-Tayeb A, et al. Adenosine A2A receptor agonists with potent antiplatelet activity. *Platelets*. 2018;29(3):292-300.



ANÁLISIS METABÓLICO DE CACAOS ESPECIALES EN MUESTRAS PROVENIENTES DE MACEO (ANTIOQUIA) Y MANAURE (CESAR) ASOCIADO CON PROPIEDADES ORGANOLÉPTICAS Y FÍSICO-QUÍMICAS.

Paula Victoria Bacca Villota, William Fernando Hidalgo Bucheli.

Universidad Industrial de Santander UIS

paulabv89@hotmail.com

Palabras clave: Metabolómica, Cacaos especiales, LC-MS.

Colombia es un país con un alto potencial de exportación de cacao considerando su ubicación geográfica y la variabilidad genética de los clones de cacao. Estas condiciones han llevado a catalogar el cacao colombiano como “fino y de aroma”, categoría que solo recibe el 5% del cacao mundial.¹

Cuarenta muestras de cacao provenientes de Manaure y Maceo (Colombia) fueron utilizadas en la investigación. Las muestras fueron sometidas a extracción en fase sólida y posterior análisis por UHPLC-ESI-Orbitrap-MS, análisis estadístico uni- y multivariado e identificación (tentativa) y cuantificación de los metabolitos de interés presentes en las muestras de cacao.²

El análisis estadístico permitió establecer que la condición óptima de extracción fue aquella en la que se utilizó acetonitrilo (50% v/v) 35°C y 20 minutos. Con base en las pruebas sensoriales y físico-químicas, 30 de las 40 muestras de cacao analizadas, se clasificaron como cacaos especiales con un nivel de calidad alto. El análisis por LC-MS permitió la identificación tentativa de trece metabolitos característicos presentes en la mayoría de las muestras de cacao, entre los que se encuentran cafeína y teobromina. Los resultados fueron analizados mediante modelos estadísticos basados en métodos no supervisados (PCA) y supervisados (OPLS-DA)³, los cuales, se encuentran actualmente en progreso para determinar la relación existente entre los perfiles metabólicos de las muestras de cacao con sus correspondientes parámetros de calidad.

Referencias:

1. Danezis, G. P.; Tsagkaris, A. S.; Brusic, V.; Georgiou, C. A. Food Authentication: State of the Art and Prospects. *Curr. Opin. Food Sci.* **2016**, *10*, 22–31. <https://doi.org/10.1016/j.cofs.2016.07.003>.
2. Mayorga-Gross, A. L.; Quirós-Guerrero, L. M.; Fourny, G.; Vaillant, F. An Untargeted Metabolomic Assessment of Cocoa Beans during Fermentation. *Food Res. Int.* **2016**, *89*, 901–909. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2016.04.017>.
3. Hori, K.; Kiriya, T.; Tsumura, K. A Liquid Chromatography Time-of-Flight Mass Spectrometry-Based Metabolomics Approach for the Discrimination of Cocoa Beans from Different Growing Regions. *Food Anal. Methods* **2016**, *9* (3), 738–743. <https://doi.org/10.1007/s12161-015-0245-0>.



CLARIFICACIÓN DEL JUGO DE MARAÑÓN (*Anacardum occidentale* L.) UTILIZANDO CARBÓN ACTIVADO OBTENIDO DE LA CÁSCARA DEL FRUTO, Y DETERMINACIÓN DE TANINOS

Carrillo, Á. Jason X.¹; Arrazola, P. Guillermo S.¹; Alvis, B. Armando¹.

¹Universidad de Córdoba, Facultad de Ingenierías, Programa de Ingeniería de Alimentos. GIPAVE, Montería – Colombia

jcarrilloalvarez@correo.unicordoba.edu.co

Palabras clave: marañón, carbón activado, taninos.

Introducción: El marañón (*Anacardum occidentale* L.) es tendencia entre los investigadores, gracias a su riqueza de compuestos que le han hecho participe de la industria médica, cosmética y confitera. Donde la obtención del carbón activado y su misma reducción de taninos por dicho medio, representa un realce a su importancia industrial.

Metodología: La obtención del carbón activado se llevó a cabo en función al método planteado por Arrazola et al., 2013, y con la posterior adición de gelatina neutra se logró la clarificación del jugo y la separación de los taninos presentes en la matriz líquida.

Resultados y conclusiones: Se obtuvo el carbón activado a partir de los residuos de la cáscara del marañón; el cual se aplicó para la clarificación inicial del jugo resultante del pseudofruto, para la posterior adición de la gelatina neutra que facilitó la separación y absorción de los taninos contenidos en el jugo. Esto contribuyó en la optimización de las características sensoriales del jugo, gracias a la reducción del atributo de astringencia, resultando en un producto aceptable para el consumo y su comercialización. Soportando de manera práctica la obtención del carbón activado a partir de la cáscara del marañón, y sus resultados positivos en la determinación y reducción de los taninos presentes en el jugo del pseudofruto del marañón.

Referencias:

1. Arrazola P, G., Alvis B, A., & Osorio M, J. (2013) Clarificación combinada y evaluación sensorial de jugo de marañón (*Anacardum occidentale* L.). Revista MVZ. Córdoba, 18 (sulp), 3722-3730. <http://doi.org/10.21897/rmvz.140>
2. Marcilla G, Antonio. (1982). Carbón activado a partir de cáscara de almendra: estudio del proceso de activación mediante cloruro de zinc. Repositorio Institucional de la Universidad de Alicante. URI: <http://hdl.handle.net/10045/3697>



DETERMINACIÓN DE ÁCIDO ANACÁRDICO MEDIANTE HPLC Y CARACTERIZACIÓN FÍSICOQUÍMICA-BROMATOLÓGICAS EN LA CÁSCARA DE LA SEMILLA DEL MARAÑÓN (*Anacardium occidentale* L)

Arrazola, P. Guillermo S¹., Lara Maria Jose¹, Alvis B. Armando¹.

¹Universidad de Córdoba, Facultad de Ingenierías, Programa de Ingeniería de Alimentos. Grupo GIPAVE Montería, Colombia.

gsarrazola@correo.unicordoba.edu.co

Palabra clave: cáscara marañón, ácido anacárdico, HPLC.

Introducción: La cascara de la nuez del Marañón (*Anacardium occidentale* L.) es considerada un desecho en la región productora de Córdoba, en búsqueda de darle un aprovechamiento se extrae el ácido anacárdico, el cual constituye el 90% del (Cashew Nut Shell Liquid CNSL- ácido anacárdico), quien es utilizado en la industria farmacéutica, química, agroalimentaria. El contenido de ácidos anacárdicos es prominente en la cáscara del fruto, concentraciones menores se registran en la nuez y falso fruto. En la nuez se ha determinado el contenido de siete ácidos 31 anacárdicos como son; Cardol trieno (63.9 mg), cardol dieno (45.8 mg), cardol monoeno (8.5 mg), 2-metilcardol trieno (29.9 mg), 2-metilcardol dieno (11.0 mg), trieno del ácido anacárdico (8.9 mg) y (4.1 mg) dieno del ácido anacárdico). (Gimenez et al., 2019; AlvesFilho et al., 2019).

Método: A partir de las cáscaras de la nuez del marañón se obtuvo el CNSL el cual se identificó y cuantificó utilizando una extracción en hexano y posterior un sistema de cromatografía Accela HPLC-DAD (acetonitrilo agua 80: 20, columna hypersil gold C-18 50 mm x2.1 mm, $\lambda= 210$ nm).

Resultados y discusión: Los resultados obtenidos muestran entre otros los siguientes compuestos: En la nuez se ha determinado el contenido de algunos ácidos anacárdicos como son; Cardol dieno (25.6 mg), 2- metilcardol trieno (12.1 mg), 2-metilcardol dieno (11.0 mg), trieno del ácido anacárdico (8.9 mg) y (4.1 mg) dieno del ácido anacárdico, muy parecido a resultados obtenidos por Giménez et al, 2019; Alves et al, 2019.

Referencias:

1. Gimenez, V. M. M., Alvarenga, T. A., Groppo, M., Silva, M. L. A. e., Cunha, W. R., Januário, A. H., Smilkstein, M. J., Riscoe, M. K., & Pauletti, P. M. (2019). Antiplasmodial evaluation of *Anacardium occidentale* and alkyl phenols. *Rev Bras Farmacogn* 29(1), 36–39.



SLKCL-590

Producción de ciclodextrinas a partir de almidón de yuca y mucílago de cacao.

María Fernanda Mercado Villamizar, Julio Roberto Pinzón Joya.

Universidad Industrial de Santander

maria.mercado@correo.uis.edu.co

Palabras Clave: Ciclodextrinas, oligosacáridos, mucílago, cacao.

Las ciclodextrinas (CDs) son oligosacáridos cíclicos producidos por la síntesis enzimática selectiva entre la enzima ciclodextrin glucosil transferasa (CGTasa) y el almidón. CDs. La síntesis de CDs se realizó partiendo de 1,0 g/mL de solución de mucílago y 3000U/g de CGTasa, obteniendo 0,6301 mg/mL, aprovechando así parte del residuo orgánico. Espectroscopia UV-Vis, MS-MALDI-TOF, cinética enzimática, síntesis por acción enzimática, diseño experimental. Es posible obtener CDs a partir del exudado del mucílago del cacao. Esto ocurre gracias a los enlaces glucosídicos α -1,4 presentes en los oligosacáridos del exudado. El extracto obtenido puede ser utilizado como edulcorante en el proceso de producción de chocolate. Además, la presencia de CDs en la solución de mucílago podría brindar propiedades para prolongar la preservación del aroma y sabor de los chocolates.

Referencias:

1. Crini G. Review: A History of Cyclodextrins. *Chem. Rev.* 2014, 114, 21, 10940–10975.
2. Koh D-W, Park M-O, Choi S-W, Lee B-H, Yoo S-H. Efficient Biocatalytic Production of Cyclodextrins by Combined Action of Amylosucrase and Cyclodextrin Glucanotransferase. *J. Agric. Food Chem.* 2016, 64, 21, 4371–4375.
3. Makela, M. J., Korpela, T. K., Puisto, J., and Laakso, S. V. (1988). Nonchromatographic cyclodextrin assays: evaluation of sensitivity, specificity, and conversion mixture applications. *J. Agric. Food Chem.* 1988, 36, 1, 83–88.



Alteraciones metabólicas e índices aterogénicos en población colombiana entre 40 y 70 años de edad

Martha Nancy Calderón Ozuna, Ginneth Lorena Riaño Ayala, Claudia Lorena Cruz Hernandez, Haiver Antonio Rodríguez Navarro, Julieth Daniela Buell Acosta, Luz Helena Aranzalez Ramirez.

UNIVERSIDAD NACIONAL DE COLOMBIA

mncalderono@unal.edu.co

Palabras Claves: Metabolismo, índices aterogénicos, FINDRISG.

Se ha reportado un aumento a nivel mundial en la prevalencia de obesidad y diabetes mellitus tipo 2 (DM2). Un deficiente manejo de estas enfermedades conlleva al desarrollo de complicaciones del sistema endotelial. Avanzar en el estudio de biomarcadores pronóstico, diagnóstico y seguimiento es vital para limitar las complicaciones. Se enrolaron más de 500 voluntarios colombianos entre 40 y 70 años, se realizó una encuesta de ingesta de alimentos y sociodemográfica, análisis metabólicos, el cuestionario FINDRISG y medidas antropométricas. Se indagó por el consumo de fármacos como antihipertensivos, y antibióticos; también el antecedente familiar de enfermedad metabólica.

Se determinó que el 70% de la población participante tiende a estar en sobrepeso u obesidad (358 voluntarios de 514); se observaron condiciones de hipertensión (30%) y alteración del metabolismo de los carbohidratos (18%). Asociado con dislipidemias, se encontró que el 55% de la población sobrepasa el valor fisiológico referencial, además de colesterol total mayor a 200mg/dL. En la clasificación socioeconómica, el 90% de los voluntarios pertenecen al estrato social 3 o menor, con un 10 % de desempleo; esta situación puede aumentar el riesgo metabólico dado el menor acceso al sistema de salud y/o medicamentos. Cada voluntario recibió los resultados de los análisis bioquímicos, además del porcentaje de riesgo a sufrir DM2 en un lapso de 10 años. Se hicieron las recomendaciones de cambios en el estilo de vida y la sugerencia de acudir a la EPS para iniciar procesos de intervención médica, acompañamiento nutricional y de actividad física.

Referencias:

1. Sinisterra-Loaiza L, Cardelle-Cobas A, Abraham AG, Calderon MN, et al. (2019) Diabetes in Latin America: Prevalence, Complications, and Socio-Economic Impact. *Int J Diabetes Clin Res* 6:112. Tangvarasittichai, S. (2015) Oxidative Stress, Insulin Resistance, Dyslipidemia and DM2. *World Journal of Diabetes* 6 (3): 456–80.
2. Guilherme A., Virbasius JV, Puri V, Czech, M. (2008) Adipocyte disfunctions linking obesity to insulin resistance and DM2. *Nat Rev Mol Cell Biol*; 9(5): 367-377.
3. WHO, 2019. Informe mundial DM2. FactSheet No.382. WHO. Geneva.
4. Buendía, R., Zambrano, M., Díaz, A., Reino, A., Ramírez, J., Espinosa, Elsa. (2016). Obesidad abdominal en población colombiana. *Revista Colombiana Cardiología*, 23(1), 19-25.



DETERMINACIÓN DE LOS COMPONENTES QUÍMICOS PRINCIPALES DE LA BIOMASA LIGNOCELULÓSICA DERIVADA DE LA CÁSCARA DE CACAO DE THEOBROMA CACAO L. VAR. CARMELO.

Holber Zuleta-Prada¹, Edna Elena Suárez Patlán¹.

¹Laboratorio de Productos Naturales, AP 74 Oficina de Correos Chapingo, Universidad Autónoma Chapingo. Km. 38.5 Carretera México-Textcoco. Textcoco, Estado de México, 56230.

hozuleta_13@hotmail.com

INTRODUCCIÓN: Algunos residuos de la industria agroalimentaria han sido materia prima para la obtención de biocombustibles, biomateriales y moléculas plataforma¹. La caracterización química de biomasa lignocelulósica de las cáscaras de Cacao (Theobroma cacao. var. Carmelo), ofrece información que proyecta este material; como fuente potencial de productos químicos de alto valor.

MÉTODOS: La composición química de la cáscara de cacao, fue determinada por métodos analíticos convencionales basados en las normas "TAPPI". Para el material seco, molido y sin extraíbles (T204 cm), se uso el protocolo ASTM D 103-77 para celulosa, T222 om-02 para lignina, T211 om-02 en cenizas y Hemicelulosa por diferencia de peso².

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Los extraíbles totales obtenidos de la cascara de cacao en disolventes de distinta polaridad como: hexano, diclorometano y metanol, fueron de $21.04\% \pm 1.35\%$. El contenido de lignina de $23,96\% \pm 0.2\%$. Por otro lado, el contenido de celulosa fue de $30.52\% \pm 0.02\%$. Además, el contenido de hemicelulosas fue de $19.09\% \pm 1.4\%$.

Finalmente, el contenido de cenizas fue de $7.75\% \pm 0.1\%$. La mayoría de los datos obtenidos en este trabajo coinciden en rangos de porcentaje con los reportados en la literatura para variedades similares³. Las pequeñas diferencias en los datos reportados por otros autores, respecto a los componentes de cáscara de cacao, podrían ser atribuidas a la materia prima de estudio, debido a que esta variedad no tiene estudios de composición química en cascara. Lo anterior, indica que la variedad cacao Carmelo cultivada en Tabasco México, contiene propiedades clave para la obtención de compuestos de alto valor.

REFERENCIAS:

1. Campos-Vega, R.; Nieto-Figueroa, K. H.; Oomah, B. D. Trends in Food Science & Technology **2018**, 81, 172–184.
2. Titiloye, J. O.; Abu Bakar, M. S.; Odetoeye, T. E. Industrial Crops and Products **2013**, 47, 199–203
3. Sandesh, K.; Shishir, R. K.; Vaman Rao, C. Fuel **2020**, 262, 116499.



Potencial aprovechamiento de Guanábana de monte (*Annona montana* Macfad), bajo la óptica de los ODS.

Marly Bustamante Correa¹, Fabián Parada Alfonso¹, Oscar Eduardo Suarez Moreno², Mary del Carmen Lares Amaiz³

¹Grupo de Investigación en Química de los Alimentos (GiQA), Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia. ²Universidad Nacional de Colombia sede Orinoquia, Arauca, Colombia. ³Universidad Central de Venezuela, Caracas, Venezuela.

mabustamantec@unal.edu.co

Palabras claves: actividad antioxidante, *A. montana*, alimento funcional.

La familia Annonaceae presenta diversos compuestos asociados con actividad antioxidante-AA y otras bioactividades de importancia farmacológica, se han reportado alcaloides, flavonoides y acetogeninas^{1,3}. Los frutos del genero *Annona* tienen agradable sabor y alto contenido de pulpa, siendo atractivos para preparar productos alimentarios^{4,5}. Las hojas, pulpa, epicarpio y semillas del fruto, por separado, se sometieron a extracción por maceración con EtOH, y las semillas a extracción Soxhlet con hexano. Los extractos obtenidos se sometieron a ensayo preliminar de AA en CCD por DPPH. Por otra parte, con pulpa de *A. montana* y de *A. muricata* (guanábana común) se elaboraron helados cremosos para una prueba de degustación comparativa (en la que participaron 60 personas). Como resultados: (i) Se obtuvo aceite de las semillas con rendimientos del 6% y 22%, con EtOH y hexano, respectivamente, (ii) el ensayo de AA dio positivo para compuestos polares y de mediana polaridad presentes en los extractos, resultado concordante con lo reportado en literatura y (iii) el helado hecho con pulpa de *A. montana* presentó una aceptación del 62%, ligeramente inferior al helado de *A. muricata* (93%), los parámetros de color, olor y sabor del helado a base de *A. montana* y *A. muricata* obtuvieron calificaciones de 4/5 y 5/5, respectivamente; el 53% de los encuestados conoce la fruta y solo el 27% conocen un uso, sin embargo el 82% de los encuestados consumirían esta fruta en diferentes preparaciones. Como resultado de este trabajo se obtuvieron extractos de *A. montana* con actividad antioxidante y se propone un potencial aprovechamiento para esta fruta; por tanto, su empleo con fines alimentarios y la AA que presentó, permiten suponer el carácter de alimento funcional a esta fruta, lo que puede estimular su consumo.

Referencias:

- Galvis, J.; Ocampo, D.; Ocampo, R.; Gutierrez, P. Bol. Cient. Mus. Hist. Nat. **2012**, 16(2), 17-22.
- Cortes, D.; Moreno, L.; Parraga, J.; Galan, A.; Cabedo, N. Rev. Bras. Frutic. **2014**, 36, 22-31.
- Correa, J.; Ortiz, D.; Larrahondo, J. Sanchez, M.; Pachon, H. BLACPM. **2012**, 11(2), 111 – 126.
- Jimenez, J.; Balois, R.; Alia, I.; Juarez, P.; Jimenez, E.; Sumaya, M.; Bello, J. Rev. Mex. Cienc. Agríc. **2017**, 8(5), 1155- 1167.
- Arazola, G.; Barrera, J.; Villalba, M. ORINOQUIA - Universidad de los Llanos. **2013**, 17(2), 159-166.



POTENCIAL APROVECHAMIENTO DE LA CASCARILLA DE CACAO (*Theobroma cacao* L.) EMPLEANDO AGUA SUBCRÍTICA

Juan Sebastián Ortiz Ramírez, Natalia Casas Mesa, Fabián Parada Alfonso, Liliam Alexandra Palomeque Forero.

Grupo de Investigación en Química de Alimentos (GiQA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C.-Colombia.

jusortizra@unal.edu.co

Palabras clave: Cacao, *Theobroma cacao*, Objetivos de desarrollo sostenible, Agua subcrítica.

Resumen: Anualmente, en Colombia, se producen alrededor de 100.000 ton de cascarilla de cacao como residuo [1], lo cual representa un problema para la industria y el medio ambiente; sin embargo, este subproducto posee un alto potencial por su contenido de biocomponentes antioxidantes. Bajo el marco de los Objetivos de Desarrollo Sostenible-ODS, empleando extracción con agua subcrítica-ExtH₂O_{subc} en continuo (técnica de extracción ambientalmente amigable), se obtuvieron extractos ricos en componentes fenólicos, los cuales presentaron actividad antioxidante.

Métodos: Se realizó estudio cinético de la ExtH₂O_{subc} de la cascarilla de cacao a 100 bar de presión y variando la temperatura (entre 100 y 200 °C). A los extractos obtenidos se les determinó el contenido total de componentes fenólicos (TPC), el contenido total de flavonoides (TFC) y la actividad antioxidante por DPPH.

Resultados y conclusiones: Para 5 g de muestra se determinó un tiempo de extracción de 2 horas con un rendimiento de 31,4% (%p/p). Para los extractos óptimos se obtuvo un TPC de 89,69 mg ácido gálico equivalente (GAE)/ g extracto un TFC de 0,28 mg de quercitina equivalente (QE)/100 g de muestra y una actividad antioxidante por concentración de eficiencia (EC₅₀) de 58,89 µg/mL. Un aumento en la temperatura de extracción provocó un mayor rendimiento de extracción y un mayor TPC y una mayor actividad antioxidante; mientras que el TFC no varía significativamente con la temperatura. Para seleccionar la técnica de extracción es necesario saber cuál o cuáles son mis compuestos de interés, la ExtH₂O_{subc} en continuo posee un gran potencial para extraer compuestos con actividad antioxidante con una alta polaridad. Este trabajo pretende continuar la investigación hecha por Buelvas y Franco [2] y a futuro se espera ser estudiada con otros solventes a alta presión tanto en continuo como en lotes.

Referencias:

1. ICCO, "Production of cocoa beans", Q. Bull. Cocoa Stat., vol. XLVII, núm. 1, p. 1, 2021, [En línea]. Disponible en: https://www.icco.org/wp-content/uploads/Production_QBCS-XLVII-No.-1.pdf.
2. L. M. Buelvas Puello y G. Franco Arnedo, "EVALUACIÓN TÉCNICA Y ECONÓMICA DE LA EXTRACCIÓN DE ANTIOXIDANTES A PARTIR DE LA CÁSCARA DE LA SEMILLA DEL CACAO (*Theobroma cacao* L.) UTILIZANDO CO₂ SUPERCRÍTICO", Universidad de Cartagena, 2015.



QUÍMICA DE MATERIALES, POLÍMEROS Y NANOTECNOLOGÍA

ILGCL-463

SYNTHESIS AND PHYSICOCHEMICAL CHARACTERIZATION OF CHITOSAN/HEPARIN-CROSSLINKED POLYURETHANES FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS

Yomaira Lisnedy Uscategui Maldonado, Luis Eduardo Díaz Barrera, Manuel Fernando Valero Valdivieso, Ericsson Coy-Barrera

Universidad Militar Nueva Granada - Universidad de La Sabana

yomairausma@gmail.com

Palabras claves: polyurethanes, heparin, chitosan, biomaterials

Introducción: Applications of polyurethanes (PU) depends on several physicochemical factors due to the presence and proportions of varied moieties (polyols, isocyanates, chain extenders, processing conditions). The aim of the present study was oriented to synthesize chitosan/heparin-inserted PU to examine the effect of additions on mechanical and thermal properties of resulting polymers.

Métodos: PU were synthesized from castor oil and isophorone diisocyanate through the pre-polymer method at a constant NCO:OH ratio (1:1), adding chitosan and heparin. The resulting materials were characterized by Fourier-transform infrared spectroscopy, stress-strain (ASTM D638-10), contact angle by sessile drop method, thermogravimetric analysis (ASTM D6370), and differential scanning calorimetry.

Resultados y conclusiones: Functional groups of the resulting polymers were evaluated and determined to be PU by means of FTIR analysis. The mechanical properties presented maximum stress values ca. 1.00 MPa and the effect of the addition of chitosan and heparin tends to decrease these values by 30%. The materials exhibited elongation percentages ca. 80% and the additive effect reduced this percentage by 10%. The degradation in PBS after 90 days presented percentages lower than 1%. Chitosan and heparin additions increased the material degradation percentage. The water absorption percentage showed values ca. 1.00% after 12 days. Chitosan and heparin addition tended to increase water absorption. Synthesized materials exhibited contact angles between 90-100 degrees indicating a hydrophobic nature. The good mechanical properties of the synthesized PU, such as flexibility, maximum stress and Young's modulus values, were found to be within the optimal range for the biomaterial design to myocardial or vascular tissue engineering.^{2,3}

Referencias:

1. Javaid, M.A.; Khera, R.A.; Zia, K.M.; Saito, K.; Bhatti, I.A.; Asghar, M. Synthesis and Characterization of Chitosan Modified Polyurethane Bio-Nanocomposites with Biomedical Potential. *Int. J. Biol. Macromol.* **2018**, *115*, 375–384. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2018.04.013>.
2. Zhu, J.; Chen, D.; Du, J.; Chen, X.; Wang, J.; Zhang, H.; Chen, S.; Wu, J.; Zhu, T.; Mo, X. Mechanical Matching Nanofibrous Vascular Scaffold with Effective Anticoagulation for Vascular Tissue Engineering. *Compos. Part B Eng.* **2020**, *186*(2999), 107788. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2020.107788>.
3. Reis, L.A.; Chiu, L.L.Y.; Feric, N.; Fu, L.; Radisic, M. Biomaterials in Myocardial Tissue Engineering. *J. Tissue Eng. Regen. Med.* **2016**, *10*(1), 11–28. <https://doi.org/10.1002/term.1944>.



Conjugation with biomolecules of poly(ethylene glycol)-block-poly(e-caprolactone) based as nanocarriers for curcumin delivery and performance.

Vivian Angarita-Villamizar, Adriana Umaña-Perez, Cesar Sierra, Leon D Perez.

Universidad Nacional de Colombia

aeangaritav@unal.edu.co

key-words: Curcumin, Polymer micelles, drug delivery, breast cancer.

Introduction Curcumin is a natural substance with beneficial pharmaceutical properties such as anticancer activity against several cellular lines. However, it presents poor bioavailability due to its solubility in aqueous media. In this research we encapsulated curcumin in polymeric micelles obtained by self assembly of a biodegradable copolymer conjugated with biomolecules.

Methodology: Biodegradable and biocompatible poly-(ethylene glycol)-block-poly(e-caprolactone) copolymer was synthesized. The hydroxyl-terminated polymer was reacted with cholesteryl chloroformate or oleyl chloride to obtain conjugated copolymers. The resulting materials were characterized through ¹H RMN, GPC and DSC. The CMC was measured through fluorescence spectroscopy. The nanoparticles size was characterized by DLS and TEM.

Results

Poly(ethylene glycol)-block-poly(e-caprolactone) copolymer were synthesized via ROP and successfully modified with biomolecules. The nanoparticles demonstrated an improved encapsulation capacity of curcumin and a controlled release kinetics, specially the structures obtained through the conjugation of mPEG-b-PCL with cholesterol and oleic acid resulting the loading capacities of 8.8% and 15.2% respectively. The materials showed an increased release rate, whereas cholesterol did not significantly differ from raw mPEG-b-PCL. Micellar formulations presented particle diameters in the range of 134 to 260 nm, and the highest particle diameter was observed in conjugation with cholesterol. Cell viability studies indicated that encapsulated curcumin maintained its activity against MCF-7 human breast cancer cells but elicited low toxicity to L929 mouse fibroblasts. The mPEG-b PCL conjugated with oleic acid was the most suitable material for the preparation of anticancer nanostructured formulations based on Curcumin for breast cancer treatment.

Bibliography

1. Maheshwari RK, Singh AK, Gaddipati J, et al. Multiple biological activities of curcumin: a short review. *Life Sci* 2006; 78:2081-2081.
2. Allegra A, Innao V, Russo S, et al. Anticancer activity of curcumin and its analogues: preclinical and clinical studies. *Cancer Invest* 2017;35:1-22
3. Li HY, Zhang B, Chan PS, et al. Convergent synthesis and characterization of fatty acid conjugated poly(ethylene glycol)-block (epsilon-caprolactone) nanoparticles for improved drug delivery to the brain. *Europ Polym J* 2018; 98: 394-401.



N-HETEROCYCLIC CARBENE BASED Ru/Ir NANOPARTICLES FOR THE DEUTERATION OF ORGANIC MOLECULES THROUGH C-H BOND ACTIVATION

Alejandra Zuluaga-Villamil,^{1,2} Gabriel Mencia,² Pierre F. Fazzini,² Bruno Chaudret,^{2*}
and Edwin A. Baquero^{1*}

¹ Estado Sólido y Catálisis Ambiental (ESCA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá. Carrera 30 No. 45-03, 111321, Bogotá, Colombia.

² LPCNO, Laboratoire de Physique et Chimie des Nano-Objets, INSA, CNRS, UPS, Université de Toulouse, 135, Avenue de Rangueil, F-31077 Toulouse, France

Corresponding Authors : chaudret@insa-toulouse.fr (BC), eabaquero@unal.edu.co (EAB)

KEY WORDS: NHC, Nanocatalysis, HIE, Ruthenium-Iridium

INTRODUCTION

H/D isotopic exchange reaction (HIE) through C-H bond activation has grown in the last years as an important tool in the functionalization of hydrocarbons.[1] Recent results show that metallic nanoparticles (MNPs) are efficient nanocatalysts for the deuteration of organic molecules.[1] However, bimetallic nanoparticles as nanocatalysts still remains a challenge.

MATERIALS AND METHODOLOGY

Here we present the synthesis of bimetallic Ru/IrNPs as nanocatalysts stabilized by N-Heterocyclic Carbenes (NHC) for the deuteration of nitrogen-derivatives compounds. MNPs were characterized by state-of-the-art techniques such as TEM, HR-TEM, ATR-IR, XRD, and solid-state NMR. Catalytic experiments were performed using 2-phenylpyridine, 2-methylnaphthylamine, 5,6,7, 8-tetrahydro-naphthylamine, L-lysine and L-phenylalanine as substrates.

RESULTS AND CONCLUSIONS

These NPs were dispersible in both organic and aqueous media thanks to the tunability of the stabilizing NHC ligands. Ru/IrNPs showed an alloy behavior based on HR-TEM/EDX studies. These MNPs presented high activity and unexpected selectivities in HIE reactions, since not only the common positions of phenylpyridine (C-6 and ortho position of the phenyl ring) were deuterated, but also more distant positions such as C-3, C-4 and C-5 of pyridine moiety. On the other hand, C-9 position of 2-methyl-naphthylamine and 5,6,7,8-tetrahydro-naphthylamine and α and ϵ to the amino acid group of L-lysine were completely deuterated, while reduction of the aromatic ring in L-phenylalanine was observed. These results suggest a synergic effect of both metals in Ru/IrNPs. Additionally, a remarkable ligand effect caused by NHC stabilizers of the MNPs will be discussed. This work paves the way to further investigation of bimetallic NPs in HIE reactions through C-H Bond Activation.

REFERENCES

[1] M. Lepron, M. Daniel-Bertrand, G. Mencia, B. Chaudret, S. Feuillastre, G. Pieters, *Acc. Chem. Res.*, 2021, 54, 1465-1480.



LÍQUIDOS IÓNICOS EN LA PREPARACIÓN DE MATERIALES BASADOS EN BIOPOLÍMEROS

Santiago Urbano Narváez, Diana María Chito

Universidad del Cauca

santiagou@unicauca.edu.co

Palabras clave: Biomateriales, solventes moleculares, conversión de biomasa, biocompatibilidad.

Introducción: La insolubilidad de los biopolímeros (BPs) en la mayoría de solventes orgánicos convencionales (SCs) ha limitado el ámbito de aplicación de los materiales basados en biopolímeros (MBPs). Los líquidos iónicos (LIs) han mostrado un verdadero potencial para incrementar la solubilidad de los BPs y mejorar aspectos metodológicos en su obtención.

Métodos: Se realizó la búsqueda y revisión sistematizada de publicaciones recientes (n=70 de los últimos 10 años) sobre los avances metodológicos de la implementación de líquidos iónicos en la preparación de materiales basados en biopolímeros (polisacáridos y proteínas), respecto a criterios metodológicos, promoción de recuperación y reutilización del solvente.

Resultados y Conclusiones: La preparación de MBPs por disolución en LIs se reporta como una metodología prometedora para el desarrollo de materiales con múltiples aplicaciones. Se identificaron las limitaciones del proceso de disolución de BPs; se presentan algunas metodologías de preparación de MBPs bajo el enfoque de la química verde. La disolución de BPs en LIs promueve la obtención de MBPs debido a la versatilidad de los LIs como solventes de diseño y su adaptabilidad a técnicas emergentes que posibilitan mayores porcentajes de disolución de BPs y su potencial uso a mayor escala. Los LIs promueven la implementación de una metodología de preparación sostenible de MBPs a partir de su reutilización y recuperación, demostrando la viabilidad de la metodología en la obtención de materiales para múltiples aplicaciones.

Referencias

1. Canaval, E.; Hyttinen, N.; Schmidbauer, B.; Fischer, L.; Hansel, A., NH₄⁺ association and proton transfer reactions with a series of organic molecules. *Frontiers in chemistry* 2019, 7, 191.
2. Kostag, M.; Jedvert, K.; Achtel, C.; Heinze, T.; El Seoud, O. A., Recent Advances in Solvents for the Dissolution, Shaping and Derivatization of Cellulose: Quaternary Ammonium Electrolytes and their Solutions in Water and Molecular Solvents. *Molecules* 2018, 23 (3), 511.
3. Peng, H.; Dai, G.; Wang, S.; Xu, H., The evolution behavior and dissolution mechanism of cellulose in aqueous solvent. *Journal of Molecular Liquids* 2017, 241, 959-966.

DESARROLLO DE NANOTRANSPORTADORES METÁLICOS BASADOS EN Ag⁺ DE DERIVADOS DE ESTEROLES: SÍNTESIS Y EVALUACIÓN DE LA CAPACIDAD DE CARGA.

Jhoban Steban Meneses Rengifo

Universidad del Valle, Cauca, Colombia

jhoban.steban.meneses@correounivalle.edu.co

Palabras clave: Nanotransportadores, esteroides, colesterol, beta-sitosterol.

Introducción Los nanotransportadores inorgánicos son nanopartículas constituidas por un núcleo, generalmente, de base orgánica (polímeros) o inorgánica (metales), capaces de soportar en su superficie agentes bioactivos como medicamentos, para así, transportarlos y liberarlos en un medio de interés. Por lo general, las nanopartículas con núcleos metálicos, presentan mayor interés debido a que exhiben tanto los efectos del fármaco que transporta como las propiedades del núcleo metálico, un ejemplo son las nanopartículas de plata que tienen efectos antibacterianos. Por lo tanto, la combinación de las nanopartículas de plata con agentes bioactivos, surge como una alternativa para la obtención de nuevos sistemas nanoparticulados multifuncionales, con actividad antibacteriana y efectos terapéuticos inherentes al medicamento transportado, que además mejoren su sitio especificidad y module su liberación. Por este motivo, en el presente trabajo se realizó la síntesis de nanopartículas de plata estabilizadas con citrato de sodio, polivinilpirrolidona y N-Metil-D-glucamina, las cuales se cargaron con colesterol y beta-sitosterol, moléculas que tienen en su estructura un anillo esteroidal, similar al de algunas hormonas y medicamentos implicadas en las actividades biológicas del ser humano. Adicionalmente, se determinaron las capacidades de las nanopartículas para cargar los derivados, y como esta cantidad influye en las estabilidades de los coloides.

Métodos La síntesis de las nanopartículas de plata estabilizadas con citrato de sodio, polivinilpirrolidona y N-Metil-D-glucamina se realizaron mediante reducción química de una sal de plata y la posterior transferencia a una fase de cloroformo donde se cargaron con colesterol y beta-sitosterol. Las nanopartículas se caracterizaron por espectroscopía infrarroja para identificar los grupos funcionales de los agentes estabilizantes y los derivados del esteroide, espectroscopia ultravioleta- visible para confirmar la formación de nanopartículas de plata mediante la señal de resonancia de plasmón superficial y la dispersión dinámica de luz para medir los tamaños de las nanopartículas. La capacidad de estas para cargar los esteroides, se realizó a partir del análisis termogravimétrico, variando las concentraciones del derivado y posteriormente determinando las cantidades que se cargaron en las nanopartículas.

Resultados y conclusiones: A partir de los resultados obtenidos se determinó que las nanopartículas con núcleos de plata estabilizadas con citrato, polivinilpirrolidona y N-Metil-D glucamina, pueden ser cargadas con derivados de los esteroides como colesterol y beta-sitosterol. Adicionalmente, se estableció que, dependiendo del agente estabilizante que se utiliza, así varía la cantidad del derivado que se carga en la nanopartícula y a su vez, esta carga define la estabilidad del coloide a través del tiempo. De acuerdo a lo anterior, las nanopartículas de plata con estos agentes estabilizantes tienen la capacidad de cargar moléculas derivadas del esteroide, pero con diferentes estabilidades.

Referencias

1. Benyettou, F.; Rezgui, R.; Ravaux, F.; Jaber, T.; Blumer, K.; Jouiad, M.; Motte, L.; Olsen, J.-C.; Platas-Iglesias, C.; Magzoub, M.; Trabolsi, A. Synthesis of Silver Nanoparticles for the Dual Delivery of Doxorubicin and Alendronate to Cancer Cells. *J. Mater. Chem. B* 2015, 3 (36), 7237–7245. <https://doi.org/10.1039/C5TB00994D>.
2. Mansfield, E.; Tyner, K. M.; Poling, C. M.; Blacklock, J. L. Determination of Nanoparticle Surface Coatings and Nanoparticle Purity Using Microscale Thermogravimetric Analysis. *Anal. Chem.* 2014, 86 (3), 1478–1484. <https://doi.org/10.1021/ac402888v>.
3. Sanchez, Y.; Mora, M.; Palencia, M. A First Approach to the Development of New Drugs with Leishmanicidal Activity via Control of Surface Properties of Silver Nanoparticle. *J. Sci. with Technol. Appl.* 2019, 6 (2019), 118–133. <https://doi.org/10.34294/j.jsta.19.6.46>.



Amphiphilic copolymers modified with cholesterol and oleic acid via ROP and click chemistry to enhance drug loading capacity

Angarita-Villamizar Vivian, Sierra Cesar, Pérez León.

Laboratorio de Investigación en Macromoléculas, Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Carrera. 30 No. 45-03 Bogotá D.C, Colombia.

aeangaritav@unal.edu.co

Keywords: Micelles, Copolymers, Biomolecules, Drug, Encapsulation.

Introduction: Polymer micelles obtained from amphiphilic copolymers have emerged as promising drug vehicles given their nanometric size, simple release, and encapsulation mechanisms. Nevertheless, their lack of functional groups that interact with the drugs causes low encapsulation capacities. In this work, the synthesis of novel amphiphilic copolymers composed of polyethylene glycol and a poly(ester-co-carbonate) segment containing alkyne groups, as well as its coupling in a post-synthesis stage with other azido-functionalized substances through click reaction is reported. The modifiers were intentionally selected to favor polymer–drug compatibility for the rational development of drug delivery systems.

Methodology: A series of diblock copolymers mPEG-b-P(CL-co-PMC) composed of a mPEG segment and a random copolymer of ϵ -Caprolactone (CL) and carbonate (PMC) were synthesized. These copolymers had two different length of hydrophobic blocks and contained 1, 3, or 5 PMC units in their structure. After purified and characterized these were reacted via click chemistry with oleamidopropyl-3-azido (OI-N₃) to obtain mPEG-b-P(CL-co-[PMC-OI]) materials. Correspondingly each copolymer was reacted via click chemistry with cholesteryl 3-azidopropyl-carbamate (Ch-N₃) to obtain mPEG-b-P(CL-co-[PMC-Ch]) materials. The molecular weight of mPEG was measured by MALDI-TOF mass spectrometry. The structures and their molecular weight obtained were confirmed by FT-IR and ¹H-NMR. Thermal behaviour of the materials was determined by DSC. The dispersity values (\bar{D}) of the polymeric materials were determined by gel permeation chromatography (GPC). The self-assembly of the copolymers in aqueous medium was characterized by fluorimetry using pyrene to characterize their CMC. The conjugated copolymers gave nanometric formulations with diameter (D_h) values lower than 100 nm, which are highly desired in the application of drug delivery systems with prolonged circulation in the blood stream.

Results: mPEG-b-P(CL-co-PMC) block copolymers with a narrow distribution and containing a target number of alkyne groups were synthesized by ROP. These materials were modified through its reaction with OI and Ch azido derivatives through CuAAC. The hydrophobic block can be intentionally modified with moieties that promote specific interactions with the drug and maintain a control on the molecular weight of the copolymer upon the implementation of “click reactions.” Moreover, the synthesis of this kind of materials was carried out by employing mild reaction conditions and still obtained high yields and reproducibility, which, in turn, could enable its scaling up. Cholesterol and oleic acid were employed as modifiers of the copolymers can in all probability provide improvements on the drug loading capacity compared with an unmodified copolymer.

References:

1. Movassaghian S, Merkel OM, Torchilin VP (2015) Applications of polymer micelles for imaging and drug delivery. *Wiley Interdiscip Rev Nanomed Nanobiotechnol* 7(5):691–707.
2. Kataoka K, Harada A, Nagasaki Y (2012) Block copolymer micelles for drug delivery: design, characterization, and biological significance. *Adv Drug Deliv Rev* 64:37–48.
3. Hwang D, Ramsey JD, Makita N, Sachse C, Jordan R, Sokolsky-Papkov M, Kabanov AV (2019) Novel poly(2-oxazoline) block copolymer with aromatic heterocyclic side chains as a drug delivery platform. *J Control Release* 307:261–271.
4. Angarita AV, Umaña-Perez A, Perez LD (2020) Enhancing the performance of PEG-b PCL-based nanocarriers for curcumin through its conjugation with lipophilic biomolecules. *J Bioact Compat Polym*:0883911520944416.



Simulación de los perfiles de elución y retención en experimentos de Retención en Fase Líquida asistida por Polímeros

Arturo Espinosa-Duque¹, Mayra A. Mora^{1,2}, Manuel Palencia¹

¹GI-CAT, Departamento de Química, Universidad del Valle. ²Mindtech Research Group (Mindtech-RG), Mindtech s.a.s, Barranquilla-Colombia

arturo.espinosa@correounivalle.edu.co

Palabras clave: Ultrafiltración, polímero, membrana, retención.

El Modelo de Decaimiento Exponencial (MDEx) y Modelo de Decaimiento Racional (MDRa) fueron propuestos para describir los perfiles de retención obtenidos en RFLP (Retención en Fase Líquida asistida por Polímeros). Debido a las asunciones y formulaciones planteadas en los modelos, surge la necesidad de evaluar su validez, limitaciones y alcances. Para ello, se desarrolló el análisis funcional y la simulación de sus correspondientes expresiones analíticas, a partir de experimentos de diafiltración continua de disoluciones de cationes metálicos en: (i) ausencia de agentes retenedores, (ii) presencia de una membrana de polietersulfona (PES) y, (iii) en presencia de una membrana PES y polímeros retenedores. Los resultados demostraron que MDEx y MDRa permiten la simulación de la tendencia de los experimentos, viéndose limitados en la descripción completa de los experimentos. Una equivalencia entre ambos modelos no fue observada. Se evidenció la importancia del diseño en la implementación de los diferentes modelos, siendo las variables de mayor relevancia el factor de filtración (F) y el volumen en el interior de la celda. De este modo, se definió un valor crítico de F ($F_c = 1$). Para $F < F_c$, la predicción de las constantes de interacción se mejora, mientras que lo opuesto ocurre para $F > F_c$ en relación con la predicción de la retención (R). En presencia de dos agentes retenedores, ambos modelos exhibieron desviaciones con respecto al comportamiento experimental. Lo anterior se atribuyó a las asunciones implícitas de ambos en la resolución de las ecuaciones respectivas para la obtención de expresiones analíticas.

Referencias:

1. Palencia, M. Liquid-Phase Polymer-Based Retention: Theory, Modeling, and Application for the Removal of Pollutant Inorganic Ions. *J. Chem.* **2015**, 2015, 1-9.
2. Palencia, M.; Rivas, B.; Pereira, E.; Hernández, A.; Prádanos, P. Study of Polymer-Metal Ion– Membrane Interactions in Liquid-Phase Polymer-Based Retention (LPR) by Continuous Diafiltration. *J. Membr. Sci.* **2009**, 336 (1-2), 128-139.
3. Rivas, B.; Pereira, E.; Palencia, M.; Sánchez, J. Water-Soluble Functional Polymers in Conjunction with Membranes to Remove Pollutant ions from Aqueous Solutions. *Prog. Polym. Sci.* **2011**, 36 (2), 294–322.



NANOPARTÍCULAS DE PLATA BIOACTIVAS CON INTERFACES HEMOCOMPATIBLES: SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN

Jhoban Steban Meneses Rengifo, Manuel Salvador Palencia Luna, Tulio Armando Lerma Henao, Hernán Alonso Valle Zapata

Universidad del Valle, Cali-Colombia.

jhoban.steban.meneses@correounivalle.edu.co

Palabras clave: Nanopartículas de plata, hemólisis, colesterol, beta-sitosterol

Introducción: Las nanopartículas de plata son reconocidas por presentar un potencial efecto antibacteriano, siendo la alternativa de aquellos antibióticos comerciales que presentan deficiencia en el efecto terapéutico o generan efectos secundarios en el ser humano. Estas nanopartículas no solo han demostrado una alta reactividad frente a microorganismos como las bacterias, también han presentado una actividad biológica sobre protozoarios del género *Leishmania*, causante de la enfermedad tropical denominada leishmaniasis, donde actualmente se emplean tratamientos con medicamentos que generan fuertes efectos secundarios o pueden causar daños en el organismo. A pesar de esto, el uso o aplicación de las nanopartículas en los seres vivos se ha visto limitada debido a que destruyen los glóbulos rojos, por esta razón, el uso de agentes estabilizantes son una alternativa para solucionar este problema, debido a que estos definen las características interfaciales de las nanopartículas, a su vez modulan el tamaño, la estabilidad y la actividad biológica, por tanto, es una forma de regular la toxicidad del núcleo de plata. De acuerdo a lo anterior, en el presente proyecto se realizó la síntesis de nanopartículas de plata estabilizadas con colesterol y beta-sitosterol, que son moléculas derivados del esterol y hacen parte de diferentes procesos metabólicos en los seres vivos, con el propósito de disminuir la hemólisis y de esta forma mejorar la biocompatibilidad.

Métodos Las nanopartículas se sintetizaron a partir del método de reducción química de una sal de plata en medio acuoso y la posterior transferencia a una solución de cloroformo con el derivado del esterol. La caracterización se llevó a cabo por espectroscopía infrarroja para caracterizar el agente estabilizante mediante sus grupos funcionales, espectroscopía ultravioleta-visible para confirmar la formación de nanopartículas de plata por medio de la señal de resonancia de plasmón superficial, y el tamaño de las mismas por dispersión dinámica de luz. Por otra parte, se realizó la evaluación de la actividad hemolítica a través del procedimiento ASTM F756-13 y también, se analizó la actividad antimicrobiana en bacterias grampositivas y gramnegativas por el método de turbidimetría.

Resultados y conclusiones A partir de los resultados, se confirmó por las técnicas mencionadas la formación de nanopartículas de plata estabilizadas con colesterol y beta-sitosterol, con la capacidad de dispersarse en solventes como cloroformo y hexano. Por otro lado, el uso de estos agentes estabilizantes disminuyó la hemólisis en comparación con las nanopartículas de plata desnudas, además, no se obtuvieron diferencias significativas en la actividad antimicrobiana de las nanopartículas, por tanto, estas moléculas derivadas del esterol permiten estabilizar los núcleos de plata y reducir la hemólisis sin afectar la actividad antibacteriana.

Referencias:

1. Fernando, I.; Zhou, Y. Impact of PH on the Stability, Dissolution and Aggregation Kinetics of Silver Nanoparticles. *Chemosphere* 2019, 216, 297–305. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2018.10.122>.
2. Patel, K.; Bharatiya, B.; Mukherjee, T.; Soni, T.; Shukla, A.; Suhagia, B. N. Role of Stabilizing Agents in the Formation of Stable Silver Nanoparticles in Aqueous Solution: Characterization and Stability Study. *J. Dispers. Sci. Technol.* 2017, 38 (5), 626–631. <https://doi.org/10.1080/01932691.2016.1185374>.
3. Sanchez, Y.; Mora, M.; Palencia, M. A First Approach to the Development of New Drugs with Leishmanicidal Activity via Control of Surface Properties of Silver Nanoparticle. *J. Sci. with Technol. Appl.* 2019, 6 (2019), 118–133. <https://doi.org/10.34294/j.jsta.19.6.46>.



ESTUDIO DEL EFECTO DE LOS IONES DIVALENTES PRESENTES EN EL AGUA DE PREPARACIÓN SOBRE PROPIEDADES REOLÓGICAS DE SOLUCIONES POLIMÉRICAS HPAM CON DIFERENTES CONFIGURACIONES MOLECULARES EMPLEADAS EN RECUBRO MEJORADO DE PETRÓLEO

Villar, A., Barbosa, D. S., Pico, L. C., Rincon M. F., Quintero, H. I., y Mercado, R. A.

Ecopetrol S. A. – Centro de Innovación y Tecnología (ICP), Universidad Industrial de Santander

dalje.barbosa@ecopetrol.com.co

Palabras claves: salinidad, HPAM, divalentes, reología.

Los métodos químicos en la recuperación mejorada de petróleo, pretenden aumentar la eficiencia de desplazamiento del crudo. Para ello, se utilizan soluciones poliméricas tipo HPAM, las cuales están condicionadas por la fluctuación de sus propiedades reológicas, debido principalmente a condiciones de inyección y salinidad del agua de preparación de estos. Se estudió el efecto de la salinidad variando la concentración de iones divalentes Ca+2 y Mg+2 de aguas de preparación sobre las propiedades reológicas (viscosidad -viscoelasticidad) de soluciones poliméricas. Se seleccionaron tres polímeros HPAM de alto peso molecular y diferentes configuraciones moleculares, HPAM estándar y con grupos sulfonado ATBS.

A partir de los resultados obtenidos se puede establecer que a las condiciones estudiadas un aumento en la temperatura y la concentración de los iones divalentes de Mg+2 y Ca+2 disminuye la viscosidad para las diferentes configuraciones poliméricas. Los efectos de los iones fueron más notorios en el HPAM estándar debido a que en comparación con las otras dos configuraciones moleculares, este polímero no cuenta con un grupo sulfonado (ATBS). Entre las concentraciones de iones divalentes estudiadas, la concentración de calcio tuvo el efecto más fuerte en la disminución de viscosidad.

Los resultados demuestran también que el módulo elástico predominó en todas las soluciones poliméricas, y fue el polímero HPAM estándar el que más se vio afectado por la presencia de estos iones. Adicionalmente, las soluciones presentaron un comportamiento no tixotrópico, donde el efecto de dichos iones fue despreciable sobre la recuperación de la estructura interna.

Referencias:

1. Nurmi, L.; Sandengen, K.; Hanski, S.; Molesworth, P. Sulfonated Polyacrylamides - Evaluation of Long Term Stability by Accelerated Aging at Elevated Temperature. SPE [Online] 2018, SPE-190184-MS. <https://doi.org/10.2118/190184-MS> (accedido enero 10, 2021).
2. Peng, S.; Wu, C. Light Scattering Study of the Formation and Structure of Partially Hydrolyzed Poly(acrylamide)/Calcium(II) Complexes. *Macromolecules*, 1999, 32(3), 585–589.
3. Reichenbach-Klinke, R.; Langlotz, B.; Wenzke, B.; Spindler, C.; Brodt, G. Hydrophobic Associative Copolymer with Favorable Properties for the Application in Polymer Flooding. SPE [Online] 2011, SPE-141107-MS. <https://doi.org/10.2118/141107-MS> (accedido enero 10, 2021).



PARÁMETRO DE FLORY-HUGGINS EN HIDROGELES DE PVA MEDIANTE DOS MÉTODOS: CONGELACIÓN-DESCOGEACIÓN Y RETICULACIÓN CON ÁCIDO CÍTRICO

Maria Inés Martínez Parra, Esteban Garzón Montes, Diana Lucía Pérez Jaramillo, Carmiña Gartner Vargas

Universidad de Antioquia

maria.martinez13@udea.edu.co

Palabras clave: Hidrogeles Alcohol-polivinílico(PVA) Parámetro-interacción-Flory- Huggins

Introducción: El alcohol-polivinílico-(PVA), un polímero soluble en agua, se reticula formando geles. Los OH del PVA reaccionan con los grupos ácidos del ácido cítrico formando redes tridimensionales; también se reportan métodos físicos como congelación-descongelación. Las interacciones agua-PVA se caracterizan mediante el parámetro de Flory Huggins, para conocer sus propiedades termodinámicas.

Métodos: Se obtuvieron hidrogeles por dos métodos. Por congelación-descongelación: PVA(6%) se congeló a -12°C y descongeló a 36°C durante 24 horas. Por reticulación con ácido cítrico: se goteó ácido al 15% en solución de PVA, manteniéndose a 60°C por 6h. Se midió la cinética de hinchamiento y propiedades mecánicas bajo tensión.

Resultados y conclusiones: Después de realizar un barrido de concentraciones entre 10% y 25% de una solución de ácido cítrico, se escogió 15% como concentración óptima porque los hidrogeles mostraron las mejores propiedades, hinchaban correctamente y eran flexibles, comparándolos con los hidrogeles obtenidos por congelación-descongelación, usado como método referente. Por cinética de hinchamiento se obtuvo que el grado de hinchamiento de los hidrogeles por ambos métodos está en un rango entre 60-70% el cual corresponde a un grado de hinchamiento medio. Las medidas del módulo elástico dieron valores entre 0,27-0,4 MPa. Se calculó el parámetro de interacción de Flory-Huggins (χ) entre el PVA y el agua, el cual depende de los grupos-OH hidrofílicos disponibles del polímero; entre mayor es este valor más débil es la interacción, y no será mayor a 0,5. Se concluye que la densidad de entrecruzamiento del hidrogel aumentó la hidrofobicidad del PVA aumentando el valor de χ .

Referencias:

1. Echeverri, E.C.; Londoño, M.E.; Vallejo, C. Síntesis y caracterización de hidrogeles de alcohol polivinílico por la técnica de congelamiento/descongelamiento para aplicaciones médicas. *EIA*, **2009**, 12, 59-66.
2. Lin, Z. Wu, W. Wang, J. Jin, X.; Studies on swelling behaviors, mechanical properties, network parameters and thermodynamic interaction of water sorption of 2-hydroxyethyl
3. methacrylate/novolac epoxy vinyl ester resin copolymeric hydrogels. *Reactive & Functional Polymers*.**2006**, 67, 789-797.
4. Shafee, E. El.; Naguib, H. F. Water sorption in cross-linked poly(vinyl alcohol) networks. *Polymer*. **2003**, 44, 1647-1653.



MICROENCAPSULACIÓN DE PESTICIDAS SOPORTADOS EN ORGANOARCILLAS UTILIZANDO ALGINATO

Ángela María Cuéllar Felantana¹, Jaime Fernando Martínez Suárez², Lisette Ruiz Bravo¹.

¹Grupo de investigación Materiales, ambiente y desarrollo-MADE de la Universidad de la Amazonia, Calle 17-diagonal 17 carrera 3F campus Porvenir, Florencia-Caquetá. ²Semillero de Investigación Electroquímica de Sistemas Biológicos, Moléculas Orgánicas Pequeñas y Polímeros, Grupo de Investigación en Productos Naturales Amazónicos, Universidad de la Amazonia, Calle 17 Diagonal 17 con Carrera 3F, Florencia, Colombia.

lis.ruiz@udla.edu.co

Palabras claves: Alginato, electroquímica, microencapsulación, pesticidas.

Introducción: Actualmente se desarrollan estudios para evitar la liberación inmediata de herbicidas y sus procesos de lixiviación que contaminan el agua entre los que se encuentran el uso de tecnologías de encapsulación del agroquímico para liberar controladamente el componente activo [1] evitando el uso de cantidades en exceso.

Métodos: Se incorporo cationes de hexadecilamonio en la bentonita, se adsorbió glifosato sobre ellas y se determinó tiempo de contacto, pH y capacidad máxima de adsorción, posteriormente se microencapsularon con diferentes relaciones de alginato, se evaluó el comportamiento de desorción del herbicida. La cuantificación del pesticida se realizó por métodos electroquímicos.

Resultados y conclusiones: La caracterización por DRX de la bentonita y las organoarcillas obtenidas mostraron una expansión del espacio interlamilar desde 1.4 nm hasta 3.4 nm cuando se compenso 3 veces la CIC presentando una estructura tipo parafina [2], el FT-IR mostro la presencia de bandas de vibración asociadas con los grupos metilo de la cadena alifática [3] de los cationes de hexadecilamonio comprobando su incorporación sobre la bentonita. La superficie hidrofóbica que adquieren las organoarcillas permiten mejorar las capacidades máximas de adsorción del glifosato en comparación con la bentonita de partida y la encapsulación con alginato permite disminuir la velocidad de desorción del glifosato. El VC de glifosato en solución amortiguadora fosfato 0,1M a pH 7 presentan un pico de oxidación irreversible a 0,78 V vs Ag/AgCl. El límite y rango de detección del glifosato por DPV en condiciones optimizadas fue 0,20 $\mu\text{A } \mu\text{M}^{-1}$ y 0,1 a 50 μM , respectivamente.

Referencias:

1. Wani, T. A., Masoodi, F. A., Baba, W. N., Ahmad, M., Rahmanian, N., & Jafari, S. M. (2019). Nanoencapsulation of Agrochemicals, Fertilizers, and Pesticides for Improved Plant Production. *Advances in Phytotechnology*, p. 279–298. doi:10.1016/b978-0-12-815322-2.00012-2
2. Park, Y., Ayoko, G. A., & Frost, R. L. (2011). Application of organoclays for the adsorption of recalcitrant organic molecules from aqueous media. *Journal of Colloid and Interface Science*, 354(1), 292–305. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2010.09.068>
3. D. R. Scheuing, *Fourier transform infrared spectroscopy in colloid and interface science*. ACS Publications, United State 1990.



ADSORCIÓN Y FOTODEGRADACIÓN DE AZUL DE METILENO SOBRE PELÍCULAS DELGADAS DE DIÓXIDO DE TITANIO IMPREGNADAS CON POLIOXOMETALATOS TIPO ANDERSON

Freider Gabriel Duran Manga

Universidad del Atlántico

fgduran@mail.uniatlantico.edu.co

PALABRAS CLAVES: Adsorción, fotocatalisis, TiO₂, polioxometalatos.

La producción de sistemas híbridos es una de las estrategias empleadas para mejorar la efectividad del TiO₂ como fotocatalizador en procesos avanzados de oxidación. En este sentido, los polioxometalatos resultan en una opción atractiva ya que se ha demostrado que sus propiedades hacen sinergia con las del TiO₂. Se produjeron películas de TiO₂ impregnadas con polioxometalatos (POM) de tipo Anderson con heteroátomos de aluminio, cobre, cobalto, níquel. Las películas fueron caracterizadas a través de varias técnicas instrumentales. Se hizo un estudio de la cinética del proceso de adsorción y fotodegradación de azul de metileno sobre las películas producidas. Los estudios de adsorción y fotodegradación de azul de metileno mostraron una mejora en la actividad fotocatalítica de las películas de TiO₂ al ser impregnadas con los polioxometalatos, llegando a degradar hasta cerca del 40% del azul de metileno en solución en comparación con el 20% degradado empleando las películas de TiO₂ puro. Se encontró una dependencia de la actividad fotocatalítica del sistema POM/TiO₂ en función del heteroátomo. La mejora en la actividad fotocatalítica en este sistema se atribuyó principalmente a un efecto sinérgico entre la separación de cargas producida en el TiO₂ al ser iluminado con luz UV y la captura de electrones por parte del POM produciendo una extensión del tiempo de recombinación de cargas dentro del TiO₂.

REFERENCIAS:

1. Diaz-Uribe, C. E.; Rodríguez, A.; Utria, D.; Vallejo, W.; Puello, E.; Zarate, X.; Schott, E. Photocatalytic Degradation of Methylene Blue by the Anderson-Type Polyoxomolybdates/TiO₂ Thin Films. *Polyhedron* 2018, 149, 163–170. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2018.04.027>.
2. Fotiou, T.; Triantis, T. M.; Kaloudis, T.; Papaconstantinou, E.; Hiskia, A. Photocatalytic Degradation of Water Taste and Odour Compounds in the Presence of Polyoxometalates and TiO₂: Intermediates and Degradation Pathways. *J. Photochem. Photobiol. A Chem.* 2014, 286, 1–9. <https://doi.org/10.1016/j.jphotochem.2014.04.013>.
3. Streb, C.; Kastner, K.; Tucher, J. Polyoxometalates in Photocatalysis. *Phys. Sci. Rev.* 2019, 4 (6), 1–10. <https://doi.org/10.1515/psr-2017-0177>. Universidad del Atlántico - Colombia



AMINOFUNCIONALIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE SiO₂ PARA LA OBTENCIÓN DE MATERIALES HÍBRIDOS NpSiO₂@HPAM CON POTENCIAL APLICACIÓN EN EOR

Silvia Nathalia Escobar Galvis

Universidad Industrial de Santander

sinatha94@gmail.com

Palabras clave: nanohíbridos, recobro mejorado, reología.

Introducción: Los polímeros hidrosolubles son ampliamente usados en tecnologías EOR. Sin embargo, son sensibles a degradación térmica y química. En este trabajo se presenta la síntesis de nuevos materiales nanohíbridos basados en nanopartículas de SiO₂ y polímeros HPAM unidos covalentemente teniendo en cuenta la sinergia entre las propiedades de ambos materiales.

Métodos: La primera etapa de síntesis consistió en la obtención de nanopartículas de SiO₂ por el método sol gel, seguido de una amino funcionalización. Los nanohíbridos se obtuvieron vía reacción de amidación mediada por carbodiimidas. Los productos obtenidos en cada etapa fueron caracterizados por FT-IR, SEM, TGA, DLS y XPS.

Resultados y conclusiones: Una caracterización preliminar por FT-IR y TGA permitió confirmar la síntesis y amino funcionalización de nanopartículas de SiO₂. La reacción transcurrió a temperatura ambiente por 5 horas. Posteriormente, los materiales híbridos de interés fueron sintetizados vía reacción de amidación usando DCC como entrecruzador, la reacción se llevó a cabo a temperatura ambiente por 24 horas. La caracterización por FT-IR, TGA y XPS permitió conformar la existencia del enlace covalente entre las nanopartículas funcionalizadas y la cadena polimérica.

El comportamiento reológico de los materiales nanohíbridos permitió establecer que existe una mejora evidente en la retención de la viscosidad en comparación con el polímero precursor bajo las mismas condiciones de trabajo. Con base en los resultados obtenidos se puede concluir que la síntesis de nuevos materiales nanohíbridos fue llevada a cabo de manera satisfactoria y sus propiedades reológicas promisorias.

Referencias:

1. Rahman, I. A.; Padavettan, V. Synthesis of silica nanoparticles by sol-gel: Size-dependent properties, surface modification, and applications in silica-polymer nanocomposites—A review. *JNM*. **2012**, 10, 1687-4110.
2. Cheraghian, G.; Hendraningrat, L. A review on applications of nanotechnology in the enhanced oil recovery part B: effects of nanoparticles on flooding. *Int. nano lett.* **2016**, 6, 1-10.
3. Ponnappati, R.; Karazincir, O.; Dao, E.; Ng, R.; Mohanty, K.; Krishnamoorti, R. Polymer functionalized nanoparticles for improving waterflood sweep efficiency: Characterization and transport properties. *I&EC*, **2011**, 50, 13030-13036.



DESINFECTANTES Y TEXTILES VIRUCIDAS COMO RESPUESTA AL COVID-19.

Cesar Augusto Sierra.

Universidad Nacional de Colombia

casierraa@unal.edu.co

Palabras clave: COVID 19, Textiles, Desinfectantes.

El SARS-CoV-2 hasta la fecha ha producido un total de 192 millones de personas infectadas y mas de 4 millones han muerto. Por lo anterior se estudió la actividad virucida de textiles nanoestructurados, y además, se desarrollaron dos formulaciones ambientalmente amigable para limpieza y desinfección de uso hospitalario contra COVID-19.

Metodología: Muestras de textiles nanoestructurados fueron analizados en términos de hidrofobicidad y dos limpiadores “verdes” fueron desarrollados con componentes naturales. Y a las anteriores muestras se les calculo el factor de reducción de titulo viral en huevos embrionados de pollo libres de patógenos específicos (SPF).

Resultados: Los resultados muestran la relación existente entre la hidrofobicidad de los textiles y su poder virucida, así como la influencia de los componentes naturales en la eficiencia virucida de un limpiador para ambientes hospitalarios. Mostrando a los dos materiales atractivos para el control de coronavirus 19.

Referencias:

1. Johns Hopkins, C., Coronavirus 2019-nCoV Global Cases. Center for Systems Science and Engineering, Johns Hopkins University.
2. Rodríguez, H.; Hinestroza, J. P.; Ochoa-Puentes, C.; Sierra, C. A.; Soto, C. Y. Antibacterial activity against Escherichia coli of Cu-BTC (MOF- 199) Metal-Organic Framework immobilized onto cellulosic fibers. J. Appl. Polym. Sci. 2014, 131, 19, 5-10
3. Gloria Ramirez Nieto, et al. "Optimización de una prueba de PCR para el diagnóstico del virus de la Leucosis Aviar (ALV)" . En: Colombia . Revista de la Facultad de Medicina Veterinaria y de Zootecnia, Universidad Nacional de Colombia v.51 fasc.1 p.2 - 9 ,2004 Universidad Nacional de Colombia, Direccion de INvestigaciones



EMPAQUE POLIMÉRICO ANTIFÚNGICO POLIETILENO/ACEITE DE COCO HIDROLIZADO PARA EL CONTROL DE *Colletotrichum*

Lisette Ariza Corredor, Brayan Alonso Bohórquez Torres, Katheryn Michell Camargo Jiménez, Mónica Constanza Ávila Murillo, Cesar Augusto Sierra Ávila

Universidad Nacional de Colombia. Bogotá, Colombia

flarizac@unal.edu.co

Palabras claves: Empaques, aceite coco, ácido láurico, polietileno, *Colletotrichum*

Como una forma de escalar resultados previos de la inhibición de *Colletotrichum* con empaques polietileno/ácido láurico, se utilizó aceite de coco hidrolizado como aditivo a películas de polietileno (PE). Estas mostraron tener eficiencias hasta del 95% en la inhibición de tres variedades de *Colletotrichum*.

Se obtuvieron ácidos grasos libres (FFA) del aceite de coco mediante procesos de hidrólisis a alta presión y transesterificación. La mezcla hidrolizado y polietileno se realizó en estado fundido por extrusión y se obtuvieron películas que mostraron actividad antifúngica por radio de inhibición *in vitro*.

El análisis de optimización de la hidrólisis a alta presión arrojó los óptimos valores para la relación volumétrica (agua/aceite de coco) de 4:1, temperatura 220 °C y 1.5 horas. Para la transesterificación se encontraron los valores óptimos de relación molar (Metanol/Aceite de coco) de 6, concentración de NaOH (catalizador) 1.5 %p y temperatura 62 °C durante 1.5 horas.

Los hidrolizados obtenidos se analizaron mediante GC-MS, mostrando un contenido de ácido láurico de 30 -50 %p para ambos procesos de hidrólisis. Se evidenció una gran actividad antifúngica de este hidrolizado ante varias cepas de hongos diferentes. Los empaques mostraron modificación en sus propiedades mecánicas, térmicas y de barrera debido a la presencia de los FFA. Además, se evidenció que para concentraciones de hasta 5%p de FFA en la matriz polimérica, los empaques presentan actividad antifúngica.

Referencias:

1. Solano, R. J.; Sierra, C. A.; Ávila Murillo, M. Antifungal Activity of LDPE/Lauric Acid Films against *Colletotrichum Tamarilloi*. *Food Packag. Shelf Life* **2020**, 24 (July 2019), 100495. <https://doi.org/10.1016/j.fpsl.2020.100495>.
2. Baig, M. N.; Santos, R. C. D.; King, J.; Pioch, D.; Bowra, S. Evaluation and Modelling of Continuous Flow Sub-Critical Water Hydrolysis of Biomass Derived Components; Lipids and Carbohydrates. *Chem. Eng. Res. Des.* **2013**, 91 (12), 2663–2670. <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2013.05.029>.
3. Nitbani, F. O.; Jumina; Siswanta, D.; Solikhah, E. N. Isolation and Antibacterial Activity Test of Lauric Acid from Crude Coconut Oil (*Cocos Nucifera L.*). *Procedia Chem.* **2016**, 18 (Mcls 2015), 132–140. <https://doi.org/10.1016/j.proche.2016.01.021>.



SLGCL-620

SÍNTESIS ASISTIDA POR MICROONDAS DE NUEVAS MOLÉCULAS ELECTROACTIVAS BASADAS EN 2-(3-HEXIL-2-OXOIMIDAZOLIN-4-ILIDEN) MALONONITRILLO COMO NUEVO GRUPO ELECTROACEPTOR

Caicedo-Reina Mauricio, Robson R. Guimarães, Alejandro Ortiz, Koiti Araki, Braulio Insuasty.

Universidad del Valle, Cali, Colombia, University of Sao Paulo, Sao Paulo, Brazil, Centre for Bioinformatics and Photonics-CIBioFI, Cali, Colombia.

mauricio.caicedo@correounivalle.edu.co

Palabras clave: Grupo amido, Knoevenagel, microondas, push-pull.

RESUMEN

Las celdas solares sensibilizadas por colorante (DSSCs) surgieron como una nueva tecnología de bajo costo y eficiencia de conversión de alta potencia (PCE) alrededor de 1991, después de un trabajo publicado por O'regan y Grätzel, en el que se utilizó un complejo trimérico de rutenio adsorbido en la superficie mesoporosa de un semiconductor ($m\text{-TiO}_2$) alcanzar el PCE más del 7,12%, sentando un precedente en la historia de los dispositivos fotovoltaicos. Para mejorar el rendimiento de los PCE es importante obtener nuevas moléculas con unidades altamente aceptoras de electrones. Varios grupos funcionales han sido utilizados como fragmentos aceptores, sin embargo, el ácido cianoacrílico es ampliamente utilizado en DSSCs. En este sentido, sintetizamos seis nuevos colorantes D- π -A usando 2-(3-hexil-2-oxoimidazolin-4-ilideno) malononitrilo como un grupo aceptor y grupo de anclaje a la superficie de TiO_2 . La ruta sintética utilizada para obtener los colorantes involucró una condensación de Knoevenagel bajo irradiación por microondas con donantes basados en trifetilamina (TEA) y la fracción de tiofeno como espaciador π conjugado. Además, los experimentos de absorción, emisión y electroquímicos se llevaron a cabo para demostrar un comportamiento push-pull en todos los colorantes.

Finalmente, se probaron los colorantes DCH 1-6 como fotosensibilizadores en celdas solares tipo Grätzel que muestran un bajo valor de PCE (entre 0,10% y 0,60%), debido a la pobre inyección de electrones en la superficie de TiO_2 debido a los bajos niveles de energía LUMO de los colorantes preparados.



PREPARACIÓN DE BIOPELÍCULAS DE ALMIDÓN DE PAPA/ARCILLA QUITOSANO CON POTENCIAL USO COMO RECUBRIMIENTOS DE LOS FRUTOS DE CACAO.

Laidy Tatiana Bayena Suárez, Sebastián Eduardo Ramos Jiménez, Yeyzon Javier Cruz Vera, Lina María Rodríguez Pineda, Mery Carolina Pazos Zarama.

Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia.

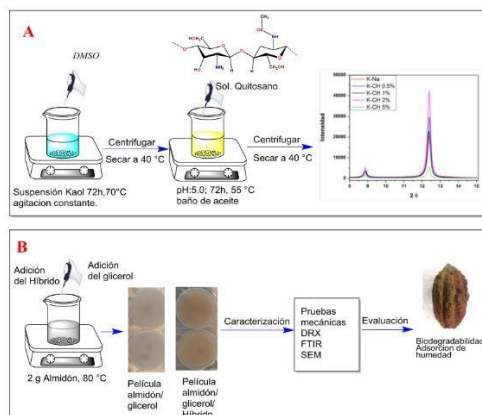
carolina.pazos@uptc.edu.co

Palabras clave: Almidón, híbrido, biopelículas, cacao.

Introducción: El desarrollo de biopelículas para la protección de frutos es de gran interés para la industria de alimentos y la química de polímeros ¹⁻³. Por este motivo, se plantea la preparación de biopelículas a partir de almidón de papa reforzado con arcilla-quitosano para la protección del fruto de cacao.

Métodos: Se dispersaron 2 g de almidón en 60 mL de agua destilada, bajo agitación a 80°C. Luego, se adicionó glicerol (entre 0 y 50%) y se agitó por 5 min. Finalmente, se agregó biocompositos (Esquema A), en distintas concentraciones, se mezcló y se secó a 35°C por 12 h.

Resultados y conclusiones: Las películas de almidón se utilizaron como blanco y se evaluó la adición de glicerol (como aglutinante), obteniendo que la proporción que proporcionó mayor flexibilidad corresponde a la película con adición de 42% de glicerol respecto a la masa de almidón (2 g:0,7 mL), las películas se caracterizaron mediante FTIR, identificando las bandas características atribuidas a estiramientos O-H, CH₂ y C-O. Por otra parte, la caolinita utilizada fue caracterizada mediante DRX luego de su purificación, comprobando su cristalinidad. Posteriormente para llevar a cabo la formación de biocompositos se usó el método de intercalación dispersando la arcilla en DMSO con el fin de ampliar el espacio entre las capas, para introducir posteriormente el quitosano, observando cambios en las señales características de DRX. Por último, se llevaron a cabo pruebas de adsorción de humedad analizadas por medio de isoterma, y adicionalmente se realizaron pruebas de biodegradabilidad utilizando suelo fertilizado durante 12 días.



Esquema 1. Obtención híbrido (A) y Obtención y evaluación biopelículas (B)

Referencias:

- Alba, M. D.; Cota, A.; Osuna, F. J.; Pavón, E.; Perdigón, A. C.; Raffin, F. Bionanocomposites Based on Chitosan Intercalation in Designed Swelling High-Charged Micelles. *Sci. Rep.* **2019**, *9* (1), 1–9. <https://doi.org/10.1038/s41598-019-46495-z>.
- de Souza, A. G.; dos Santos, N. M. A.; da Silva Torin, R. F.; dos Santos Rosa, D. Synergic Antimicrobial Properties of Carvacrol Essential Oil and Montmorillonite in Biodegradable Starch Films. *Int. J. Biol. Macromol.* **2020**, *164*, 1737–1747. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2020.07.226>.
- Muxika, A.; Etxabide, A.; Uranga, J.; Guerrero, P.; de la Caba, K. Chitosan as a Bioactive Polymer: Processing, Properties and Applications. *Int. J. Biol. Macromol.* **2017**, *105*, 1358–1368. <https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2017.07.087>.



PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y MAGNÉTICAS DE LAS ORTOFERRITAS $\text{Tr}_{1-x}\text{Bi}_x\text{FeO}_3$ (Tr= Eu y Gd; $0 \leq x \leq 0.1$) SINTETIZADAS POR COMBUSTIÓN

L. M. Ramírez Guzmán, J. A. Gómez Cuaspud, C. A. Parra Vargas

Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia.

laura.ramirez01@uptc.edu.co

Palabras Clave: Método de combustión, propiedades magnéticas, ortoferritas.

Introducción: Las propiedades magnéticas de TrFeO_3 son interesantes debido a que son gobernadas por interacciones como: Fe-O-Fe, Fe-O-Tr y Tr-O-Tr. Estas interacciones se ven influenciadas por la síntesis y los cambios en el tamaño de grano. En este trabajo se estudia el efecto de las sustituciones con Bi en TrFeO_3 .

Materiales y métodos: Se realizó la síntesis del sistema $\text{Tr}_{1-x}\text{Bi}_x\text{FeO}_3$ (Tr= Eu y Gd; y $0 \leq x \leq 0.10$) por el método de combustión, utilizando ácido cítrico como combustible. Los materiales fueron caracterizados utilizando difracción de rayos X, microscopía electrónica de barrido y medidas magnéticas en un magnetómetro de muestra vibrante.

Resultados y conclusiones: El refinamiento Rietveld del patrón de difracción de rayos X confirma la formación de la fase ortorrómbica de las muestras, se observó que los parámetros de red y el volumen de celda aumentan con el contenido de Bi, debido a la distorsión de la estructura causada por la diferencia de radio iónico entre Tr y el Bi. Las micrografías SEM revelaron una distribución uniforme de los granos de forma variable con límites bien definidos. Las propiedades magnéticas exploradas a partir de las curvas M-H y M -T, mostraron que los materiales exhiben un comportamiento paramagnético con leves componentes ferromagnéticas. Se encontró que el dopaje con Bi mejora la coercitividad de GdFeO_3 y EuFeO_3 , e induce a la aparición de la transición de reorientación de espín a temperaturas superiores a los 250 K, como resultado de la interacción de acoplamiento entre el Bi^{3+} con las subredes del Fe y la Tr.

Referencias:

1. K.O. Ogunnirana, G. Murugadosb, R. Thangamuthu, Solid State Sci., vol. 93, pp. 87-94, 2019.
2. P. Paul, P.S. Ghosh, A.K. Rajarajan, P.D. Babu, T.V.C. Rao, J. Magn. Magn. Mater., vol. 518, pp. 167407, 2021.
3. Z. Zhou, L. Guo, H. Yang, Q. Liu, F. Ye, J. Alloys Compd., vol. 583, pp. 21-31, 2014.
4. M. A. Ahmed, A. A. Azab, E. H. El-Khawas, J Mater Sci: Mater Electron, vol. 26, pp. 8765–8773, 2015.



EVALUACIÓN DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y MAGNÉTICAS DE LOS SISTEMAS $\text{LaBa}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuFeO}_5$ Y $\text{YbBa}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuFeO}_5$ ($x = 0.0, 0.25$ Y 0.5)

I.M. Saavedra Gaona, J. Munevar, C.A. Parra Vargas

Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Boyacá, Colombia, Universidade Federal Do ABC (UFABC), Santo André, Brazil

indry.saavedra@uptc.edu.co

Palabras Clave Multiferroico, XRD, SEM, VSM

Introducción Los materiales multiferroicos han despertado recientemente un gran interés debido a sus posibles aplicaciones en dispositivos multifuncionales en el área de la espintrónica. La necesidad de obtener materiales que presenten dos o más órdenes ferroicos simultáneamente conduce al diseño de nuevos materiales que presenten estas propiedades.

Materiales y Metodos: Los sistemas $\text{LaBa}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuFeO}_5$ y $\text{YbBa}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuFeO}_5$ se prepararon por el método de reacción de estado sólido, sometiendo a calcinación la mezcla homogénea de precursores de partida deshidratados a una temperatura de 955 °C. Los compuestos fueron sistemáticamente caracterizados por técnicas de DRX, MEB y VSM.

Resultados y Conclusiones: Hemos investigado las propiedades estructurales y magnéticas de los compuestos de perovskitas en capas de tierras raras $\text{TRBa}_{1-x}\text{Sr}_x\text{CuFeO}_5$ ($\text{TR} = \text{La}, \text{Yb}; x = 0, 0.25 \text{ y } 0.25$) sintetizados por el método de reacción de estado sólido. El análisis estructural mostró que la sustitución de los iones TR^{3+} y Sr^{2+} favoreció la estabilidad de la fase permitiendo la formación de fases puras. Los sistemas obtenidos presentaron una estructura ortorrómbica con simetría Immm para $\text{TR} = \text{La}$ y tetragonal con simetría P4mm para $\text{TR} = \text{Yb}$. La morfología observada fue típica del método de síntesis empleado, es decir distribuciones de granos de diversos tamaños y formas, que conforman una superficie muy compacta, con relativamente poca porosidad y contornos de granos muy definidos, baja difusividad intergranular. Los estudios magnéticos de los compuestos muestran un comportamiento paramagnético. Se sugiere evaluar las propiedades magnéticas por medio de difracción de neutrones.

Referencias

1. S. Lal, C. S. Yadav, and K. Mukherjee, "Effect of $(\text{Cu}/\text{Fe})\text{O}_5$ bipyramid size and separation on magnetic and dielectric properties of rare earth layered perovskite LaBaCuFeO_5 and LuBaCuFeO_5 ," J. Appl. Phys., vol. 126, no. 14, p. 144101, Oct. 2019.
2. Y. Kawamura et al., "High-temperature multiferroic state of RBaCuFeO_5 ($\text{R} = \text{Y}, \text{Lu}, \text{ and } \text{Tm}$)," J. Phys. Soc. Japan, vol. 79, no. 7, Jul. 2010.
3. Q. Zhou, T. He, Q. He, and Y. Ji, "Electrochemical performances of LaBaCuFeO_{5+x} and LaBaCuCoO_{5+x} as potential cathode materials for intermediate-temperature solid oxide fuel cells," Electrochem. commun., vol. 11, no. 1, pp. 80–83, 2009.



QUÍMICA DE PRODUCTOS NATURALES Y FARMACÉUTICOS

ILHCL-111

RENIN-INHIBITING DRUGS VS. RENIN-INHIBITING BIOACTIVE PEPTIDES: AN IN SILICO APPROACH TO PHARMACOKINETICS AND DRUG-LIKENESS COMPARISON

Jorge Andrés Barrero Casallas, Maria Alejandra Barrero Casallas, Claudia Marcela Cruz Gonzalez

Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia - Departamento de Ciencias Naturales, Gimnasio Vermont.

jobarrero@unal.edu.co

key-words: Drug-likeness; Bioactive peptides; Hypertension; ADMET.

Introduction: The rate-limiting role of renin in the renin-angiotensin-aldosterone system makes this enzyme a suitable pharmaceutical target for hypertension therapy. Reported renin-inhibiting drugs have shown no significant results, fortunately, bioactive food-hydrolysates seem to exhibit enhanced renin-inhibiting properties. Hence, a comparative investigation may result in important outcomes regarding feasible renin-inhibiting therapeutic agents.

Methodology: Assessed renin-inhibitors were divided into two groups: food-derived bioactive dipeptides and eight reported drugs. In silico quantitative comparison was based on drug likeness compliance, physicochemical properties, synthetic accessibility, and pharmacokinetics in silico ADMET assays. Statistical analysis was carried out using one way ANOVA (significant differences with a probability of < 0.05).

Results & Conclusions: Results unveiled a significant difference ($p=0.04$) between dipeptides and renin inhibiting drugs in terms of compliance with the assessed drug-likeness rules. Biopeptides exhibited higher compliance values. Physicochemical analysis, on the contrary, showed no significant difference ($p=0.53$), yet bioactive peptides exhibited more “drug-like” properties (solubility).

Gastrointestinal-absorption assessment showed low absorption for both drugs ($prob=0.37\pm 0.02$) and bioactive peptides ($prob=0.42\pm 0.03$), however, peptides absorption probabilities were greater than drug probabilities. Distribution estimation showed $< 20\%$ bioavailability for all drugs, while 90% of the studied biopeptides had a $\geq 20\%$ value. Drugs reported CYP3A4 and CYP2D6 inhibition, whereas biopeptides displayed no CYP450 inhibiting properties. Bioactive peptides exhibited higher clearance and lower half-life when compared to renin-inhibiting drugs. Toxicity evaluation revealed greater toxicity for renin-inhibiting drugs. Synthetic Accessibility indicates that biopeptides (2.79 ± 0.08) are easier synthesizable compounds when compared to drugs (6.22 ± 0.36). Biopeptides hold important “drug-like” advantages over drugs, suggesting that food hydrolysates might have more desirable features as therapeutic agents.

References:

1. Ramya, K.; Suresh, R.; Kumar, H. Y.; Kumar, B. R. P.; Murthy, N. B. S. Decades-Old Renin Inhibitors Are Still Struggling to Find a Niche in Antihypertensive Therapy. A Fleeting Look at the Old and the Promising New Molecules. *Bioorg. Med. Chem.* **2020**, 28 (10), 115466. <https://doi.org/10.1016/j.bmc.2020.115466>.
2. Minkiewicz, P.; Iwaniak, A.; Darewicz, M. BIOPEP-UWM Database of Bioactive Peptides: Current Opportunities. *Int. J. Mol. Sci.* **2019**. <https://doi.org/10.3390/ijms20235978>.
3. Wang, G. M.; Li, L. J.; Tang, W. L.; Wright, J. M. Renin Inhibitors versus Angiotensin Converting Enzyme (ACE) Inhibitors for Primary Hypertension. *Cochrane Database Syst. Rev.* **2020**. <https://doi.org/10.1002/14651858.CD012569.pub2>.



ANTIFUNGAL POLYSUBSTITUTED PIPERIDINE-TYPE ANALOGS: AN IN-SILICO AND IN-VITRO STUDY.

Willy Cely-veloza, [Ericsson Coy-Barrera](#).

Universidad Militar Nueva Granada, Cajicá, Colombia

ericsson.coy@unimilitar.edu.co

key-words: Candida albicans, Antifungals, Piperidines.

Regarding fungal diseases worldwide, there is an uninterrupted search for more safe/effective antifungal agents. In this sense, piperidine-containing compounds are considered as important leads for antifungal development [1]. Thus, as part of our research on antifungal agents, an in-house collection of synthetic polysubstituted piperidine-type analogs (n = 26) were selected. Test compounds were evaluated using a susceptibility test by broth microdilution against *Candida albicans*. Additionally, interactions of test piperidine analogs within the active site of lanosterol 14 α demethylase (LDM), N-myristoyltransferase (NMT), and the respective Upc2 transcription factor were simulated by molecular docking and molecular dynamics. Resulting docking scores, subdivided into compound subtype, were discriminated according to experimental fungal inhibition through supervised statistics. Compound dataset correlated very well with molecular interaction fields provided by a CoMFA model ($r^2 > 0.8$, $q^2 > 0.6$) after substructure-based alignment. Alcoxycarbonyl and N-aryl-substituted analogs exhibited the best docking scores and interaction profile as well as in vitro antifungal effect. Piperidine **19**, a very antifungal compound ($IC_{50} < 0.2 \mu M$), was found to be a putative inhibitor of NMT, LDM and Upc2TF according to the molecular docking and dynamics performance. In this regard, the in-silico protein:ligand interactions profiles exhibited a common receptor contact which contributes to the non-polar stabilization. According to data analyses, the discovered hits and structural requirements are an excellent starting point in the further development of antifungals based on piperidine-containing analogs.

References:

1. Thawabteh, A.; Juma, S.; Bader, M.; Karaman, D.; Scrano, L.; Bufo, S. A.; Karaman, R. *Toxins*, **2019**, 11, 656.
2. The present study is a product derived by the Project IMP-CIAS-2924 financed by Vicerrectoría de Investigaciones at UMNG - Validity 2018.



ESSENTIAL OIL FROM *Cordia curassavica* (JACQUIN) GROWN IN COLOMBIA: IN VITRO AND IN SILICO ANALYSIS REVEALED POTENTIAL AS PRIMARY SOURCE OF PHYTOMEDICINES FOR TREATMENT OF DENGUE

Sindi Alejandra Velandia, Elizabeth Quintero Rueda, Paola Rondón-Villarreal, Lina Silva Trujillo, Elena E Stashenko,
Raquel E Ocazonez

Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

relocaz@uis.edu.co

key-words: essential oil, dengue, antiviral, molecular docking.

Introduction. Dengue is an important viral disease, severe dengue is a leading cause of serious illness and death. Multi-target therapy seems to be required for preventing severe disease. This study aimed to examine antiviral and immunomodulatory activities of essential oil (EO) from *Cordia curassavica* (Jacquin) grown in Colombia.

Methodology. The MAHD method was used to extract EO, and chemical composition was determined by GC/MS analysis. Antiviral effect was evaluated using the DENV (dengue virus) – E protein reduction assay. LPS-stimulated PBMC cells assay evaluated the effect of EO on cytokines. Molecular docking analyses were performed using Autodock Vina 1.5.6.

Results and Conclusions. The GC/MS analysis identified 20 different substances, 82.2% corresponded to sesquiterpenes. EO-treatment after virus adsorption reduced DENV-E protein of three virus-serotypes with IC_{50} values < 26.0 μ g/mL. EO-treatment reduced TNF- α (87%), IL-8 (67%) and INF- γ (47%) cytokines produce by PBMC cells. 3,7-Guaiadiene was predicted to bind (-8.03 kcal/mol) to viral E-DI protein, which is involved in virus production. Other seven sesquiterpenes were predicted to bind to the same region of E protein although with greater binding energies (-6.62 to -7.31 kcal/mol). Sesquiterpenes (n=7) interacting with E protein also were predicted to bind (-7.56 to -7.69 kcal/mol) to Toll-like-4 receptor protein on PBMC. The in silico analysis predicted that sesquiterpenes interact with DENV-E protein and Toll-like-4 protein through hydrophobic interactions. Results suggest that EO from *C. curassavica* grown in Colombia could serve as starting point for development of phytomedicines, for preventing viremia and inflammatory response associated with dengue progress to severity.

References

1. Halstead, S. (2019). Recent advances in understanding dengue. *F1000Research*, 8, 1-12. doi.org/10.12688/f1000research.19197.
2. Olejnik J., et al. (2018) Toll-like receptor 4 in acute viral infection: Too much of a good thing. *PLoS Pathog* 14(12):e1007390. DOI:oi.org/10.1371/journal.
3. Singh PK, Rawat P. (2017). Evolving herbal formulations in management of dengue fever. *J Ayurveda Integr Med*. 8(3):207-210.
4. Oza MJ, Kulkarni YA. (2017). Traditional uses, phytochemistry and pharmacology of the medicinal species of the genus *Cordia* (Boraginaceae). *J Pharm Pharmacol*. 69(7):755- 789.
5. Ma L.Yao L. (2020). Antiviral effects of plant-derived essential oils and their components: An updated review. *Molecules*, 25(11), 2627.



SYNTHESIS OF PEPTIDOMIMETIC DERIVATIVES USING ISOCYANIDE BASE MULTICOMPONENT REACTIONS ON SOLID PHASE AND CHOLINERGIC INHIBITION ASSAYS

Luis Prent-Peñaloza, Julio Caballero, Margarita Gutierrez.

Universidad de Talca, Chile, Universidad Andrés Bello, Viña del Mar, Chile.

luisprent@gmail.com

Alzheimer's is a neurodegenerative disease. It is a progressive pathology that affects around 15 million people every year. According to the World Health Organization (WHO), these statistical values can be triplicate for 2050. Alzheimer's disease (AD) is present mainly in older people, and this is distinguished because patients present memory loss, language difficulties, behavioral disorder, psychiatric symptoms. Similarly, these symptoms are associated with the dysfunction of specific brain areas, such as the frontal cortex, the anterior and posterior cingulate cortex (area rich in cholinergic neurons). As the symptoms of this disease progress, patients' quality of life worsens, making it difficult to autonomy and daily performance.

AD causes are not clear wherever studies reveal the presence of extracellular deposits of beta amyloid plaques, reactive oxygen species, the formation of neurofibrillary tangles, and neuronal synapse loss. Last decades, scientists focused on preventing the formation of beta-amyloid plaques, the Tau protein's hyperphosphorylation, and maintaining the concentration of acetylcholine in the race to stop the progress or get the cure of this disease.¹

Neuronal synapse loss is the most studied hypothesis. In this, the acetylcholinesterase enzyme (AChE) stops the synapse process through the hydrolysis of the neurotransmitter acetylcholine (ACh). This enzyme blocks neuronal communication and the subsequent atrophy of neurons due to inactivity. In the same way, the butyrylcholinesterase enzyme (BuChE) plays a supportive role. It can hydrolyze choline's esters. Although BuChE's physiological role is unclear, some authors reported the possibility of using this enzyme in the treatment of cocaine blood detoxification.

Although AD does not have a cure, there is some palliative treatment through enzymatic inhibition using drugs at different stages of the disease.

The researchers currently continue using different strategies to find a treatment capable of stopping progressive neuronal damage. One of these approaches is organic synthesis and computational tools; this approach looks for molecules with the capacity to interact with specific or multiple biological targets and stop the progress of this disease and allow the regeneration of damaged tissue.^{2,3}

Taking into account the above, we designed a set of compounds type peptidomimetic (using molecular docking filter), synthesized it using Isocyanide-Base Multicomponent Reactions (IMCRs) on Solid-Phase, and we evaluated their antioxidant capacity using the DPPH and ABTS methods, as well as their enzymatic inhibitory capacity against AChE and BuChE. The enzymatic results showed that peptidomimetic derivatives have a moderate enzymatic inhibitors capacity. On the other hand, the antioxidants test showed that some peptidomimetic derivatives have a better antioxidant capacity than drug reference (ascorbic acid).

References:

1. Trippier, P. C.; Jansen Labby, K.; Hawker, D. D.; Mataka, J. J.; Silverman, R. B. Target- and Mechanism-Based Therapeutics for Neurodegenerative Diseases: Strength in Numbers. *J. Med. Chem.* **2013**, 56 (8), 3121–3147. <https://doi.org/10.1021/jm3015926>.
2. Anand, P.; Singh, B. A Review on Cholinesterase Inhibitors for Alzheimer's Disease. *Arch. Pharm. Res.* **2013**, 36 (4), 375–399. <https://doi.org/10.1007/s12272-013-0036-3>. (3) Duarte, Y.; Fonseca, A.; Gutiérrez, M.; Adasme-Carreño, F.; Muñoz-Gutierrez, C.; Alzate Morales, J.; Santana, L.; Uriarte, E.; Álvarez, R.; Matos, M. J. Novel Coumarin-Quinoline Hybrids: Design of Multitarget Compounds for Alzheimer's Disease. *ChemistrySelect* **2019**, 4 (2), 551–558. <https://doi.org/10.1002/slct.201803222>.

GEOMAGNETIC STRESS MANAGEMENT IN PHYTO-PATHOLOGICAL AREAS RECOGNIZED IN AGRO- INDUSTRIAL DIVERSIFIED AND SUSTAINABLE FARMS AS SOCIAL INNOVATION MECHANISM.

Barbara Moreno-Murillo, Víctor M Fajardo M, Andrés Ricardo Aponte, Humberto Mayorga W.
& Rafael Hernández M.

- 1- Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia sede Bogotá, Colombia SA
bdmorenom@unal.edu.co.
2- Departamento de Recursos Naturales, Facultad de Ciencias, Universidad de Magallanes, Casilla 113D, Punta Arenas
Chile.victor.fajardo@umag.cl
3- Finca Laurasia vereda Lavaderos, Tibaná, Boyacá, Colombia SA. rhmoscoso@gmail.com

The main goal of this project is the establishment of a new method to correct the geomagnetic stress in recognized phyto-pathological areas in diversified and sustainable farms, joining some rural families that could offer diverse products and contribute to social development in Boyacá, Colombia. This region is characterised by small farms where some entrepreneurship had emerged from individual crops, such as roses, “sagú” meal, laurel leaves, and a new greenhouse for tomatoes cultivation, all of them growing in clean and organic conditions. Plant diseases caused by phyto-pathological fungi, are a serious and notable problem in crops plantations, such as “Mildeo vellosa” in roses and other flowers fields, which are treated with traditional agronomic procedures. As a response, the recognition of the fields and the geomagnetic networks and its measurements in soils, at different areas of the cultivations allowed us to recognize the spectrum of values that characterized and differentiated a diseased from a healthy area in the same crop. According to the Callahan proposal (1995), besides, derived from those data the soil must be treated with at least one addition of made-home compost to improve plants growth and also, the application of efficient microorganisms (EM) joint with pests control botanical insecticides prepared with herbs that grow nearest the greenhouses and crops will help to get better production..

Finally, the process is completed with the installation of the denominated Soils Biophysical Treatment (SBT), a method based on the measure of soil paramagnetic properties and the determination of anomalies observed compared with the total farm average, correcting negative signals which affect plants growth. The new innovative method uses specific plates designed for the elimination of the presence of fungus, bacteria, and herbivorous agents. These devices are installed once and their effects are continuous for years improving the production and quality of crops. In summary, the project is running well, but costs are increasing and we need economical support for its maintenance. Preliminary results promise to improve the social development of the community. Project 46978-2020-DIUN.

References

- Callahan, P. (1995) Paramagnetism: Rediscovering nature’s secret force of growth -Arches Ed, pp.
- Chahal, R., Nanda, A., Akkol, EK. , Sobarzo-Sánchez, E., Arya, A., Kaushik, D. (2021) Secondary Metabolites in the Management of Different Fungal Pathogens Review. *Molecules* 26:2933.<https://doi.org/10.3390/molecules26102933>.
- Contreras Laura D. 2019. Propuesta de desarrollo de un nutraceutico derivado del hidrolato como co-producto de la hidrodestilación de la Rosa centifolia (Rosaceae) Tesis de grado FUA Facultad de Ingenierías Bogotá DC. pp.
- Hernández, R. & Moreno-Murillo, B. 2017.Hacia una agricultura sostenible: La Rosa centifolia L. genotipo orgánico cultivado en Colombia y sus propiedades medicinales. *QEI Revista Química e Industria*, Vol. XXIX. (1):15-23.



EXTRACT FROM LIPPIA ORIGANOIDES H.B.K GROWN IN COLOMBIA AS PRIMARY SOURCE OF PHYTOMEDICINES FOR TREATMENT OF DENGUE: IN VITRO BIOLOGICAL ACTIVITIES ACCORDING TO CHEMICAL COMPOSITION.

Elizabeth Quintero Rueda, Jessica Mejía Medina, Elena E Stashenko, Jairo Rene Martinez, Raquel E Ocazionez

Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

raqueocaocaz@gmail.com

key-words: Lippia organoides, dengue, flavonoid, antiviral.

Introduction. Dengue is an important viral disease, phytotherapy is a new option for preventing severe dengue. Research on local traditional medicinal plants is required. This study aimed to compare in vitro cytotoxic and antiviral activities of extracts (EXTs) from Lippia organoides grown in Colombia.

Methods: EXT-SCF and EXT-UAE were obtained by Supercritical Fluid and Ultrasonically Assisted extraction methods, respectively, and GC/MS and LC/MS analysis were used for determination of the chemical composition. Cytotoxic was evaluated by MTT and crystal violet assays. Antiviral activity was evaluated using dengue virus-NS1 protein reduction assay in human liver cells.

Results and conclusions. The GC/MS and LC/MS analysis identified 21 and 7 different substances in EXT-UAE and EXT-SCF, respectively, of which 7 were shared. Quercetin, luteolin, and eriodictyol were the most (89.1%) abundant constituents of EXT-UAE. Pinocembrin was the most (82.5%) abundant constituent of EXT-SCF. Both EXTs could be classified as non-cytotoxic: CC_{50} values $> 200 \mu\text{g/mL}$ in human cells (HepG-2, Hepa-RG, HEK-293), and monkey (Vero) cells. EXT-UAE exhibited antiviral effect more extensive (IC_{50} values: 17 and 23 $\mu\text{g/mL}$) than EXT-SCF (IC_{50} values: 54 and $> 100 \mu\text{g/mL}$) before and during virus adsorption on cells. EXTs showed similar antiviral effect after virus adsorption: 60% DENV-NS1 reduction at 3.2 $\mu\text{g/mL}$. Antiviral and immunomodulatory effects of plant extracts have been attributed to their high flavonoid content and in particular the presence of quercetin, pinocembrin and luteolin. L. organoides grown in Colombia could serve as starting point for development of phytomedicines for preventing severe dengue.

References:

1. Halstead, S. (2019). Recent advances in understanding dengue. F1000Research, 8, 1-12. doi.org/10.12688/f1000research.19197.1
2. Singh PK, Rawat P. (2017). Evolving herbal formulations in management of dengue fever. J Ayurveda Integr Med. 8(3):207-210.
3. Oliveira D R., et al. (2014). Ethnopharmacological studies of Lippia organoides. Revista Brasileira de Farmacognosia, 24(2), 206–214. DOI: 10.1016/j.bjp.2014.03.001.
4. Ullah, A., Munir, S., Badshah, SL., et. Al. (2020). Important flavonoids and their role as a therapeutic agent. Molecules 25. DOI: 10.3390/molecules25225243.
5. Zakaryan H., et al. (2017). Flavonoids: promising natural compounds against viral infections. Archives of Virology, 162(9), 2539-2551.



COCOA POD HUSK EPICARP: A SOURCE OF NATURAL PIGMENTS

Jesús A. Oñate-Gutiérrez, Diana L. Urbina, Luis M. Díaz-Sánchez, Julio R. Pinzón, Marianny Y. Combariza, Cristian Blanco-Tirado.

Universidad Industrial de Santander

jesusonate17@gmail.com

key-words: cocoa pod husk epicarp, flavonoids, colorants, foods

Introduction: Cocoa Pod Husk, the most abundant by-product of cacao fruit processing, represents an exciting new source of natural ingredients. The CPH's outer layer, known as Cocoa Pod Husk Epicarp (CPHE), is rich in pigments responsible for the cacao fruit color with essential biological roles useful in food applications.

Methods: CPHE was collected from cacao pods using a peeler. Lyophilized and grounded CPHE (yellow, red, and purple) extract was prepared using ultrasound-assisted solvent extraction (EtOH:H₂O 80:20, 30 °C). Pigment extracts characterization and evaluation involved polyphenols quantification, UV-Vis analysis, reflectance analysis, MALDI-TOF mass spectrometry, food coloring test and cytotoxicity MTT assay.

Results and Conclusions: Three extracts, yellow, red, and purple, from CPHE were prepared with (15 – 25 % w/w) yield using ultrasound-assisted solvent extraction. The UV-Vis strongest absorption bands of the CPHE extracts were observed at 283 and 323 nm which corresponds to the benzoyl and cinnamoyl cores in flavonoids. The yellow, red, and purple extracts exhibited significant contents of phenolic compounds equivalent to 162, 150 and 168 mg GAE/g CPHE extract respectively. Fifteen flavonoids were identified by MALDI-TOF MS analysis. Phloretin, quercetin, myricetin, jaceosidin and procyanidin B1 are common to the three extracts. Compounds such as catequin, quercetin, procyanidin B1, and quercetin-3-O-arabioside were previously reported in cacao beans and husks. Bacterial cellulose cubes and plain yogurt samples dyed with CPHE extracts maintained uniform coloration for five days under dark conditions. CPHE extracts do not exhibit a cytotoxic effect in VERO cells. We conclude that CPHE extracts are potential functional food coloring agents.

References:

1. Lu, F.; Rodriguez-Garcia, J.; Van Damme, I.; Westwood, N. J.; Shaw, L.; Robinson, J. S.; Warren, G.; Chatzifragkou, A.; McQueen Mason, S.; Gomez, L.; Faas, L.; Balcombe, K.; Srinivasan, C.; Picchioni, F.; Hadley, P.; Charalampopoulos, D. *Curr. Opin. Green Sustain. Chem.* **2018**, 14, 80–88.
2. Santos, E.; Maia, B.; Ferriani, A.; Teixeira, S. *Intech.* **2017**.
3. Martínez Espinosa, R.; Torres Castro, P.; Meneses, M.; Figueroa, J.; Pérez-Álvarez, J.; Viuda-Martos, M. *Food Res. Int.* **2012**, 49, 39–45.
4. Ramírez, J.; Blanco, C.; Combariza, M. *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2019**, 11, 10975–10987.



DEVELOPMENT OF A SELF-EMULSIFYING DRUG DELIVERY SYSTEM (SEDDS) OF AN EXTRACT OF CALYCES FROM *PHYSALIS PERUVIANA* FOR ENHANCING MUCUS PERMEATING PROPERTIES AND ORAL BIOAVAILABILITY OF RUTIN

María I. Cardona, Gina P. Dominguez, Sandra M. Echeverry, Ivonne H. Valderrama, Diana M. Aragón

Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C, Colombia

micardonap@unal.edu.co

key-words: Rutin, SEDDS, mucus, bioavailability.

Introduction: Rutin is the major flavonoid of the extract of calyces from *Physalis peruviana*¹, the main limitation of rutin is its low oral bioavailability². This study aimed to develop a self-emulsifying drug delivery system (SEDDS) of an extract of calyces from *P. peruviana* to increase the bioavailability of rutin.

Methods: The Box-Behnken experimental design was used to optimize the extract loaded SEDDS. The droplet size, polydispersity index (PDI), and zeta potential of the optimized formulation were determined using a Zetasizer Nano. The permeating properties of SEDDS were evaluated in porcine intestinal mucus using Transwell® method. Furthermore, the pharmacokinetics of rutin and its metabolites was evaluated in Wistar rats.

Results and conclusions: In this study, SEDDS containing an extract of calyces from *P. peruviana* was developed. The optimized SEDDS showed a droplet size of 19.5 nm, PDI of 0.2, and negative zeta potential. Furthermore, the extract-loaded SEDDS showed an increase in the mucus permeation and in the oral bioavailability of rutin in comparison with the unformulated extract. Consequently, the incorporation of the extract of calyces from *P. peruviana* in SEDDS may be a promising strategy to enhance mucus permeation and the bioavailability of rutin and favoring the use of plant residues in pharmaceutical industry.

References:

1. Toro, R. M.; Aragón, D. M.; Ospina, L. F.; Ramos, F. A.; Castellanos, L. Phytochemical Analysis, Antioxidant and Anti-Inflammatory Activity of Calyces from *Physalis Peruviana*. *Nat. Prod. Commun.* **2014**, *9* (11), 1573–1575. <https://doi.org/10.1177/1934578x1400901111>.
2. Gullón, B.; Lú-Chau, T. A.; Moreira, M. T.; Lema, J. M.; Eibes, G. Rutin: A Review on Extraction, Identification and Purification Methods, Biological Activities and Approaches to Enhance Its Bioavailability. *Trends Food Sci. Technol.* **2017**. <https://doi.org/10.1016/j.tifs.2017.07.008>.



MACHINE LEARNING MODELS TO SELECT POTENTIAL INHIBITORS OF ACETYLCHOLINESTERASE ACTIVITY FROM SISTEMATX – A NATURAL PRODUCTS DATABASE.

Kenyi Herrera-Acevedo, Chonny Herrera-Acevedo, Camilo Perdomo-Madrigal, Ericsson Coy-Barrera, Luciana Scotti, Marcus Tullius Scotti

Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C, Colombia, Federal University of Paraíba, João Pessoa, Brazil,, Universidad Militar Nueva Granada, Universidad de Ciencias Aplicadas y Ambientales, Colombia,, Federal University of Paraíba, João.

chonny622@gmail.com

Key-words: Natural-Products, Machine-Learning, Acetylcholinesterase, SistematiX.

Alzheimer's disease is the most common form of dementia, representing 60%–70% of dementia cases. The enzyme acetylcholinesterase (AChE) cleaves the ester bonds in acetylcholine and plays an important role in the termination of acetylcholine activity at cholinergic synapses in various regions of the nervous system. The inhibition of acetylcholinesterase is frequently used to treat Alzheimer's disease. In this study, a merged BindingDB and ChEMBL dataset containing molecules with reported half-maximal inhibitory concentration (IC_{50}) values for AChE (7,032 molecules) were used to build machine learning classification models for selecting potential AChE inhibitors from the SistematiX dataset (8,593 secondary metabolites). A total of seven 5-fold models with accuracy above 80% after cross-validation were obtained using three types of molecular descriptors (VolSurf, DRAGON 5.0, and bit-based fingerprints). A total of 521 secondary metabolites (6.1%) were classified as active in this stage. Subsequently, virtual screening was performed, and 25 secondary metabolites were identified as potential inhibitors of AChE. Separately, the crystal structure of AChE in complex with (–)-galantamine was used to perform molecular docking calculations with the entire SistematiX dataset. Consensus analysis of both methodologies was performed. Only eight structures achieved combined probability values above 0.5. Finally, two sesquiterpene lactones, structures 15 and 24, were predicted to be able to cross the blood–brain barrier, which was confirmed in the VolSurf+ quantitative model, revealing these two structures as the most promising secondary metabolites for AChE inhibition among the 8,593 molecules tested.

References:

1. Herrera-Acevedo, C.; Maia, M. D. S.; Cavalcanti, E. B. V. S.; Coy-Barrera, E.; Scotti, L.; Scotti, M. T., Selection of antileishmanial sesquiterpene lactones from SistematiX database using a combined ligand- /structure-based virtual screening approach. *Molecular Diversity* 2020, 1-17.
2. Costa, R. P. O.; Lucena, L. F.; Silva, L. M. A.; Zocolo, G. J.; Herrera-Acevedo, C.; Scotti, L.; Da-Costa, F. B.; et al., The SistematiX Web Portal of Natural Products: An Update. *Journal of Chemical Information and Modeling* 2021.
3. Akıncioğlu, H.; Gülçin, İ., Potent acetylcholinesterase inhibitors: potential drugs for Alzheimer's disease. *Mini reviews in medicinal chemistry* 2020, 20 (8), 703-715



PHOTOPROTECTIVE COMPOUNDS IN SEAWEEDS OF COLOMBIAN PACIFIC COAST: TRENDS FOR COSMETIC PRODUCTS

Urrea-Victoria, V., Sepúlveda Sánchez, L., Ramos, Freddy A., Castellanos Hernández, L

Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Bogotá, Colombia

vurreav@unal.edu.co

key-words: Mycosporine-like amino_acids, pigments, seaweeds

Introduction: Colombian biodiversity is quite large, particularly on the oceanic coasts. The potential of marine natural products in the development of solar filters with high protection against UV rays is well recognized [1]. The role of mycosporine-like amino acids in the search for photoprotective compounds is very important.

Metodology: Seaweeds were collected at different marine ecosystems from Colombian Pacific Coast. Two seasons were selected, one with high UV index (February to March) and other with low UV index (July to August). Samples were examined for photosynthetic pigments by colorimetric tests [2]. The mycosporine-like amino acids were quantified by HPLC-UV.

Results and conclusions: In Colombia exists biological reports and few studies on chemical composition of seaweeds. There is only one paper published of the Pacific Coast. In this study, we analyzed more than 30 samples, considering the first report for *Bostrychia*, *Catenella*, *Ceramium*, *Chaetomorpha*, *Dictyota* and *Ulva*.

The photosynthetic pigments were measured by UV-Vis methodologies. Mycosporine-like amino acids (MAAs) (e.g. porphyra-334, shinorine, palythine), were quantified by HPLC-UV. These MAAs are appreciated by the cosmetic industry because of the lack of toxicity, high photostability and antioxidant properties [1, 3].

Several studies revealed geographic and seasonal trends, showing that algae in tropical areas accumulate higher amounts of MAAs than those in temperate regions. This fact shows the importance of analysis of photoprotective compounds at Colombian Pacific coast. The aim of this research is to identify the most prolific seaweeds of the Colombian Pacific Coast in order to select them for further aquaculture studies.

References:

1. De la Coba, F.; Aguilera, J.; Korbee, N.; de Gálvez, M.; Herrera-Ceballos, E.; Álvarez-Gómez, F. and Figueroa, F. *Mar Drugs*. 2019, 17, 55.
2. Ritchie, R. *Photosynthetica* 2008, 46: 115-126.
3. Lalegerie, F.; Lajili, S.; Bedoux, G.; Taupin, L.; Stiger-Pouvreau, V. and Connan, S. *Mar. Environ. Res.* 2019. 147: 37-48.



BIOCHEMOMETRICS OF INVASIVE LEGUMES: IDENTIFICATION OF ANTIFUNGAL HETEROCYCLIC NATURALLY-OCCURRING COMPOUNDS

Ericsson Coy-Barrera, Willy Cely-Veloza.

Bioorganic Chemistry Laboratory, Universidad Militar Nueva Granada, Cajicá 250247, Colombia.

ericsson.coy@unimilitar.edu.co

INTRODUCTION: Fabaceae family is a big group of flowering plants. Several of them have been introduced in various countries for diverse purposes but they have progressively dominated some native environments as well as altering many aspects of ecosystem functioning, such as *Ulex Europeaus* and *Genista monspessulana*, and some *Lupinus* spp.

METHODS: Several plant accessions (n>60) of these plants, from different invaded places in Bogotá plateau, were separately investigated through comprehensive targeted GC-MS-based biochemometrics from alkaloid-enriched extracts in order to observe the quinolizidine-based chemical variability between samples (ontogeny and environmental factors) and its implication on antifungal activity against *Fusarium oxysporum*.

RESULTS AND DISCUSSION: For invasion success, this kind of plants can produce bioactive secondary metabolites such as quinolizidine-related compounds [1]. In fact, MS-mediated identification (using standards from an in-house collection) showed the occurrence of different sparteine and lupanine-like tetracyclic quinolizidines. Phytomaterials also showed antifungal capacity at different levels ($2 > IC_{50} (\mu\text{g/mL}) > 55$). OPLS-DA-derived score plots indicated several differences between samples but clustered according characteristic chemical constituents and/or activity. Supervised analysis indicated the existence of three quinolizidine-related compounds to be responsible of the antifungal activity. The present targeted biochemometrics exploration of these invasive plants is an excellent approach for quinolizidine-based antifungal finding from nature as well as ontogeny and environmental indicators.

REFERENCES:

1. Hornoy, B.; Atlan, A.; Tarayre, M.L.; Dugravot, S.; Wink, M. *Naturwissenschaften*, **2012**, 99, 883-892.



PHEOPHYTIN J, NEW PIGMENT WITH UV PHOTOPROTECTIVE EFFECT FROM *Dictyota pinnatifida*

Sara P. Abril; Paola A. Rubiano; Freddy A. Ramos; Leonardo Castellanos

Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

spabrilp@unal.edu.co

key-words: Seaweed, pigments, photoprotection, UV

Introduction: Seaweed isolated compounds such as polyphenols, mycosporine like aminoacids, pigments and sulfated polysaccharides draw the attention of different industries around the world considering their promissory photoprotective activity¹. This work aims to evaluate this activity in pheophytin j, a novel pigment isolated from Colombian seaweed *Dictyota pinnatifida*.

Methodology: Chemical study of seaweed *Dictyota pinnatifida* extracts was performed using different chromatographic and spectroscopic techniques (MS, NMR). From this analysis, a new pigment was identified as pheophytin j. Considering its structure and cosmetic potential, its photoprotective activity was evaluated using Mansur's spectrophotometry methodology².

Results and conclusions: From a Colombian Caribbean brown seaweed sample identified as *Dictyota pinnatifida* a new pigment was isolated: pheophytin j. This compound is a magnesium-free pigment with a porphyrin-type ring, esterified with a hydroxylated monoterpene (3,7 dimethyl-1-octanol). Its structure is characterized by the presence of multiple conjugated double bonds, which referred to literature reports indicates the potential photoprotective effects of this type of photosynthetic compounds. Result shows that pigments in Colombian seaweed, further than having just coloring usages, they have and interesting potential as compounds with photoprotective activity that could be interesting for skin photoprotection-related applications.

Bibliography:

1. Aslam, A.; Bahadar, A.; Liaquat, R.; Saleem, M.; Waqas, A.; Zwawi, M. Algae as an Attractive Source for Cosmetics to Counter Environmental Stress. *Sci. Total Environ.* 2021, 772, 144905. <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.144905>.
2. Mansur, J.; Breder, M.; Mansur, M.; Azulay, R. Determination of Sun Protection Factor by Spectrophotometry. *An Bras Dermatol* 1986, 61, 121–124.
3. Morais, T.; Cotas, J.; Pacheco, D.; Pereira, L. Seaweeds Compounds: An Ecosustainable Source of Cosmetic Ingredients? *Cosmetics* 2021, 8 (1), 8. <https://doi.org/10.3390/cosmetics8010008>.



ILHCL-647

EVALUATION OF ANTIBACTERIAL ACTIVITY AGAINST *Staphylococcus epidermidis* AND ANALYSIS OF PROMISING BROWN ALGAE EXTRACTS BY MOLECULAR NETWORKING.

Laguna D., Sepúlveda L., Aragon D.M., Castellanos L., Vinchira D, Ramos F, De la Roche-Zogby F, Puyana M, Gavio B.

Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia, Universidad Jorge Tadeo Lozano, Sede Bogotá, Bogotá, Colombia.

ldlagunab@unal.edu.co

key-words: Seaweeds, *S. epidermidis*, molecular-networking, cosmetics.

Introduction: Brown-algae produce antibacterial compounds against skin pathogens¹, however, few chemical reports have been published. This research aims to evaluate the antibacterial-activity against *Staphylococcus epidermidis*, one of the bacteria acne-causing, using brown-algae extracts. The recent development of MassNetworking technologies has emerged as a tool to achieve the characterization of organism metabolome².

Methodology: Agar disk-diffusion antibacterial bioassay against *S. epidermidis* (Mueller Hinton agar 10^8 UFC/mL inoculation) was carried out on extracts from 20 brown algae species collected in the Colombian Caribbean. For those that showed promissory activity, molecular networks were built using Global Natural Products Social Molecular Networking online platform and protocols³.

Results and conclusions: *S. epidermidis* together with *Cutibacterium acnes* are present in skin microbiota, which under conditions of imbalance can be acne triggers¹. That is the reason why these bacteria are used as a model for the development of cosmetics to prevent acne. This research assesses the potential of Colombian brown algae. Samples were collected in the Colombian Caribbean belonging to the genus *Dictyota*, *Sargassum*, *Stypopodium*, *Lobophora*, and *Turbinaria*. From which polar and medium polarity extracts were obtained, and then tested at a concentration of 1mg/well, against the bacterium *S. epidermidis* inoculated in a bacterial suspension of approximately 10^8 CFU/mL. The extracts that showed activity belong to the genus *Stypopodium*, *Sargassum*, and *Dictyota*. These were analyzed by LC-MS/MS, the resulting data was used to construct molecular networks in the GNPS and SIRIUS platforms. The metabolome showed for these promissory samples is diverse. Then, we correlated the biological activity with the general composition of the active extracts.

References:

1. Silva, A. et al., J. Macroalgae as a Source of Valuable Antimicrobial Compounds: Extraction and Applications. *Antibiotics* **2020**, 9 (10), 642. <https://doi.org/10.3390/antibiotics9100642>.
2. Wang, M. et al. Sharing and community curation of mass spectrometry data with Global Natural Products Social Molecular Networking. *Nat. Biotechnol.* **2016**, 34 (8), 828-837. <https://doi.org/10.1038/nbt.3597>.
3. Claudel, J.-P.; et al., A Potential New Player in the Physiopathology of Acne? *Dermatology* **2019**, 235 (4), 287-294. <https://doi.org/10.1159/000499858>.



ILHCL-655

GREEN ULTRASOUND-ASSISTED EXTRACTION OF LICHEN SUBSTANCES FROM HYPOTRACHYNA CIRRHATA. ETHYL LACTATE, A BETTER EXTRACTING AGENT THAN METHANOL TOXIC ORGANIC SOLVENT?

Beatriz Sepulveda, Derin Benites, Laura Albornoz, Mario Simirgiotis, Olimpo García Beltrán, Nino Castro, Carlos Areche.

Universidad Andrés Bello, Viña del Mar, Chile. Universidad Nacional Mayor de San Marcos, Lima, Perú. Universidad de Chile, Santiago, Chile. Universidad Austral de Chile, Valdivia, Chile. Universidad de Ibagué, Colombia.

areche@uchile.cl

For the first time, we report a green extraction of lichen substances assisted by high power ultrasounds from *Hypotrachyna cirrhata* using ethyl lactate. This sustainable alternative was comparable, both in isolation and detection of lichen substances, to methanol (Figure 1). Although the UHPLC/ESI/MS profiles were similar, the antioxidant activity was higher for the ethyl lactate extract. Ethyl lactate can replace toxic organic solvents, such as methanol, in order to provide more sustainable green chemistry methods.

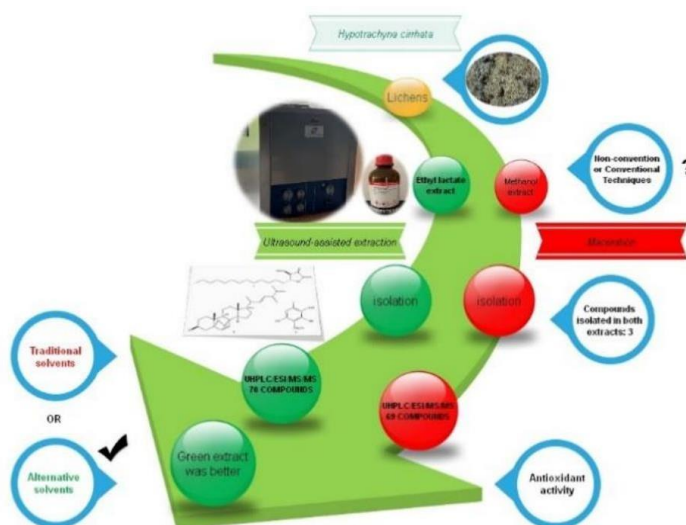


Figure 1. Isolation process

References:

1. Soquetta, M.B.; Terra, L. M.; Bastos, C. P. Green technologies for the extraction of bioactive compounds in fruits and vegetables. *CyTA-J. Food*. 2018, 16, 400-412.
2. Chatel, G.; Varma, R. S. Ultrasound and microwave irradiation: contributions of alternative physicochemical activation methods to Green Chemistry. *Green Chem*. 2019, 21, 6043-6050.
3. Chemat, F.; Aber Vian, M. *Alternative solvents for natural products extraction, Green Chemistry and Sustainable Technology*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2014.



SLHCL-29

ACOPLAMIENTO MOLECULAR SOBRE LA PROTEÍNA dUTPasa de *Trypanosoma cruzi* PARA EL DESCUBRIMIENTO DE POTENCIALES INHIBIDORES EN EL TRATAMIENTO DE LA ENFERMEDAD DE CHAGAS

John Torres Lemus, Ángela Rojas, Fabian Lopez.

Universidad Nacional de Colombia

joatorresle@unal.edu.co

Palabras clave: dUTPasa, T.Cruzi, acoplamiento, alineamiento.

Introducción: La enfermedad de Chagas, catalogada dentro de las enfermedades tropicales desatendidas (Roca et al 2015), es causada por el parásito *Trypanosoma cruzi*. En la actualidad sólo se cuenta con dos fármacos de baja eficacia para la erradicación del parásito y tienen problemas adicionales, por lo que la búsqueda de nuevas alternativas farmacológicas resulta necesaria.

Métodos: Se realiza alineamiento de todas las secuencias de proteínas cristalizadas de *Trypanosoma Cruzi* disponibles en PDB y selección de un blanco basado en la menor homología con proteínas humanas. Posteriormente se realiza proceso de acoplamiento molecular para evaluación de potenciales inhibidores y se evalúa potencial farmacocinética y toxicidad in silico.

Resultados y Conclusiones: Se realizó alineamiento a 231 secuencias FASTA de las proteínas cristalizadas encontradas en PDB con los parámetros “*Trypanosoma cruzi*”. Se eligió la proteína dUTPasa considerando un valor de query cover inferior al 10%, alta diferenciación en el sitio activo e importancia biológica de la misma (Harkiolaki et al 2004). Se determinó que el software Autodock Vina (Trott et al 2010) presentaba posiciones correctamente acopladas en comparación con el ligando cristalizado (≤ 2.0 Å RMSD) lo que hizo viable usar recursos y bases de TACC para la búsqueda. Se evaluaron las 1000 moléculas de cada base con mejor score en el alineamiento y se encontró que 7 moléculas cumplen con los requisitos de energía libre de unión calculada y absorción por vía oral in silico para ser potenciales inhibidores de la enzima, encontrándose viabilidad en moléculas como la 4-(3-(3(trifluorometil)fenil)isoxazol-5-il)piridin-2-amina para posterior investigación. Se concluye que la dUTPasa es un blanco molecular viable y existen al menos 7 candidatos a fármaco.

Referencias:

1. Harkiolaki, M.; Dodson, E.; Bernier, V.; Turkenburg, J.; Gonzalez D.; Wilson, K. The Crystal Structure of *Trypanosoma cruzi* dUTPase Reveals a Novel dUTP/dUDP Binding Fold. *CelPress*. **2004**, 12 (1), 41-53.
2. Roca, S.; Soriano, A.; Solsona, L.; Gascón J. Documento de consenso sobre el abordaje de la enfermedad de Chagas en atención primaria de salud de áreas no endémicas. *Atención primaria*. **2015**, 47 (5), 308-317.
3. Trott, O.; Olson, A. AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization and multithreading. *J Comput Chem*. **2010**, 31(2), 455 -461.



MICROENCAPSULACIÓN DEL EXTRACTO ETANÓLICO DE SEMILLAS DE *Mammea americana* PARA EL CONTROL LARVICIDA DE *Aedes aegypti* EN AGUAS ESTANCADAS

Mayra A. Morales Callejas, Fredyc Díaz Castillo, Claudia M. Baena-Aristizabal.

Universidad de Cartagena

cbaenaa@unicartagena.edu.co

PALABRAS CLAVE: *Aedes aegypti*, *Mammea americana*, extracto etanólico, microencapsulación, actividad larvicida.

Aedes aegypti es el principal vector transmisor de los virus que causan el dengue, chikungunya, fiebre amarilla y zika. Actualmente, se han ido desarrollando nuevas estrategias para mantener un bajo índice poblacional del mosquito, una de las alternativas es el uso de extractos con actividad larvicida como el extracto de *Mammea americana*. En el presente estudio se desarrolló un sistema microparticulado para la encapsulación del extracto etanólico de *Mammea americana*, como una estrategia de control de *Aedes aegypti* en aguas estancadas. Inicialmente, se caracterizó el extracto por cromatografía en capa delgada (TLC) y se determinaron los compuestos fenólicos totales. Posteriormente, se realizó la estandarización del método de obtención de las micropartículas por la técnica de coacervación compleja, teniendo en cuenta el comportamiento de variables del proceso como proporción de los materiales de pared y algunas condiciones operacionales (pH, temperatura, velocidad de agitación), la variable respuesta estudiada fue el tamaño de partícula. Con base en los resultados de la estandarización, se realizó un diseño factorial reducido, para seleccionar una formulación de micropartículas conteniendo el extracto vegetal. Las variables respuesta estudiadas fueron tamaño y distribución de tamaños de partícula y eficiencia de encapsulación. Adicionalmente, a la formulación seleccionada se le evaluó la actividad larvicida. Los resultados obtenidos en la caracterización del extracto mostraron la posible presencia de metabolitos secundarios como alcaloides, cumarinas, flavonoides y triterpenos y una cantidad de polifenoles totales de 4.453 ± 0.05 μg de ácido gálico/ml de extracto. Por otra parte, de los resultados de la estandarización se seleccionó la relación de gelatina y goma acacia 1:1 para obtener las micropartículas. El incremento de la concentración de los polímeros de 1.5% a 2.5%, la disminución del pH de 4.3 a 3.4 y la agitación de 7 rpm a 3 rpm produjeron un aumento del tamaño. A su vez se presentaron micropartículas multinucleares al variar los dos últimos factores. Por otra parte, al aumentar la temperatura a 65°C las micropartículas pasaron de tener una forma esférica a irregular. La formulación de micropartículas conteniendo extracto seleccionada utilizando diseño estadístico experimental, presentó una eficiencia de encapsulación del 100% y tamaño promedio de partícula de 3.49 μm . En la prueba de actividad larvicida se observó que el extracto de *M. americana* a tiempo cero produjo una mortalidad entre 85 al 100% al cabo de 24 horas y las micropartículas conteniendo el extracto obtuvieron una mortalidad del 93,8% al cabo de 48 horas, sugiriendo que la formulación seleccionada puede ser promisorio para el control larvicida sobre *A. aegypti*, por varios días.

REFERENCIAS:

1. Aziz, H. A.; Peh, K. K.; Tan, Y. T. Extraction and Microencapsulation of Khat: Effects on Sexual Motivation and Estradiol Level in Female Rats. *J Sex Med* **2009**, 6 (3), 682–695. <https://doi.org/JSM1157> [pii]10.1111/j.1743-6109.2008.01157.x.
2. Yari, S.; Nasirpour, A.; Fathi, M. Effect of Polymer Concentration and Acidification Time on Olive Oil Microcapsules Obtained by Complex Coacervation. *Appl. Food Biotechnol.* **2016**, 3 (1), 53–58. <https://doi.org/10.22037/afb.v3i1.10226>.
3. Gómez-Calderón, C.; Mesa-Castro, C.; Robledo, S.; Gómez, S.; Bolívar-Avila, S.; Díaz-Castillo, F.; Martínez-Gutiérrez, M. Antiviral Effect of Compounds Derived from the Seeds of *Mammea Americana* and *Tabernaemontana Cymosa* on Dengue and Chikungunya Virus Infections. *BMC Complement. Altern. Med.* **2017**, 17 (1), 57.



SLHCL-200

EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y CITOTÓXICA EN EL EXTRACTO METANOLICO DE LA AMBROSIA ARBORESCENS MILLER (MARCCO)

Teresa Cano de Terrones, Meiby Esther Marquez Huacca, Hector Enrique Terrones Diaz, Carlos Alberto Areche Medina, José M. Padrón, José J. Fernández, Lina Quispe Quispe, Wilfor Henry Quisocala Cossio

Universidad Nacional de San Agustín de Arequipa, Universidad de Chile, Universidad de La Laguna

dcanof@unsa.edu.pe

Palabras clave: ambrosia asterácea, antioxidante, citotóxica.

INTRODUCCIÓN: Ambrosia arborescens Miller, denominada comúnmente "marcco" perteneciente a la familia de las Asteraceae es una planta aromática medicinal, que se encuentra en América del Sur, distribuida en Perú, entre 2000 y 3500 msnm. Para las investigaciones de la planta se ha recolectado en el distrito de Chiguata, departamento de Arequipa.

MÉTODOS: Determinación De Fenoles Totales; Ensayo teac (capacidad antioxidante equivalente al trolox) o abts (sal diamónica del ácido 2,2'- azino-bis (3-etilbenzotiazolin-6-sulfónico)); Determinacion De La Capacidad Antioxidante Por El Metodo Cuprac (Capacidad Antioxidante Reductora Del Ion Cobre); Extracto Metanolico

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Capacidad antioxidante por el método CUPRAC espectrofotométrico; Ambrosia arborescens Miller (marcco): 8.35 mM eq. trolox/g ; Capacidad Antioxidante Por El Metodo ABTS Espectrofotometrico

Concentración (umol) Absorbancia (nm)

80	0.1847
160	0.3036
240	0.3875
320	0.5118
400	0.5894
480	0.6871

Actividad Antioxidante: Las fracciones obtenidas del extracto metanólico de M1 a M9 muestran actividad antiproliferativa.

Según los estudios realizados, la planta Ambrosia arborescens Miller, denominada comúnmente "marcco"; presenta principios activos que son útiles en el tratamiento de enfermedades antiproliferativa.

Se determinó la actividad antioxidante en el extracto polar metanolico de la Ambrosia arborescens Miller (marcco) por el método CUPRAC, dando un resultado de 8.35 mM TE/ g, siendo este uno de los métodos más sencillos.

Se demostró que existe una relación directamente proporcional en la actividad antioxidante de la Ambrosia arborescens Miller (marcco) con el contenido de compuestos fenólicos totales por los métodos CUPRAC y ABTS.

REFERENCIAS:

1. Cano, T. (2005). Rev. Soc. Quim. Perú. Vol.80
2. Marquez M. (2019) Tesis Facultad De Ciencias Naturales Y Formales Escuela Profesional De Química - UNSA
3. VI COLAPLAMED 2018. (2018). Teresa Cano de Terrones. [http://solaplamed.org/VI-Congreso Latinoamericano-de-Plantas-Medicinales/vi-colaplamed-2018/](http://solaplamed.org/VI-Congreso-Latinoamericano-de-Plantas-Medicinales/vi-colaplamed-2018/)



CAPACIDAD ANTIOXIDANTE Y COMPUESTOS BIOACTIVOS EN SIRACA ROJA (RUBUS URTICIFOLIUS POIR), SIRACA NEGRA (RUBUS SPARCIFLORUS J. F MACBR) Y PACRA (HESPEROMELES PALSSENSIS C.SCHENEIDER)

Carlos Ligarda, David Choque, Betsy Ramos, Abelardo Yanahuilca, Elibet Moscoso.

Universidad Nacional José María Arguedas

caligarda@unajma.edu.pe

Palabras clave: Frutos silvestres antioxidantes bioactivos.

Introducción: Actualmente el interés del mercado agroalimentario es obtener productos novedosos, naturales y de calidad. Una alternativa de alimentación saludable es el consumo de frutos silvestres alto andinos. El efecto protector de los alimentos de origen vegetal se ha atribuido a diversos nutrientes y fitoquímicos con actividad antioxidante. Caracterización botánica.

Métodos: Humedad, método gravimétrico según (AOAC, 2003), método 23.003. ; pH, método (943.02/05). (AOAC, 1990). ;Sólidos solubles, método descrito por (ISO 2173: 2003); Acidez, por titulación; índice de madurez, según (Fisher, 1999). ;Capacidad antioxidante, Brand-Williams et al. (1995); Compuestos fenólicos, (Silgleton et al., 1999).

Resultados y conclusiones: Se realizó la caracterización botánica del material estudiado, los resultados cuantitativos se analizaron a través del análisis de varianza y test de Tukey (alfa = 5 %). El fruto Pacra tuvo mayor capacidad antioxidante 405.85 (mg eq* trolox/100g), seguido por Siraca Negra 240.7 (mg eq* trolox/100g) y con menor capacidad antioxidante el fruto de Siraca Roja 185.1 (mg eq* trolox/100g); en cuanto al contenido de fenoles totales el fruto de Siraca Negra obtuvo 1560.48 mg de AGE/100g, seguido por el fruto de Siraca Roja con 1452.07 mg de AGE/100g de y por último el fruto de Pacra con 1307.08 mg de AGE/100g. Los frutos silvestres demostraron ser una fuente importante de compuestos bioactivos, además, presentaron una elevada capacidad antioxidante.

Referencias:

1. Repo de Carrasco, Ritva, & Encina Zelada, Christian René. (2008). Determinación de la capacidad antioxidante y compuestos bioactivos de frutas nativas peruanas. Revista de la Sociedad Química del Perú.
2. Muñoz Jáuregui, Ana María, Ramos-Escudero, D. Fernando, Alvarado-Ortiz Ureta, Carlos, & Castañeda Castañeda, Benjamín. (2007). Evaluación de la capacidad antioxidante y contenido de compuestos fenólicos en recursos vegetales promisorios. Revista Sociedad Química del Perú.
3. Farías Tapia, Rubén, Olivás Sánchez, Martha Patricia, Flores Margez, Juan Pedro, Martínez Ruiz, Nina del Rocío, & Alvarez Parrilla, Emilio. (2019). Efecto de la salinidad y nitrógeno en compuestos fenólicos y capacidad antioxidante de *Lycium berlandieri*. Universidad Nacional José María Arguedas



DETERMINACIÓN DE CANNABIDIOL (CBD) Y TERPENOIDES, DE EXTRACTO ETANÓLICO DE *Cannabis sativa* DE TIPO NO PSICOACTIVO, Y SU POTENCIAL ANTIOXIDANTE Y NEUROPROTECTOR.

Sandra Marcela Muñoz Burbano, Jhan Carlos Delgado Rodríguez, Paola Arango Romero, Ricardo Benítez Benítez

Universidad del Cauca, Valle, Colombia

marcelamb@unicauca.edu.co

Palabras clave: Cannabis sativa, Cannabidiol, terpenoides.

Introducción: Actualmente están en auge las investigaciones sobre Cannabis debido a los múltiples beneficios terapéuticos que se le atribuyen, lo que ha generado que cada vez más países legalicen para distintos fines [1]. Hay limitada información sobre Cannabis cultivada en el departamento del Cauca por lo que es importante su investigación.

Métodos: Se analizó un extracto etanólico de Cannabis sativa no psicoactivo obtenido por percolación, mediante Cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masas (CG-EM). Se utilizó patrón de Cannabidiol (CBD) (Restek Cat.# 34011) y un kit de terpenos (Std #1. Marca Restek).

Resultados y conclusiones: Se obtuvo un porcentaje de CBD de 13,0 % (%p/p) y una relación de CBD/ Δ^9 -THC de 11. Por otro lado, se encontraron 10 terpenoides correspondientes al 1,65% (%p/p), siendo el β -mirceno y el β -cariofileno los más abundantes, con 0,33 y 0,24% respectivamente. De acuerdo con la literatura, el CBD tiene efectos sobre los receptores activados por proliferadores de peroxisomas, que junto con receptores del sistema endocannabinoide, participa en procesos de neuroprotección [2], los cuales pueden involucrar mecanismos antioxidantes [3]. Por lo anterior, el extracto obtenido rico en CBD, tiene potencial como neuroprotector y antioxidante. De acuerdo con la literatura, el efecto terapéutico de los extractos ricos en CBD es mayor en comparación al CBD puro, en lo denominado efecto séquito [4], por lo que, si analizamos los resultados, los terpenoides, como el β -cariofileno pueden potenciar la actividad antioxidante y neuroprotectora.

Referencias:

1. Mudge, E. M. Chemometrics and metabolomics of Cannabis sativa L. University of British Columbia, 2019.
2. Maroon, J.; Bost, J., Review of the neurological benefits of phytocannabinoids. Surgical neurology international 2018, 9, 91-103.
3. Borges, R. S.; da Silva, A. B. F., Chapter e12 - Cannabidiol as an Antioxidant. In Handbook of Cannabis and Related Pathologies, Preedy, V. R., Ed. Academic Press: San Diego, 2017; pp e122-e130.
4. Pamplona, F. A.; da Silva, L. R.; Coan, A. C., Potential Clinical Benefits of CBD Rich Cannabis Extracts Over Purified CBD in Treatment-Resistant Epilepsy: Observational Data Meta-analysis. Front Neurol 2018, 9, 759.



IMPACT ON THE EXTRACTION, ISOLATION AND ANTIOXIDANT ACTIVITY OF PHENOLIC COMPOUNDS FROM USNEA CORNUTA KÖRB. MEDIATED BY GREEN SOLVENTS AND MICROWAVE HEATING

Grover Castañeta¹, Carlos Areche¹, Reinaldo Vargas ², Olimpo García-Beltrán³, Mario Simirgiotis ⁴, Beatriz Sepúlveda⁵

¹Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Casilla 653, Santiago, Chile. ²Departamento de Biología, Universidad Metropolitana de Ciencias de la Educación, Ñuñoa, Santiago, Chile. ³Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas, Universidad de Ibagué, Carrera 22 Calle 67, Ibagué 730002, Colombia. ⁴Instituto de Farmacia, Facultad de Ciencias, Universidad Austral de Chile, Valdivia, 5090000, Chile. ⁵Departamento de Ciencias Químicas, Universidad Andrés Bello, Campus Viña del Mar, Quillota 980, Viña del Mar, Chile.

areche@uchile.cl

Many solvents used in organic processes are volatile organic compounds, which inevitably lead to environmental pollution and the replacement by a suitable alternative is one of the main topic in green chemistry. In this study, isolation and purification of lichen substances from *Usnea cornuta* were performed using conventional solvents, green solvents and green technologies for comparative purposes. In addition, several lichen compounds were tentatively identified by UHPLC/ESI/MS/MS. Two green solvents, limonene and ethyl lactate, were compared to methanol regarding their extraction properties and antioxidant capacities, determined by DPPH free radical scavenging assay, ORAC and Ferric reducing assays. Untargeted metabolomics by high resolution UHPLC-MS/MS tentatively identified 14 compounds from the methanolic extract, 4 from limonene extract, and 20 metabolites from ethyl lactate extract. The green extract of ethyl lactate showed a similar antioxidant capacity to toxic methanol extract, except at ORAC assay where it was higher. Therefore, ethyl lactate can replace methanol, to provide more sustainable green chemistry methods.

References:

1. Calla-Quispe, E., Robles, J., Areche, C., Sepulveda, B., 2020. *Front. Chem.* 8, 450. <https://doi.org/10.3389/fchem.2020.00450>
2. Castro, O.N., Benites, J., Rodilla, J., Santiago, J.C., Simirgiotis, M., Sepulveda, B., Areche, C., 2017. *Chromatographia* 80, 967–973. <https://doi.org/10.1007/s10337-017-3304-4>
3. Chemat, F., Abert-Vian, M., Fabiano-Tixier, A.S., Strube, J., Uhlenbrock, L., Gunjevic, V., Cravotto, G., 2019. *TrAC Trends Anal. Chem.* 118, 248-263. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.trac.2019.05.037>



EFFECTO ANTI-BIOFILM DE ACEITES ESENCIALES DE PLANTAS MEDICINALES AROMÁTICAS SOBRE *Salmonella enterica* SEROVARIEDAD ENTERITIDIS ATCC 13076

Guillín-Rincón Y., Cáceres M, Hidalgo W, Ortiz C

Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

yuliani179@hotmail.com

Palabras clave: anti-biofilm; aceites esenciales; *Salmonella*

Resumen: Las infecciones por *Salmonella* asociadas a la formación del biofilm siguen siendo un problema de salud pública, debido a que el biofilm confiere mayor resistencia a los antibióticos¹. Por lo tanto, surge la necesidad de encontrar nuevas estrategias terapéuticas². En este sentido, los aceites esenciales (AE) han generado resultados prometedores³. Se evaluó el efecto anti-biofilm de 20 AE sobre *Salmonella* Enteritidis. Los AE fueron suministrados y caracterizados por el CENIVAM. El efecto anti-biofilm se evaluó mediante el método semicuantitativo de tinción con cristal violeta⁴. Análisis de la estructura e integridad del biofilm fue explorado por microscopía electrónica de barrido (SEM). Los AE que presentaron propiedades anti-biofilm fueron aquellos codificados como BIO-RETO 001, BIO-RETO 003, BIO-RETO 005, BIO-RETO 008, BIO-RETO 018 y BIO-RETO 019 con un porcentaje de inhibición >55% en todos los casos. Las concentraciones mínimas inhibitorias del biofilm (CMIB) de los AE variaron entre 0.25 mg/mL y 1.5 mg/mL, siendo el AE BIO-RETO 018 extraído de la planta *Lippia organoides* quimiotipo Timol-Carvacrol el que presentó la mayor actividad anti-biofilm, con un porcentaje de inhibición del 80% a una concentración de 0.25 mg/mL. De igual manera, las micrografías SEM evidenciaron cambios en la densidad celular, en la matriz de polímeros extracelulares y en la morfología microbiana. Los AE con mayor actividad anti-biofilm presentan un alto contenido de monoterpenos oxigenados, a los cuales se le ha atribuido su actividad antimicrobiana. Los resultados de la actividad biológica de los AE demuestran su uso potencial en el desarrollo de nuevos agentes fitoterapéuticos.

Referencias

1. Koo, H., Allan, R., Howlin, R., Stoodley, P., & Hall-Stoodley, L. (2017). Targeting microbial biofilms. *Nature Reviews Microbiology*, 15(12), 740–755.
2. Olsen, I. (2015). Biofilm-specific antibiotic tolerance and resistance. *European Journal of Clinical Microbiology and Infectious Diseases*, 34(5), 877–886
3. Zhang, Y., Kong, J., Xie, Y., Guo, Y., Cheng, Y., Qian, H., & Yao, W. (2018). Essential oil components inhibit biofilm formation in *Erwinia carotovora* and *Pseudomonas fluorescens* via anti-quorum sensing activity. *LWT*, 92(1800), 133–139.
4. O'Toole, G. A. (2011). Microtiter Dish Biofilm Formation Assay. *Journal of Visualized Experiments*, 47, 10– 11.



DISEÑO RACIONAL Y SÍNTESIS DE DERIVADOS TIPO N_{aril}-2-(N_{disustituido})acetamida DISEÑO RACIONAL Y SÍNTESIS DE DERIVADOS TIPO

Lorena Camargo-Ayala, Luis Prent-Peñaloza, Mauricio Bedoya, Margarita Gutiérrez, Wendy González

Universidad de Talca, Chile

loreca17@gmail.com

Palabras claves: Fibrilación auricular, diseño racional, canales iónicos, Naril-2-(N_{disustituido})acetamida.

Distintas herramientas bioinformáticas han permitido comprender procesos fisiológicos, a través de simulaciones que ofrecen una visión molecular de las interacciones ligando-receptor, dando información descriptiva y precisa para el diseño y síntesis de nuevos compuestos. Los canales iónicos son de gran relevancia como blancos terapéuticos por su rol en distintas patologías. Varios canales iónicos son expresados en las aurículas (Nav1.5, Kv1.5 y TASK-1) y constituyen un blanco terapéutico para la fibrilación auricular (FA), la arritmia más común y un factor de riesgo importante en los accidentes cerebrovasculares. Los bloqueadores simultáneos de estos canales podrían convertirse en estrategias innovadoras contra la FA. El potencial de acción (PA) de un cardiomiocito se inicia por la despolarización de la membrana a través de los canales Nav1.5. Las corrientes de repolarización se llevan a cabo por canales de potasio; los canales Kv1.5 expresados en aurículas, pero no en ventrículos, y los canales K2P, TASK-1, pueden contribuir al PA. Los bloqueadores simultáneos de estos canales, podrían convertirse en estrategias innovadoras contra la FA, siguiendo el paradigma de la polifarmacología. Los sistemas usados en este estudio estarán basados en anestésicos locales (AL) con capacidad antiarrítmica que han mostrado bloqueo de los canales auriculares convirtiéndose en fármacos potencialmente efectivos para el tratamiento de la FA. El propósito principal de este estudio es obtener a través de síntesis orgánica, mediante diseño racional a partir de las características comunes de los AL, nuevas moléculas de tipo N-aril-2-(N disustituido)acetamida capaces de inhibir la función de los canales iónicos presentes en la aurícula.

Referencias

1. Ravens, U.; Poulet, C.; Wettwer, E.; Knaut, M. Atrial Selectivity of Antiarrhythmic Drugs. *J. Physiol.* 2013, 591 (17), 4087–4097. <https://doi.org/10.1113/jphysiol.2013.256115>.
2. Kiper, A. K.; Rinné, S.; Rolfes, C.; Ramírez, D.; Seebohm, G.; Netter, M. F.; González, W.; Decher, N. Kv1.5 Blockers Preferentially Inhibit TASK-1 Channels: TASK-1 as a Target against Atrial Fibrillation and Obstructive Sleep Apnea? *Pflugers Arch. Eur. J. Physiol.* 2015, 467 (5), 1081–1090. <https://doi.org/10.1007/s00424-014-1665-1>.
3. Nguyen, P. T.; DeMarco, K. R.; Vorobyov, I.; Clancy, C. E.; Yarov-Yarovoy, V. Structural Basis for Antiarrhythmic Drug Interactions with the Human Cardiac Sodium Channel. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* 2019, 116 (8), 2945–2954. <https://doi.org/10.1073/pnas.1817446116>.



CARACTERIZACIÓN BIOLÓGICA DE METABOLITOS SECUNDARIOS DE PLANTAS EN UN MODELO DE *Leishmania (Viannia) braziliensis*

Laura Marcela García, Diana Paola Peña, Mary Elizabeth Salazar, Elena E. Stashenko, Jairo René Martínez, Patricia Escobar.

Universidad Industrial de Santander, Colombia

pescobar@uis.edu.co

Palabras clave: Leishmania, cribado_fenotípico, terpenos, interacciones_farmacológicas.

Introducción: Diferentes metabolitos secundarios de plantas (MSP) han mostrado un rango de actividades biológicas contra microorganismos patógenos.⁽¹⁾ En la búsqueda de nuevas moléculas para el tratamiento de la leishmaniasis cutánea (LC) se propuso evaluar los efectos de 40 MSP en parásitos de *L. (V.) braziliensis* y en células Vero y THP-1.

Métodos: En un cribado fenotípico con 34 terpenos, 3 bencenoides, 2 compuestos oxigenados, 2 fenoles, 1 éster acético se evaluó su potencia contra parásitos y células, la actividad antioxidante y la producción de óxido nítrico. En 4 MSP se evaluaron las interacciones farmacológicas, la actividad cicatrizante y la capacidad antiinflamatoria.^(2,3)

Resultados: Algunos MSP fueron activos contra promastigotes (MSP-21,33,31,4,19,22, IC₅₀ 9,0-72,1), amastigotes axénicos (MSP-21,4,33,31,19, IC₅₀ 10,3-65,8) y amastigotes intracelulares (MSP 21,33,31,22, IC₅₀ 6,3-98,4) de *L. (V.) braziliensis*. Los MSP 4,19,21-22,31 mostraron IS>3

En las células Vero, los MSP-15,21,31,33,34 mostraron CC₅₀ 19,9-69,8 y en las células THP-1 los MSP 21,33 mostraron CC₅₀ 60,0.

Los MSP-21-22,19,33 mostraron un ED₅₀ 20,1-343,7 µg/mL en su capacidad de capturar el radical DPPH; ninguno de los MSP fue capaz de inducir la migración de las células Vero frente al control ni de producir nitritos por parte de las células Vero y THP-1.

Los MSP-21,22,31,33 se unieron a citoquinas proinflamatorias como el TNF α y los MSP-22 y 33 presentaron interacción de tipo sinérgico en el radio 1:4 (22:33) en los promastigotes y en la captación del radical DPPH.

Los MSP-21,22,31,33 y la combinación MSP-22 y 33 son compuestos candidatos a líderes de serie o para la continuación en su desarrollo en estudios preclínicos de LC.

Referencias:

1. Gervazoni, L. F. O.; Barcellos, G. B.; Ferreira-Paes, T.; Almeida-Amaral, E. E. Use of natural products in leishmaniasis chemotherapy: An Overview. *Front Chem.* **2020**, *8*, 579891, DOI: 10.3389/fchem.2020.579891.
2. Neira, L. F.; Mantilla, J. C.; Stashenko, E. E.; Escobar, P. Toxicidad, genotoxicidad y actividad anti-Leishmania de aceites esenciales obtenidos de cuatro (4) quimiotipos del género *Lippia*. *Bol. Latinoam. Caribe Plant Med. Aromat.* **2018**, *17*, 68–83.
3. Vittorazzi, C.; Endringer, D. C.; Andrade, T. U.; Scherer, R.; Fronza, M. Antioxidant, antimicrobial and wound healing properties of *Struthanthus vulgaris*. *Pharm. Biol.* **2016**, *54*, 331-337, DOI: 10.3109/13880209.2015.1040515.



CARACTERIZACIÓN DEL ACOPLAMIENTO MOLECULAR DE FLAVONOIDES AISLADOS DE CHROMOLAENA TACOTANA CON LA PROTEÍNA XIAP.

Aguacía Pedroza M¹, Muñoz Cendales D², Méndez Callejas G², Celis Zambrano C³

¹Medical student. Biomedical Research Group and Applied Human Genetics Universidad de Ciencias Aplicadas y Ambientales, 222 street # 55-37, Bogotá D. C. Colombia. ²PhD/Proffesor, Universidad de Ciencias Aplicadas y Ambientales, 222 street # 55-37, Bogotá D. C. Colombia. ³PhD/Proffesor, Pontificia Universidad Javeriana, 7ma avenue # 40-62, Bogotá D. C. Colombia.

crispin.celis@javeriana.edu.co

Palabras claves: Cáncer, Flavonoides, Chromolaena tacotana, proteína-XIAP, Dominio-BIR3.

Introducción: La Proteína Inhibidora de la Apoptosis ligada al cromosoma X (XIAP) es considerada un posible blanco terapéutico en la patogénesis del cáncer. Los flavonoides aislados de Chromolaena tacotana podrían inhibirla por lo que se busca caracterizar el acople entre 3,5,8-trihydroxy-7,4'-dimethoxyflavona y 5,4'-dihydroxy-7-methoxyflavanonol, con el dominio BIR3 de la proteína XIAP.

Metodología: Para realizar el docking molecular se utilizaron los programas PYMOL, Autodock4.2, Autogrid y el software de Maestro (Schrödinger). Se eligieron las conformaciones generadas de menor energía dispuestas en varios clústeres, analizando los residuos con los que presentó interacción y se comparó con los reportados experimentalmente para inhibidores reportados para XIAP.

Resultados y Conclusión: Los resultados obtenidos demostraron que los compuestos 3,5,8-trihydroxy-7,4'-dimethoxyflavona y 5,4'-dihydroxy-7-methoxyflavanonol identificados previamente como compuestos citotóxicos sobre varias líneas celulares de cáncer, tienen la capacidad de unirse al dominio BIR3 de la proteína XIAP, mediante interacciones de tipo hidrofóbico, puentes de hidrógeno, e interacciones π -catión, principalmente con los residuos Gly306, Leu307, Thr308 y Lys297, los cuales han sido ya reportados como residuos que intervienen en la unión de inhibidores endógenos específicos como Smac, y de forma similar a la reportada previamente para otros compuestos naturales antagonistas como la embelina. Estos datos demuestran el posible potencial anti-cáncer de los flavonoides mediante el mecanismo de inhibición de la función antiapoptótica de XIAP lo que justifica la evaluación in vitro de esta actividad y otros estudios moleculares complementarios que permitan determinar un posible uso terapéutico en células cancerosas que presentan una alta expresión de la proteína.

Referencias:

1. Cong H, Xu L, Wu Y, Qu Z, Bian T, Zhang W, et al. Inhibitor of Apoptosis Protein (IAP) Antagonists in Anticancer Agent Discovery: Current Status and Perspectives. *J Med Chem.* 2019;62(12):5750–72. Doi: 10.1021/acs.jmedchem.8b01668
2. Polykretis P, Luchinat E, Bonucci A, Giachetti A, Graewert MA, Svergun DI, et al. Conformational characterization of full-length X-chromosome-linked inhibitor of apoptosis protein (XIAP) through an integrated approach. *IUCrJ.* 2019; 6:948–57. Doi: 10.1107/S205225251901073X.
3. Rodriguez J, M. Gomez L, Gutierrez AC, Mendez-Callejas G, Reyes AI, Tellez LC, et al. Chromolaena tacotana (Klatt) R.M. King & H. Rob. Source of Flavonoids with Antiproliferative and Antioxidant Activity. *Indian J Sci Technol.* 2018;11(19):1–7. DOI: 10.17485/ijst/2018/v11i19/122872.



POTENCIAL ACTIVIDAD ANTIHIPERGLUCÉMICA IN VITRO DE DERIVADOS DE BIXINA

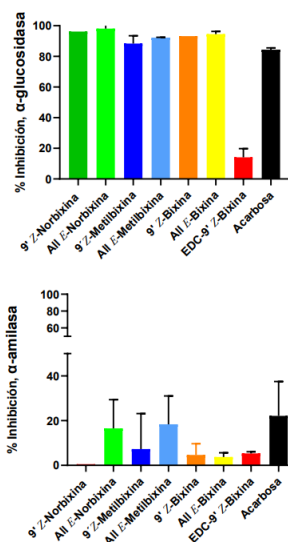
Alexander P. González-Araúz, Enrique Murillo, Nivia Ríos-Carrera, Armando A. Durant-Archibold, Víctor Cantilo-Díaz, Eunice Molinar-Toribio.

Universidad de Panamá, República de Panamá.

alexanderp.gonzalez@up.ac.pa

Palabras Claves: Diabetes, Bixina, α -amilasa, α -glucosidasa.

La diabetes mellitus tipo 2 es una enfermedad multifactorial que afecta a la población mundial, es necesario buscar moléculas con potencial actividad. Extractos de semillas de achiote (Bixa orellana) han demostrado disminuir los niveles de glucosa en sangre en modelos animal, donde la 9'Z-Bixina es el compuesto mayoritario. Se prepararon extractos cetónicos de semillas de achiote, se saponificaron para la obtención de Norbixina y por medio del uso de EDC/DMAP se obtuvo Metilbixina y EDC-Bixina. Se determinó la actividad inhibitoria de los productos con isomería 9'Z y All-E sobre las enzimas α -glucosidasa y α -amilasa. Se obtuvo Bixina, Norbixina y Metilbixina en sus isómeros 9'Z y All-E, sin embargo, la EDC-9'Z-Bixina se utilizó una única mezcla con un isómero mayoritario. Las fracciones utilizadas presentaron porcentajes de inhibición sobre α -glucosidasa superiores al 80% con excepción de EDC-Bixina que presentó un 14.13% de inhibición. En el ensayo de inhibición sobre α -amilasa se obtuvieron porcentajes de inhibición inferiores al 20±10% para todos los compuestos evaluados, con excepción de la Acarbose. No se observó diferencia entre la actividad de los estereoisómeros a una concentración de 40 μ g/mL. Estos compuestos presentan fuerte actividad inhibitoria sobre α -glucosidasa por lo que muestran un interesante potencial antihiperglucémico debido a que podrían ayudar a disminuir los picos de glucosa postprandial en pacientes de diabetes. La purificación y estudio de estos compuestos in vivo permitiría demostrar su eficacia en la disminución de los picos de glucosa postprandial.



Referencias:

1. Apostolidis E, Kwon YI, Shetty K. Inhibitory potential of herb, fruit, and fungal enriched cheese against key enzymes linked to type 2 diabetes and hypertension. *Innovative Food Sci Emerg Technol* 2007;8:46–54.
2. Roehrs, M., Figueiredo, C. G., Zanchi, M. M., Bochi, G. V., Moresco, R. N., Quatrin, A., ... & Emanuelli, T. (2014). Bixin and norbixin have opposite effects on glycemia, lipidemia, and oxidative stress in streptozotocin-induced diabetic rats. *International journal of endocrinology*, 2014.
3. Worthington V. Alpha amylase. In: Worthington V, editor. *Worthington Enzyme Manual*. Freehold, NJ: Worthington Biochemical Corp.; 1993. p. 36–41.



EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE METABOLITOS SECUNDARIOS AISLADOS DE LA ESPECIE *Steiractinia aspera* Cuatrec, POR DIFERENTES TÉCNICAS EXTRACTIVAS.

L. Gamboa, C. Jara, J. Martínez, L. Espinoza, E. Stashenko.

Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, Chile, Universidad de Valparaíso, Reñaca, Chile, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

laura.gamboa@sansano.usm.cl

Palabras clave: Antioxidante, metabolitos, *Steiractinia aspera*.

Introducción: Las plantas han demostrado poseer un importante rol como fuente de compuestos bioactivos efectivos contra una gran cantidad de patologías. Entre estos compuestos, se encuentran los polifenoles, los cuales están vinculados con un amplio rango de actividades biológicas, como antioxidantes, antifúngicos, antibacterianos, antiinflamatorios y anticancerígenos.¹

Metodología: La caracterización de fitoconstituyentes presentes en los extractos etanólicos, obtenidos por dispersión de matriz en fase sólida (MSPD) y por la extracción con solvente (SE), de la especie *Steiractinia aspera* Cuatrec, se hizo mediante el método de Folin Ciocalteu y flavonoides totales. La actividad antioxidante se evaluó mediante ensayos espectrofotométricos.²

Resultados y conclusiones: El material vegetal (MV) (hojas, flores y partes aéreas) fresco y post destilado, se secó, se molió y se tamizó, para posteriormente extraer sus metabolitos secundarios empleando como solvente extractivo, etanol:agua 70:30 v/v. Como resultado, se obtuvo mayor rendimiento de extracción con el MV fresco que con el MV post-destilado. Los rendimientos estuvieron entre 8% a 15% y 3% a 8% respectivamente.

La mayor cantidad de fitoconstituyentes se encontró en las partes aéreas del MV fresco, con valores de 141,4±2,81 mg equivalentes ácido gálico/gsustancia y 30,7±1,30 mg equivalentes de quercetina/gsustancia.

La evaluación de la actividad antioxidante se realizó mediante los ensayos de FRAP, TEAC, DPPH, y H₂O₂, los cuales mostraron que los extractos obtenidos por MSPD tuvieron mayor actividad que los extractos obtenidos por SE.

Estadísticamente, se empleó la prueba ANOVA one way y ANOVA Kruskal –Wallis, con el fin de observar las diferencias significativas p<0,05 por cada grupo de datos.

Referencias:

1. Badal, S.; Delgoda, R. *Pharmacognosy, fundamentals, applications and strategy*; Elsevier, Ed.; Mica Haley, 2017.
2. Tafurt García, G.; Jiménez Vidal, L.; Calvo Salamanca, A. Antioxidant capacity and total phenol content of *Hyptis* Spp., *P. Heptaphyllum*, *T. Panamensis*, *T. Rhoifolia*, and *Ocotea* Sp. *Rev. Colomb. Química* 2016, 44 (2), 28–33. <https://doi.org/10.15446/rev.colomb.quim.v44n2.55217>.
3. Güneş, A.; Kordali, Ş.; Turan, M.; Usanmaz Bozhüyük, A. Determination of antioxidant enzyme activity and phenolic contents of some species of the Asteraceae family from medicinal plants. *Ind. Crops Prod.* 2019, 137 (May), 208–213. <https://doi.org/10.1016/j.indcrop.2019.05.042>.



UNA VARIANTE ENZIMÁTICA DEL ENSAYO COMETA PARA LA DETECCIÓN DEL DAÑO GENÉTICO PRODUCIDO POR LA RADIACIÓN UV EN FIBROBLASTOS HUMANOS.

Silvia Ximena Barrios Martínez, Raquel Elvira Ocazonez, Jorge Luis Fuentes Lorenzo

Universidad Industrial de Santander (UIS), Bucaramanga, Colombia.

silvixi88@hotmail.com

Palabras clave: Ensayo Cometa, Fibroblastos, Radiación UV, Dímeros de pirimidina ciclobutano.

Introducción: Las variantes enzimáticas del ensayo Cometa permiten el estudio de daños en el ADN, incluyendo los producidos por la radiación UV. Entre las variantes más efectiva a tales fines, se encuentra la que utiliza la enzima EndoV-T4 que reconoce y corta segmentos de ADN que contienen dímeros de pirimidina ciclobutano (CPD).

Metodología: El presente estudio se realizó en fibroblastos humanos XP4PA(XPC). Se evaluó la citotoxicidad de la radiación UV (0.002–0.10 J/cm²), mediante la tinción azul de tripano. Para el ensayo Cometa, las células fueron irradiadas (0.003-0.007 J/cm²), y lisadas con digestión enzimática usando proteinasa K (0.19 mg/mL, 37°C/1h) y endoV-T4 (20 U, 37°C/30min).

Resultados y conclusión: Las dosis letales de radiación UV obtenidas en fibroblastos humano XP4PA fueron las siguientes: DL50 = 0.007 J/cm², DL30 = 0.004 J/cm² y DL20 = 0.003 J/cm². Se evidenció un incremento de las categorías de daños tipo 3 y 4 con el incremento de la dosis. El valor de GDI en los núcleos de células no irradiadas (niveles de daños basales) resultó superior cuando se usó la digestión enzimática con EndoV-T4 que cuando no se usó (GDI = 1.26 ± 0.37 & 0.50 ± 0.06). En ambos tipos de experimentos, este índice de daño genético mostró una clara dependencia de la dosis de radiación, siendo útil para la detección específica de CPD a partir de la dosis letal DL50 = 0.007 J/cm². La variante enzimática del ensayo Cometa que usa EndoV-T4 es útil para la detección de daños genéticos producidos por la radiación UV.

Referencias:

1. Collins, A. R., Mitchell, D. L., Zunino, A., Wit, J. D., & Busch, D. (1997). UV-sensitive rodent mutant cell lines of complementation groups 6 and 8 differ phenotypically from their human counterparts. *Environmental and molecular mutagenesis*, 29(2), 152-160.



DISEÑO RACIONAL Y SÍNTESIS DE ANÁLOGOS DE ISOBENZOFURANONA COMO POTENCIALES AGENTES ANTICONVULSIVANTES FRENTE A CANALES DE SODIO TIPO NAV1.2.

Diego Fernando León Vargas, Paola Andrea Cuervo Prado, Fabian Orozco López, Mario Francisco Guerrero Pabón

Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

difleonva@unal.edu.co

Palabras Claves: Isobenzofuranona, Anticonvulsivantes, Análogos y síntesis.

Introducción: La epilepsia es una enfermedad que afecta mundialmente 50 millones de personas, el 30% de esta población resulta resistente a los tratamientos farmacológicos actuales. Considerando algunos antecedentes del núcleo isobenzofuranónico en cuanto a su bioactividad en SNC, es de interés diseñar y evaluar análogos estructurales para proponer nuevas opciones terapéuticas (1-3).

Métodos: Se realizó cribado virtual a un grupo de 51 moléculas donde se identificaron las 10 más prometedoras desde el punto de vista de las propiedades ADMETox y del acoplamiento molecular frente al canal de sodio Na_v1.2, las moléculas seleccionadas fueron sintetizadas y caracterizadas mediante técnicas espectroscópicas

Resultados y conclusiones: Por medio del acoplamiento molecular y la predicción de propiedades ADMETox fue posible identificar compuestos heterocíclicos con núcleo isobenzofuranónico que presentaron las mejores interacciones con los residuos aminoácidos de interés (Tyr1771, Phe1764, Leu465 e Ile1469) en el canal de sodio Na_v1.2 con código PDB 6J8E y que exhibieron propiedades ADMETox destacadas en comparación con fármacos de referencia como carbamazepina, lamotrigina y fenitoína. Adicionalmente, por medio de la reacción la 3-hidroxiisobenzofuran-1(3H)-ona (ácido o-formilbenzónico) y compuestos con metileno activos o acetofenonas fue posible obtener intermedios de que en un paso subsiguiente reaccionarán con nucleófilos, para así obtener las Isobenzofuranonas 3-sustituidas seleccionadas in silico cuya actividad anticonvulsivante será evaluada in vivo utilizando modelo murino.

Referencias:

1. Sitio web organización mundial de la salud. <https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/epilepsy#:~:text=La%20epilepsia%20es%20una%20enfermedad,de%20ingresos%20bajos%20y%20medianos>. (Recuperado febrero de 2021)
2. Chung, K. **Molecular Pharmacology**. 1998. 54, 712-721. A common anticonvulsant binding site for phenytoin, carbamazepine, and lamotrigine in neuronal Na⁺ channels.
3. Di Mola, A., Palombi, L., & Massa, A. **Current Organic Chemistry**. 2012. 16 – 19, 2302-2320. Active Methylene Compounds in the Synthesis of 3-substituted Isobenzofuranones, Isoindolinones and Related Compounds.



Encapsulamiento del Péptido Bioactivo Δ M4 en Liposomas de DMPC y su Potencial Uso en el Tratamiento del Cáncer de Piel

Estefanía Fandiño Devia¹, Vanessa Gallego¹, Luz Adriana Gutiérrez², Marcela Manrique Moreno¹.

¹Instituto de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia, Medellín, Antioquia.

²Facultad de Ciencias Agropecuarias Corporación Universitaria Lasallista. Medellín, Colombia.

marcela.manrique@udea.edu.co

Palabras claves: Encapsulación, Liposomas, Cáncer, Péptidos.

Introducción: Los casos de cáncer de piel aumentan significativamente cada año¹, haciendo necesario la evaluación de nuevos agentes terapéuticos como los péptidos bioactivos^{2,3}. El objetivo de esta investigación es evaluar la eficiencia de encapsulamiento del péptido Δ M4 en liposomas de fosfatidilcolina con potencial uso en el tratamiento del cáncer de piel.

Métodos: Liposomas de fosfatidilcolina y fosfatidilcolina:estearilamina fueron preparados por la técnica de hidratación de película. El tamaño y el potencial ζ de los liposomas fueron evaluados por el método de dispersión dinámica de luz y la técnica de dispersión de luz electroforética, respectivamente. La eficiencia de encapsulación del péptido se evaluó por HPLC-DAD.

Resultados y conclusiones: Los resultados mostraron que los liposomas de fosfatidilcolina presentaron mayor eficiencia de encapsulación (73,3%) en comparación con fosfatidilcolina:estearilamina (12,9%). Esto debido a la repulsión electrostática entre las lamelas a causa de la estearilamina, lo cual genera una disminución del tamaño de los liposomas, pasando de 1761,6 nm con fosfatidilcolina a 187 nm en presencia de estearilamina. Adicionalmente, se evaluó la capacidad de encapsulación de los liposomas con tres concentraciones diferentes de péptido. Se observó que al aumentar la concentración de Δ M4, el contenido incorporado también aumentó, sin alcanzar la saturación del sistema. A concentraciones de 10, 20 y 30 μ M se obtuvieron valores de encapsulamiento de 50,9% (\pm 7,3), 61% (\pm 6,4) y 80,5% (\pm 4,7) respectivamente. A partir de los resultados obtenidos se determinaron las condiciones necesarias para el desarrollo del sistema liposomal de Δ M4, logrando encapsular una concentración superior de la IC50 requerida para los experimentos *in vitro*.

Referencias:

1. Simões F, Sousa S, Pais C. Skin cancer and new treatment perspectives: A review. *Cancer Let.* 2015;357(1):8–42.
2. De la Torre C, Domínguez L, Murguía R, Marcos D, Martínez R, Bravo J, et al. ϵ -Polylysine-Capped Mesoporous Silica Nanoparticles as Carrier of the C9h Peptide to Induce Apoptosis in Cancer Cells. *Chem - A Eur J.* 2018;24(8):1890–7.
3. Allen TM, Cullis PR. Liposomal drug delivery systems: From concept to clinical applications. *Adv Drug Deliv Rev* 2013;65(1):36–48.

DETERMINACIÓN DEL POTENCIAL ANTIFÚNGICO DE ALQUILBENCENOIDES PROVENIENTES DE *Piper ceanothifolium* Kunth FRENTE A FITOPATÓGENOS ASOCIADOS AL CULTIVO DE CACAO.

Yudy S. Mahecha-Jimenez, Juliet A. Prieto-Rodríguez, Cristobal Ladino-Vargas, Oscar J. Patiño-Ladino

Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia, Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia.

ymahechaj@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Piper, antifúngico, Theobroma cacao, hongos fitopatógenos

En la última década el cacao se ha convertido en uno de los productos agrícolas que más aportan al desarrollo socioeconómico del país. Sin embargo, los rendimientos en producción son bajos, afectando entre un 40 a un 100% los cultivos de cacao dependiendo del manejo aplicado. Actualmente para el control de estos fitopatógenos se hace uso de sustancias químicas poco selectivas y nocivas para el medio ambiente (1). Por lo tanto, es una necesidad imperiosa el desarrollo de alternativas efectivas y seguras, encontrándose que los agentes fitosanitarios son una alternativa interesante debido a que algunas especies como las presentes en el género Piper se han reportado por tener actividad antifúngica frente a hongos que afectan cultivos de interés comercial (2,3). El presente trabajo contribuye a la búsqueda de sustancias potenciales para el control de hongos que afectan al cacao mediante la realización de un estudio fitoquímico biodirigido sobre las inflorescencias de *P. ceanothifolium*. La metodología comprendió el fraccionamiento del extracto etanólico por CLV con solventes de diferente polaridad. Al extracto y fracciones resultantes se les determinó su efecto sobre los fitopatógenos mediante el ensayo de inhibición de crecimiento micelial (4). La fracción de diclorometano fue la de mayor potencial antifúngico por lo que se sometió a purificación haciendo uso de diferentes técnicas cromatográficas preparativas para aislar los constituyentes bioactivos. Los compuestos fueron elucidados empleando técnicas espectroscópicas y/o espectrométricas, y por comparación con datos de la literatura, además se les determinó la CI50 frente a los hongos evaluados mediante el ensayo de inhibición de crecimiento micelial. Del estudio fitoquímico biodirigido se aislaron tres hidroquinonas preniladas (1 a 3) y un cromeno (4). A partir de uno de los constituyentes mayoritarios se realizó la síntesis de un derivado por ciclación intramolecular de tipo oxaMichael (5), para de esta forma obtener una cromona (5). Los compuestos aislados e identificados se reportan por primera vez para la especie, pero estos han sido identificados previamente en otras especies del género Piper, a excepción del compuesto 1 que se reporta por primera vez en el género. Finalmente se determinó que los compuestos con mayor potencial antifúngico fueron el compuesto 5 (CI50 de $16,91 \pm 2,15 \mu\text{M}$) para *F. solani* y el compuesto 1 (C50 de $30,47 \pm 2,10 \mu\text{M}$) para *L. theobromae*. De esta manera el presente trabajo contribuye a la búsqueda de nuevas sustancias antifúngicas frente a fitopatógenos asociados a enfermedades en cultivos de cacao y al primer estudio químico y de actividad biológica para la especie *P. ceanothifolium*.

REFERENCIAS

1. (1) Pabón, M. G., Herrera-Roa, L. I., & Sepúlveda, W. S. (2016). Socioeconomic and productive characterization of cocoa crops in the Santander Department (Colombia). *Revista Mexicana de Agronegocios*, 20(38), 283-294.
2. Guest, D. (2007). Black pod: diverse pathogens with a global impact on cocoa yield. *Phytopathology*, 97(12), 1650-1653.
3. Mbenoun, M., Momo Zeutsa, E. H., Samuels, G., Nsougou Amougou, F., & Nyasse, S. (2008). Dieback due to *Lasioidiplodia theobromae*, a new constraint to cocoa production in Cameroon. *Plant Pathology*, 57(2), 381-381.
4. Martínez de la Parte, E., & Pérez Vicente, L. (2015). Incidencia de enfermedades fúngicas en plantaciones de cacao de las provincias orientales de Cuba. *Revista de Protección Vegetal*, 30(2), 87-96.



EVALUACION DE LA ACTIVIDAD ANALGÉSICA DE UN EXTRACTO DE CANNABIS CON ALTO CONTENIDO DE CANNABIDIOL, ENCAPSULADO EN MICELAS PEG-PCL. ESTUDIOS IN VIVO.

Yoreny Román Vargas, Julián David Porras Arguello, Dora María Benjumea Gutiérrez, León Darío Pérez Pérez, Lucas Hernán Blandón Naranjo

Universidad de Antioquia, Colombia, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

yoreny.roman@udea.edu.co

Palabras claves: Cannabis, cannabidiol, encapsulación, micelas poliméricas.

Los fitocannabinoides Δ^9 -tetrahidrocannabinol (THC) y cannabidiol (CBD) han probado tener actividad para el tratamiento de enfermedades como el Alzheimer, cáncer, dolor etc (Maurya and Velmurugan 2018)(Mlost, Bryk, and Starowicz 2021). La baja solubilidad en agua asociada a estas sustancias conduce a una pobre biodisponibilidad oral. Esto sumado a que los vehículos para la administración de estos fármacos han mostrado problemas de baja capacidad de encapsulación (Cherniakov et al. 2017), hace necesario el desarrollo de nuevos vehículos que permitan mejorar su biodisponibilidad.

En este trabajo se presentan resultados de la comparación entre la actividad analgésica de extractos con alto contenido de CBD sin encapsular y encapsulados en nanopartículas de polietilenglicol-policaprolactona (PEG-PCL). Se evaluaron tres dosis diferentes del extracto crudo y encapsulado siguiendo un modelo metodológico de dolor térmico en ratones, que usa como control positivo morfina. Posteriormente, se comparó la capacidad de encapsulación de CBD y de diferentes pesos moleculares de PEG-PCL, al tiempo que se comparó para un mismo peso molecular la influencia de distintos ácidos grasos y la cantidad de ácidos injertado. Finalmente, con el mejor sistema de encapsulación de PEG-PCL se comparó la actividad analgésica del extracto de cannabis con alto contenido de CBD libre y encapsulado, encontrando que la absorción oral los cannabinoides se ve favorecida gracias a la protección del principio activo del ambiente agreste en el tracto gastrointestinal.



OPTIMIZACIÓN DE LA EXTRACCIÓN ASISTIDA CON ULTRASONIDO DE ANTIOXIDANTES DESDE HOJAS DE CHIA; EVALUACIÓN DE LA CAPACIDAD ANTIOXIDANTE DE 6 GENOTIPOS

Gabriela Maturana A., María Carolina Zúñiga López.

Universidad de Chile, Santiago de Chile, Chile.

gabriela.maturana.alvarez@gmail.com

Palabras clave: Chía, optimización extracción, antioxidantes

Introducción: La chía es una planta originaria del sur de México conocida por sus semillas. Actualmente sus hojas son un desecho de producción de semillas a pesar de poseer metabolitos secundarios con posibles aplicaciones en medicina. En este trabajo se optimizó la extracción de compuestos antioxidantes, evaluando la capacidad antioxidante (CA).

Materiales y Métodos: La extracción se llevó a cabo con una mezcla de acetona:agua:ácido acético (70:29,5;0,5 % v/v). Se aplicó ultrasonido de 44 kHz. Se utilizó un modelo Doheret de seis puntos y tres centros, modificando tanto el tiempo de ultrasonido como el tiempo de maceración posterior, maximizando la capacidad antioxidante (ORAC-FL).

Resultados y Conclusiones: Los resultados muestran un máximo de la CA a los 74 min 19 s de ultrasonido y a las 20 h 5 min de maceración. Con estas condiciones se evaluó la CA y contenido polifenólico total de 6 genotipos de chía: dos comerciales (Negra y Blanca) y 4 modificados (Tardía, Pinta, B54 y P2N54). De éstos, el que presentó mayor CA y contenido fenólico fue el genotipo Tardía, con cerca de un 30% más de CA y entre un 36% y 49% más de polifenoles totales que los genotipos comerciales. La CA se encuentra entre los 6609+-243 y los 12923+-690 umol eq trolox/100 g p.s.

Utilizando el modelo Doheret empleado se logró optimizar la extracción de compuestos antioxidantes a partir de hojas de chía. Con las condiciones de extracción óptimas se logró evaluar tanto la CA como el contenido de polifenoles totales de 6 genotipos de chía.

Referencias:

1. Amato A. et al. European Food Research Technology. 241 (2015) 615–625 2. Middleton E. et al. International Journal of Pharmacognosy 34 (1996) No 5. 344-348.



DISEÑO RACIONAL APLICADO A COMPUESTOS HETEROCÍCLICOS TIPO ISOBENZOFURANONA CON POTENCIAL ACTIVIDAD ANTICONVULSIVANTE FRENTE A CANALES DE CALCIO TIPO T.

Maira Alejandra Santos Baron, Devi Koradhi Amaya Granados, Diego Fernando León Vargas, Paola Andrea Cuervo Prado, Fabián Orozco López.

Universidad Nacional de Colombia.

masantosb@unal.edu.co

Palabras claves: Epilepsia, Isobenzofuranona, DiFAC, Anticonvulsivante

La epilepsia es una enfermedad crónica no transmisible que afecta un porcentaje importante de la población mundial.¹ El presente trabajo plantea el diseño de compuestos heterocíclicos con núcleo isobenzofuranónico y su evaluación in silico frente a canales de Calcio Tipo T; que puedan resultar eficaces y seguros en la terapéutica.

Se determinaron las propiedades fisicoquímicas y farmacocinéticas en derivados isobenzofuranónicos mediante los programas SwissAdme® y ADMET Predictor. El acoplamiento molecular frente al canal de calcio 6KZP fue realizado en Autodock 4.0 y los resultados visualizados en Discovery Studio®. Como fármacos de referencia se emplearon el ácido Valproico, Z944 y Etosuximida.

Se plantearon 66 moléculas con núcleo isobenzofuranónico, empleando estrategias de diseño racional como scaffold hopping, el diseño de fármacos basado en fragmentos y en productos naturales. Después de la predicción de las propiedades farmacocinéticas y toxicológicas², se seleccionaron 44 moléculas a partir de una comparación con los fármacos de referencia (Z944, Etosuximida y Ácido Valproico) y teniendo en cuenta una serie de criterios de rechazo y aceptación previamente establecidos.

Mediante un análisis de acoplamiento molecular se seleccionaron las 10 moléculas más promisorias, priorizando las interacciones que brindaron mayor selectividad a la molécula en su unión al canal de Calcio tipo T (Lys1462, Leu920, Leu391, Thr921 y Asn952) y sus energías de unión, comparadas con los fármacos de referencia.

Como actividades complementarias dentro del estudio in silico, se utilizará el software Dock6 y se realizará un consenso de puntuación entre los programas empleados.

Referencias:

1. Sitio web Organización Mundial de la Salud. <https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/epilepsy>. (Recuperado mayo de 2021)
2. Zhao, Y.; Huang, G.; Wu, Q.; Wu, K.; Li, R.; Lei, J.; Pan, X.; Yan, N. Cryo-EM structures of apo and antagonist-bound human Cav3.1. *Nature*. **2019**, 576 (7787), 492–497.
3. Kitchen, D. B.; Decornez, H.; Furr, J. R.; Bajorath, J. Docking and scoring in virtual screening for drug discovery: methods and applications. *Nat. Rev. Drug Discov.* **2004**, 3(11), 935-949.



POTENCIAL BIOACTIVO (ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y CONTENIDO FENÓLICO) DE EXTRACTOS DE TESTA DE SEMILLA DE *Erythrina edulis* Micheli, OBTENIDAS DE DOS LOCALIDADES DEL DEPARTAMENTO DEL TOLIMA.

Jorge Enrique Reyes Forero, Mateo Alejandro Quiñones Sanchez, Laura Judith González, Cristina Pérez Jaramillo, Walter Murillo Arango, Carlos Martín Guerra Almonacid.

Universidad del Tolima (GIPRONUT), Ibagué, Colombia.

jereyesfo@ut.edu.co

Las plantas del género *Erythrina* se encuentran distribuidas en aproximadamente 112 especies de las cuales 13 fueron reportadas en Colombia (Trujillo E. et al., 2007). Han sido reconocidas como materia prima para ornamentos y en etnomedicina para el tratamiento y/o prevención de trastornos y enfermedades principalmente del síndrome metabólico como hipertensión, diabetes y obesidad. La presencia de metabolitos secundarios ha sido destacada, tales como: su contenido de alcaloides y flavonoides, como también taninos, terpenos, por lo cual son bien conocidos etc.

Erythrina edulis (Chachafruto) es una especie nativa, considerada promisoriosa, y la única de este género con semilla comestible, con alto interés alimentario y fitofarmacológico incipiente. Este estudio se propuso evaluar el potencial bioactivo de extractos obtenidos de la testa de las semillas colectadas en dos partes del departamento del Tolima, Cajamarca vereda Tambo.

La obtención de extractos hidroalcohólicos de testa de semilla de chachafruto de cada lugar fue asistida por ultrasonido de sonda. Posteriormente, el potencial bioactivo se evaluó de manera in-vitro por medio de DPPH y ABTS^{•+} para medir su capacidad antioxidante y se cuantificaron algunos de sus fitocompuestos, fenoles totales, flavonoides y taninos.

El contenido fenólico total determinado, fue menor para el extracto de Cajamarca ($63 \pm 0,001$ mg EAG/g extracto) respecto al de Tambo ($68 \pm 0,001$ mg EAG/g extracto), mientras que el contenido de flavonoides fue mayor para Cajamarca ($69 \pm 0,001$ mg EQ/g extracto) que en Tambo ($65 \pm 0,002$ mg EQ/g extracto) y el contenido de taninos fue mayor para Cajamarca ($36 \pm 0,002$ mg EAG/g extracto) respecto a Tambo ($24 \pm 0,002$ mg EAG/g extracto). Las dos muestras evaluadas presentaron contenidos de fenoles y flavonoides superiores encontrados en otros estudios de legumbres como el frijol común (*Phaseolus vulgaris* L.) (Ha, P.T. et al., 2020; Yusnawan, E. et al., 2019; Ombra, MN et al., 2016) que variaba de 1,29 a 6,87 mg EAG/g y 9,29 mg ER/g y 1,28 a 2,35 mg EC/g respectivamente. Las actividades antioxidantes se evaluaron comparativamente mediante la capacidad de estabilización de DPPH, la cual para Cajamarca fue de $0,112 \pm 0,001$ μ mol E Trolox/mg extracto y mayor para Tambo con $0,139 \pm 0,001$ μ mol E Trolox/mg extracto y la capacidad reductora de iones ABTS^{•+} fue menor para Cajamarca ($0,711 \pm 0,003$ μ mol E Trolox/mg extracto) respecto a Tambo ($0,95 \pm 0,002$ μ mol E Trolox/mg extracto).

Los extractos mostraron actividad antioxidante y antirradical prometedora, siendo el extracto de testa de semilla de Tambo la que presenta mayor potencial de actividad antioxidante. También contenido importante de fenoles lo que justifica su uso y amplía potencial aplicación en el área biomédica, y da nuevas perspectivas de aprovechamiento.

Referencias:

1. Ha, P.T.; Tran, N.T.; Tram, N.T. and Kha, V.H. Total Phenolic, Total Flavonoid Contents and Antioxidant Potential of Common Bean (*Phaseolus vulgaris* L.) in Vietnam. *J. Agric.* **2020**. 5(4), 635–648 doi: 10.3934/agrfood.2020.4.635
2. Ombra, M.N.; d'Acerno A.; Nazzaro, F.; Riccardi, R.; Spigno, P.; Zaccardelli, M.; Pane, C.; Maione, M. and Fratianni, F. Phenolic Composition and Antioxidant and Antiproliferative Activities of the Extracts of Twelve Common Bean (*Phaseolus vulgaris* L.) Endemic Ecotypes of Southern Italy before and after Cooking. *Oxidative Med Cell Longev.* **2016**. 2016, 2-12 doi: 10.1155/2016/1398298.
3. Yusnawan, E.; Sutrisno and Kristiono A. Total Phenolic Content and Antioxidant Activity of Mung Bean Seed Cultivars from Optimized Extraction Treatment. *Bul. Palawija.* **2019**. 17(1) 1-9 doi: <http://dx.doi.org/10.21082/bulpa.v17n1.2019.p1-9>
4. Trujillo T, Bustamante GF, & Correa M. Sobre la presencia de *Erythrina ulei* Harms (Fabaceae) en Colombia. *Momentos de Ciencia.* **2007**. 4(1-2), 17-19



**MICROENCAPSULADOS DE ANTOCIANINAS EXTRAÍDAS DEL COROZO (*Bactris guineensis*)
CONTENIDAS EN ALMIDONES ACETILADOS DE ACHIRA (*Canna edulis*) Y YUCA (*Manihot sp.*)**

Ángela Obando-Mora, German E. Matiz-Melo, Yoshie A. Hata-Uribe

Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

aobandom@unal.edu.co

Palabras Clave: Microencapsulación, antocianinas, almidones acetilados y antioxidante.

Introducción: El objetivo del presente trabajo fue microencapsular una fracción enriquecida en antocianinas de *B. guineensis*, en almidones acetilados de *C. edulis* y *Manihot sp.*, con el fin de aumentar su estabilidad. El sistema microparticulado tendría uso potencial en la industria, obteniendo productos funcionales y con valor agregado en el mercado.

Métodos: El liofilizado de frutos de corozo fue separado en Amberlite XAD-7 con gradiente metanol agua, para obtener una fracción de antocianidinas, que fue microencapsulada con almidones acetilados de achira y yuca por spray-drying. Se determinó la eficiencia de encapsulación por espectrofotometría diferencial de pH. Sus actividades antiinflamatorias y antioxidante fueron evaluadas.

Resultados y Conclusiones: La fracción enriquecida de antocianinas se obtuvo separando los azúcares presentes del extracto acuoso acidificado de los frutos de Corozo, mediante cromatografía en columna. Se obtuvieron 32 fracciones, las cuales fueron analizadas por TLC, utilizando la cianidina 3-glucosido como marcador. Se identificó un Rf aproximadamente entre 0.23 en las fracciones, similar al Rf reportado para el marcador en la literatura (0.25).

La fracción enriquecida de antocianinas fue microencapsulada, usando como agente encapsulante los almidones modificados con diferentes grados de acetilación (entre el 7 y 9%, en ambos almidones). Como resultado se logró obtener 6 microencapsulados, con porcentajes de eficiencia de microencapsulación superiores al 80%. Finalmente, se evaluó la actividad antioxidante con DPPH en modelos in vitro de una fracción enriquecida de antocianinas versus los microencapsulados, para determinar si el potencial de la actividad de las antocianinas se modificó al ser encapsuladas.

Referencias:

1. Giusti, M.; Wrolstad, R. Characterization and measurement of anthocyanins by UV-visible spectroscopy. *Curr protoc anal chem.* **2001**. Unit F1-2.
2. Gharsallaoui, A.; Roudaut, G.; Chambin, O.; Voilley, A.; Saurel, R. Applications of spray drying in microencapsulation of food ingredients. *Int Food Res.* **2007**, 9,1107-21.
3. Navas, M.; Jiménez, A.; Bueno, J.; Saez, P.; Asuero, A. Analysis and antioxidant capacity of anthocyanin pigments. Part IV: Extraction of anthocyanins. *Crit Rev Anal Chem.* **2012**, 4,313-342.
4. Osorio, C.; Acevedo, B.; Hillebrand, S.; Carriazo, J.; Winterhalter, P.; Morales, A. Microencapsulation by spray-drying of anthocyanin pigments from corozo (*Bactris guineensis*) fruit. *J Agri Food Chem.* **2010**, 11,6977-6985.



BIOPROSPECCIÓN E IDENTIFICACIÓN QUÍMICA DE LOS ÁCIDOS GRASOS DE LOS ORGANISMOS MARINOS *Bursatella leachii* y *Holothuria princeps*, RECOLECTADOS EN LA BAHÍA DE CISPATÁ, CÓRDOBA, CARIBE COLOMBIANO

Gilmar Santafé Patiño, Yeiner Quiroz Lobo, Jorge Quirós Rodríguez.

Universidad de Córdoba, Montería, Colombia.

gsantafep@gmail.com

INTRODUCCIÓN: Las babosas y los pepinos de mar se caracterizan por biosintetizar compuestos químicos usados en la medicina tradicional y como alimento.¹ En este trabajo se estudiaron las actividades bactericida y antioxidante de la babosa *Bursatella leachii* y del pepino de mar *Holothuria princeps*, además de caracterizar sus ácidos grasos.

METODOLOGÍA: A los extractos metanólicos se les evaluó su actividad bactericida por microdilución frente a *E. coli*, *P. aeruginosa*, *S. aureus*, *K. pneumoniae* y *E. faecalis*. La actividad fungicida se evaluó con *C. albicans*. La actividad antioxidante se determinó utilizando ABTS^{•-} y DPPH. La CG/EM permitió caracterizar los ácidos grasos.²

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: En *B. leachii*, se identificaron esteroides cetónicos: colest-3,5-dien-7-ona y colest-4-en-3-ona; los ácidos grasos fueron derivatizados formando ésteres metílicos identificándose 29 compuestos que mostraron gran variedad en la longitud de las cadenas carbonadas y en su grado de insaturación. La actividad bactericida reveló una mayor capacidad inhibitoria a mayores concentraciones; el análisis estadístico mostró disminución del crecimiento microbiano en todos los microorganismos. Por su parte, en *H. princeps* se identificaron 16 ácidos grasos, caracterizados por las diferencias en la longitud de sus cadenas carbonadas y en sus grados de insaturación. También mostró importante actividad bactericida. En ambas especies los ácidos más abundantes fueron hexadecanoico y octanoico. Los valores IC50 de la capacidad antioxidante utilizando DPPH y ABTS^{•-} fueron para *H. leachii* 2921 y 2211 y para *H. princeps* 2856 y 2165 ppm, respectivamente. De los resultados obtenidos puede deducirse que los organismos estudiados producen compuestos químicos con capacidad bactericida y antioxidante.

REFERENCIAS

1. Chi, R.; Cheung, F.; Ng, T.; Wong, J. *Marine Biotechnology*, **2015**, 13, 4006-4043 (2) Quiroz, Y.; Santafé, G.; Quirós, J. *Rev. Biol. Trop.* **2021**, 69, 36-44.



EVALUACIÓN ANTIMICROBIANA DE ACEITES ESENCIALES FRENTE A *Moniliophthora roreri* y *Phytophthora* spp AISLADOS DE *Theobroma cacao* L.

Andrea Jimenez-González, Diannefair Duarte, Oscar Darío Ramírez, Marcial Fuentes Estrada, Elena Stashenko, Olimpo García Beltrán

Beltrán

Universidad del Tolima, Colombia, FEDERACION NACIONAL DE CACAOTEROS., Bogotá D.C., Colombia, Universidad de Ibagué, Colombia, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

marcial.fuentes@unibague.edu.co

Palabras claves: Cromatografía, antimicrobianos, monilia, *Phytophthora*.

Resumen: El cacao (*Theobroma cacao* L.) ha tenido una gran importancia en el desarrollo agrícola del país debido a su alta producción y en busca de una alta calidad de cultivos la pudrición de las mazorcas causada por *Moniliophthora roreri* *Phytophthora* spp. Causando pérdidas de más del 80% en el país. El objetivo es realizar estudios en bioprospección utilizando especies vegetales para mejorar la productividad y sanidad del cultivo de cacao en Colombia, con el fin de desarrollar bioproductos que permitan un control sobre enfermedades generadas por *Phytophthora* spp. y *Moniliophthora roreri*, con el fin de mejorar las condiciones sanitarias de calidad del fruto.

Introducción: Las dos principales enfermedades fúngicas que limitan la producción de cacao en Colombia son *Phytophthora* spp., y *Moniliophthora roreri* presente en todas las regiones del país. Ambos microorganismos afectan el fruto del cacao, este trabajo se enfoca en la búsqueda de productos naturales que tengan actividad antimicrobiana sobre estos patógenos.

Materiales y métodos: Se recolectaron especies en el departamento del Tolima, a las cuales se les realizó una extracción de aceites esenciales por medio de hidrodestilación asistido por microondas. Posteriormente se realizó el aislamiento de los patógenos de frutos infectados de cacao y ensayos antimicrobianos por envenenamiento del medio, durante 12 días.

Resultados y discusión: En la presente investigación se logró comparar la actividad antimicrobiana de 10 tipos de aceites esenciales de especies vegetales pertenecientes a las familias Rutaceae y Piperaceae con rendimiento alrededor del 1%. La caracterización fue realizada por GC/MS, donde se logró identificar una variedad de compuestos con gran potencial antimicrobiano como Germacreno D que presenta antecedentes antimicrobianos en el manejo fitosanitario del cultivo del cacao que al ser evaluados mostraron una actividad promisorio sobre los microorganismos *Moniliophthora roreri* y *Phytophthora* spp., microorganismos que afectan la producción del cacao en Colombia.

Referencias:

1. U. Krauss, G. Martijn, E. Hidalgo, A. Martínez, T. Stirrup, C. Arroyo, J. García, M. Palacios, M. Biological Control, 2006, 39, 232-239.



COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LOS ACEITES ESENCIALES DE *Cúrcuma longa* (ZINGIBERACEAE) EXTRAÍDO POR HIDRODESTILACIÓN ASISTIDA POR MICROONDAS, CON Y SIN PRETRATAMIENTO DE ULTRASONIDO

Yeferson Ospina B¹, José Leonardo Cano B, Eunice Ríos V.

Universidad del Quindío, Bogotá

yospinab_1@uqvirtual.edu.co

Palabras clave: *Cúrcuma longa*, Ultrasonido, Microondas, α -Curcumeno.

INTRODUCCIÓN: El género *Cúrcuma* de la familia Zingiberaceae posee alrededor de 80 especies. *Cúrcuma longa* es valorada, por sus efectos antiinflamatorios, antioxidantes, antimicrobianos, anticancerígenos y antivirales.¹ De los rizomas de esta especie se aíslan principalmente curcuminoides y aceites esenciales (AE).²

MÉTODOS: Los rizomas frescos y secos se sometieron a hidrodestilación asistida por microondas (HDAM), utilizando ultrasonido (US) como pretratamiento. Además, se evaluaron dos métodos de extracción, donde se varió tanto la potencia como el tiempo del microondas. El contenido metabólico se identificó por cromatografía de gases acoplado espectrometría de masas (CG-EM).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Los porcentajes de rendimiento de los AE de *Cúrcuma longa* oscilan entre 0,2288 a 0,6360%. El AE extraído de los rizomas secos mostró mejores porcentajes de rendimiento en los dos métodos (M1: 15 min y 800 W; M2: 30 min y 400 W); con respecto a los rizomas frescos. Por otro lado, el US como pretratamiento promovió un aumento significativo en los porcentajes de rendimiento en comparación con la HDAM. El α -Curcumeno y β -Turmerona son los compuestos mayoritarios de los AE y representan entre el 44 y 56% de su totalidad. El US en los rizomas frescos mostro un aumento del 32% en el contenido de α -Curcumeno con respecto los rizomas secos. La aplicación de técnicas novedosas como HDAM y US mejoran el porcentaje de rendimiento de los AE y permiten acortar los tiempos de extracción y reducir gastos energéticos.

REFERENCIAS

1. Shi, Y.; Liang, X.; et al. Ethanol Extracts from Twelve Curcuma Species Rhizomes in China: Antimicrobial, Antioxidative and Anti-Inflammatory Activities. *South African J. Bot.* **2021**, *140*, 167–172. <https://doi.org/10.1016/j.sajb.2021.04.003>.
2. Sultana, S.; Munir, N.; et al. Molecular Targets for the Management of Cancer Using Curcuma Longa Linn. Phytoconstituents: A Review. *Biomedicine and Pharmacotherapy*. Elsevier Masson s.r.l. March 1, **2021**, p 111078. <https://doi.org/10.1016/j.biopha.2020.111078>.



OPTIMIZACIÓN DE LA PRODUCCIÓN DE PÉPTIDOS ANTIMICROBIANOS EN FERMENTACIÓN SUMERGIDA POR LOTES DE *Brevibacillus sp.* PNM157

DA Cubides, FA Ramos, N Moreno-Sarmiento

Universidad Nacional de Colombia - Sede Bogotá

dacubidesm@unal.edu.co

Palabras clave: *Brevibacillus*, Control-biológico, Péptidos-antimicrobianos, Optimización.

Anualmente se pierde por encima del 30% de la producción mundial de cultivos por fitopatógenos. El control biológico es una estrategia sostenible de protección de cultivos y tradicionalmente se ha valido de la diversidad biológica del suelo, no obstante, los microorganismos marinos presentan adaptaciones metabólicas para sobrevivir en ambientes extremos.

En miras de desarrollar un bioproducto de control biológico se estudió el efecto de la composición del medio de cultivo y las condiciones de fermentación sumergida por lotes sobre la producción de metabolitos bioactivos, mediante ensayos OFAT, un diseño Plackett-Burmann y una optimización por SRM con un diseño central compuesto.

Se encontró que las condiciones de limitación de oxígeno favorecen la producción de los AMPs y cambian la proporción de los diferentes péptidos, tal que dentro de las condiciones evaluadas a una agitación de 100 rpm, 20% de llenado y una escala de 1L (Erlenmeyer) se alcanzó un incremento del 33,1% con respecto a la condición de máxima agitación. Por otra parte, las fuentes simples de carbono y las fuentes complejas de nitrógeno favorecen el crecimiento, la esporulación y la producción de AMPs. La composición óptima del medio de cultivo corresponde a glicerol (16 g/L), proteína aislada de soya 90% (25 g/L%), extracto de levadura (7g/L), CaCO₃ (2,5 g/L), MgCl₂ (1,3 g/L) y un pH inicial (7), lo cual resultó en un incremento del 83,2% de AMPs respecto al medio basal.

Referencias:

1. Ng, T. B.; Chi, R.; Cheung, F.; Wong, J. H.; Bekhit, A. A. Antibacterial Products of Marine Organisms. 2015. <https://doi.org/10.1007/s00253-015-6553-x>.
2. ang, X.; Yousef, A. E. Antimicrobial Peptides Produced by *Brevibacillus* Spp.: Structure, Classification and Bioactivity: A Mini Review. *World J. Microbiol. Biotechnol.* 2018, 34 (57), 1–10. <https://doi.org/10.1007/s11274-018-2437-4>.
3. Song, Z.; Liu, X.; Lu, C.; Yu, J.; Ju, R.; Zhao, Y.; Li, J.; Liu, K. Medium Optimization for the Antibacterial Substances Production from *Brevibacillus Brevis* XDH Using Response Surface Methodology. 2012, 345, 355–360. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/AMR.345.355>. Universidad Nacional de Colombia - Sede Bogotá



APOSICIÓN MINERAL DE EXTRACTOS DE PLANTAS EN DIENTES CON AMELOGÉNESIS IMPERFECTA

Luis G. Sequeda-Castañeda^{1,2}, Sandra J. Gutiérrez-Prieto³, Gabriela M. Penedo-Jaramillo³, Andrea V. Chacín-Nieto³, Daniel R. Contreras-Cáceres³, Pilar E. Luengas-Caicedo²

¹Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia.

²Departamento de Farmacia, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

³Departamento de Sistema Dentario, Centro de Investigaciones Odontológicas, Facultad de Odontología, Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia..

PALABRAS CLAVE: Amelogénesis imperfecta, aposición mineral, plantas medicinales.

INTRODUCCIÓN:

La amelogénesis imperfecta, son desordenes hereditarios que afectan la calidad y cantidad del esmalte, causando sensibilidad dental, susceptibilidad a la caries, fractura y hasta la pérdida de los dientes. Algunos estudios muestran que las especies vegetales que contiene metabolitos secundarios como polifenoles y flavonoides, pueden remineralizar la matriz del esmalte. Métodos: Estudio experimental in vitro, donde se tomaron cortes de dientes sanos y con amelogénesis imperfecta, a los cuales se les realizó espectroscopia Raman a 0, 24, 48 y 72 horas, posteriores a la aplicación de las sustancias control (Clinpro y Recaldent™) y experimentales (extractos de *Ilex guayusa* y *Piper marginatum*). Resultados: Los extractos totales obtenidos de las plantas nativas colombianas *Ilex guayusa* Loes y *Piper marginatum* Jacq. mostraron aposición de minerales como el fosfato y el ortofosfato, presentando un mejor comportamiento la especie *Piper marginatum* Jacq. Conclusiones: La aposición mineral de fosfatos y ortofosfatos (principales componentes del esmalte) por parte de plantas nativas colombianas como *Ilex guayusa* Loes y *Piper marginatum* Jacq., permitirá en un futuro, utilizar compuestos naturales para la remineralización de los tejidos dentales como una alternativa al flúor cuya ingesta causa efectos nocivos para el cuerpo humano.

REFERENCIAS:

1) Hotwani K, et.al. (2014). Phytodentistry: Use of Medicinal Plants. *J Complement Integr Med.* 11(4): 233–251. 2) Nagi SM, et.al. (2019). Remineralization potential of grape seed extract hydrogels on bleached enamel compared to fluoride gel: An in vitro study. *J Clin Exp Dent.* 11(5):e401-407. 3) Sequeda-Castañeda LG, et.al. (2021). Use of *Ilex guayusa* and *Piper marginatum* on oral cavity diseases: Remineralization on enamel, anticariogenic-antiperiodontal-antipathogenic activities, and phytochemical analysis. Manuscript in preparation.

INSTITUCIONES FINANCIADORAS:

(1) Vicerrectoría Académica Pontificia Universidad Javeriana y Vicerrectoría de Investigación Pontificia Universidad Javeriana, Proyectos 5392 y 7341.

(2) Departamento Administrativo de Ciencia, Tecnología e Innovación -COLCIENCIAS-.

EVALUACIÓN DEL POTENCIAL ANTIOXIDANTE E INHIBITORIO DE LA ENZIMA CONVERTIDORA DE ANGIOTENSINA (ECA) DE HIDROLIZADOS PROTÉICOS OBTENIDOS A PARTIR DE SEMILLA DE *Erythrina edulis* Micheli COLECTADO EN DEPARTAMENTO DEL TOLIMA.

Mateo Alejandro Quiñones Sanchez, Jorge Enrique Reyes Forero, Laura Judith González Enciso, Walter Murillo Arango, Carlos Martín Guerra Almonacid.

Universidad del Tolima, Ibagué, Colombia.

maqscs10@gmail.com

Las enfermedades no transmisibles constituyen la principal causa de mortalidad. Una alternativa para el tratamiento de estas involucra la búsqueda de alternativas nutricionales y terapéuticas, dado que, las enfermedades del síndrome metabólico se encuentran estrechamente asociadas a hábitos alimenticios poco saludables. Las especies del género *Erythrina* se ubican en la familia Fabaceae ^{1,2}. Este género se destaca ampliamente por sus usos, ornamental y etnomedicinal en el tratamiento y prevención de enfermedades relacionado con su contenido proteico, haciendo de ésta una fracción fundamental en su potencial bioactivo.

Erythrina edulis es una especie promisoría y nativa, por lo anterior esta investigación se propuso evaluar el potencial antioxidante e inhibitorio de ECA de hidrolizados proteicos obtenidos a partir de las semillas de *Erythrina edulis*.

Las semillas de chachafruto fueron colectadas en el municipio de Ibagué (Tolima), para la posterior obtención de harina ³. Posteriormente, se realizó un análisis bromatológico y una extracción secuencial de proteínas (Albúminas, globulinas y glutelinas) las cuales fueron liofilizadas e hidrolizadas con papaína y alcalasa en

una relación del 5% (E/S), de forma individual y secuencial para evaluar el mejor rendimiento. Posteriormente fueron preparadas soluciones a 5 concentraciones diferentes con las cuales se evaluó el potencial antioxidante in-vitro frente a los radicales DPPH y ABTS[•]. Por último, se evaluó la actividad inhibitoria de ECA. Los resultados del análisis bromatológico reportaron un contenido de proteína de 18%, valor que se encuentra entre los rangos reportados en la literatura (18-21%) siendo superado únicamente por el garbanzo, por otro lado en la extracción secuencial de proteínas se logró extraer el 77% de las proteínas, siendo las glutelinas la fracción más abundante seguidas de las albúminas y las globulinas (7s y 11s); la hidrólisis secuencial fue la más exitosa, esto debido al uso de dos enzimas (específica e inespecífica). La medición de la actividad antioxidante arrojó que los mejores resultados se obtuvieron en aquellos hidrolizados obtenidos a partir del uso secuencial de las enzimas (0,180±0,001 μmol ETrolox/mg de extracto para DPPHy 0,140±0,001 μmol ETrolox/mg de extracto para ABTS). Se obtuvo un alto potencial inhibitorio de la ECA, esta actividad podría estar asociada a la secuencia, el tipo de aminoácidos y la estructura que presente cada péptido. Los resultados obtenidos en ésta investigación son de alta relevancia al ser el chachafruto una planta promisoría con un alto valor proteico y nutricional, de donde pueden derivar otras investigaciones para evaluar su alto potencial.

Referencias:

1. Gómez Zuluaga, A. (2012) Caracterización con marcadores moleculares rams (random amplified microsatellites) de algunas especies del género *erythrina* presentes en Colombia. Universidad Nacional de Colombia.
2. Avendaño, N., and Castillo, A. (2014) El género *Erythrina* L. (leguminosae faboideae) en Venezuela. Acta Bot. Venez.
3. Arango, O., Bolaños, V., Ricaurte, D., Caicedo, M., and Guerrero, J. (2016) Obtaining a protein extract from chachafruto flour (*Erythrina edulis*). Rev. Univ. Y SALUD 14, 161–167.



CARACTERIZACIÓN PRELIMINAR MEDIANTE ¹H-RMN Y ¹³C-RMN DE DOS NUEVOS COMPUESTOS AROMÁTICOS GLICOSILADOS, AISLADOS DE LA PLANTA NATIVA DEL NORTE DE CHILE: *Skytanthus acutus*.

Valeria Guzmán, Dioni Arrieche, Lautaro Taborga, César González, Héctor Carrasco

Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, Chile. Universidad Autónoma de Chile, Santiago, Chile.

dioniarrieche@gmail.com

key-words: *Skytanthus acutus*, compuestos aromáticos glicosilados, caracterización química, aislamiento.

Skytanthus acutus Meyen se lo conoce localmente como “cuernecillo”. Estudios previos llevados a cabo en esta planta, reportaron el aislamiento de los alcaloides: Skytanthine e Hydroxyskytanthine I y II. En este trabajo se muestra el estudio fitoquímico de las partes aéreas de *S. acutus*, reportando dos compuestos aromáticos glicosilados. Las partes aéreas sin fruto de *S. acutus*, fueron recolectadas en Vallenar, III Región Chile. Luego fueron trituradas y puestas a macerar con etanol. El solvente fue eliminado a presión reducida. Se realizó una extracción con AcOEt y mediante cromatografía de columna se obtuvieron los dos compuestos. El compuesto (1) fue aislado a partir de una fracción derivatizada (Acetilación) proveniente del extracto etanólico de *Skytanthus acutus* mediante cromatografía en columna, utilizando como fase móvil una mezcla de Hexano-AcOEt (1:1), mientras que el compuesto (2) se obtuvo a partir de la extracción de la fase orgánica básica, modificando el pH y posterior purificación por cromatografía en columna, utilizando mezcla de solventes de polaridad creciente [Hexano-AcOEt (1:1) – MeOH-AcOEt (15:85)]. La caracterización se realizó mediante el análisis de ¹H-RMN, ¹³C-RMN, DEPT-135, 2D HSQC, 2D-HMBC y NOESY. Debido a que estos dos compuestos aromáticos glicosilados no se han reportado previamente para la especie estudiada, se hace necesario continuar con los estudios fitoquímicos de esta planta endémica del Norte de Chile.

Referencias

1. González-Rocha, E.; Cerros-Tlatilpa, R. *Acta Bot. Mex.*, 2015, 110, 21–70.
2. Acevedo, C.; Olivares, F. “Guía Descriptiva. Flora y fauna de la región de Atacama,” 2012.
3. Djerassi, C.; Kutney, J. P.; Shamma, M. *Tetrahedron*, 1962, 18 (1), 183–188.
4. Auda, H.; Junija, H.R.; Eisenbraun, E. J.; Waller, G. R.; Kays, W.R.; Appel, H.H. *J. Am. Chem. Soc.*, 1967, 89(10), 2476 – 2482.
5. Araya, J. J.; Montenegro, G.; Mitscher, L. A.; Timmermann, B. N.; *J. Nat. Prod.*, 2010, 73, 1568 – 1570.

ESPECIES DEL GÉNERO *Piper* CON POTENCIAL PARA EL CONTROL DE HONGOS FITOPATÓGENOS EN CULTIVOS DEL CACAO.

Yudy S. Mahecha-Jimenez, Juliet A. Prieto-Rodríguez, Cristobal Ladino-Vargas, Jenny P. Moreno-Lopez, Oscar J. Patiño-Ladino.

Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia. Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia. Universidad de Cundinamarca, Fusagasugá, Colombia.

ymahechaj@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: *Piper*, antifúngico, *Theobroma cacao*, hongos fitopatógenos.

El cacao es uno de los productos agrícolas de mayor proyección socioeconómica en el país, puesto que genera empleo a más de 52.000 familias colombianas y ha sido implementado desde el 2014 como cultivo sustituto de cultivos ilícitos (1). Sin embargo, los rendimientos en su producción han disminuido, dado a diversos factores, destacándose la proliferación de enfermedades asociadas a hongos fitopatógenos. Para el control de estos, principalmente se hace uso de sustancias sintéticas (benomyl y mancozeb) pocas selectivas y tóxicas (2), por lo que se hace necesaria la búsqueda de sustancias de bajo impacto ambiental. Entre las posibles alternativas para el control de hongos fitopatógenos asociados al cacao se encuentra la búsqueda de agentes fitosanitarios de origen vegetal para ser usados de manera sostenible, debido a la gran variedad de compuestos bioactivos que presentan y que pueden ser usados como métodos de control o ser fuente de inspiración para el desarrollo de sustancias más activas para el control de diversas plagas (3). En este sentido las especies del género *Piper* reportan potencial antifúngico frente a diversos fitopatógenos, sin embargo, son muy pocos los estudios frente a fitopatógenos del cacao (3,4). Por lo cual el equipo de investigación desde hace algunos años se ha planteado como objetivo el determinar el potencial antifúngico de especies de *Piper* frente a hongos fitopatógenos que causan enfermedades en cacao. En este sentido, se ha venido realizando tamizaje de actividad antifúngica de extractos provenientes de especies del género *Piper* presentes en Colombia frente a estos fitopatógenos. Inicialmente, los hongos fueron aislados y caracterizados de plantaciones con sintomatología de enfermedades conocidas como moniliasis, pudrición de mazorca negra y muerte descendente en cacao. Luego fueron enfrentados frente a diferentes extractos de *Piper* mediante ensayos de inhibición de crecimiento micelial y bioautografía para de esta manera determinar la actividad antifúngica de estas especies vegetales. Destacándose el potencial antifúngico de las especies de *P. aduncum*, *P. peltatum*, *P. asperisculum*, y *P. ceanothifolium*. Del estudio químico adelantado sobre estas especies se han aislado e identificado flavonoides, alquiflenoles y derivados de ácidos benzoico con actividad antifúngica significativa frente a *Monillioptora roreri*, *Phytophthora palmivora* y/o *Fusarium solani* (4). La presente investigación describe el potencial antifúngico de los componentes químicos responsables de la actividad antifúngica de *P. aduncum*, *P. peltatum*, *P. asperisculum*, y *P. ceanothifolium* contra hongos fitopatógenos (*M. roreri*, *P. palmivora*, *F. solani* y *L. theobromae*) asociados al cultivo del cacao.

REFERENCIAS:

1. Pabón, M. G., Herrera-Roa, L. I., & Sepúlveda, W. S. Caracterización socioeconómica y productiva del cultivo de cacao en el departamento de Santander (Colombia). *Revista Mexicana de Agronegocios*. 2016, 38, 283-294.
2. Armengot, L., Ferrari, L., Milz, J., Velásquez, F., Hohmann, P., & Schneider, M. Cacao agroforestry systems do not increase pest and disease incidence compared with monocultures under good cultural management practices. *Crop Protection*. 2020, 13, 54-57.
3. Mohana, D. C., & Raveesha, K. A. Anti-fungal evaluation of some plant extracts against some plant pathogenic field and storage fungi. *Journal of Agricultural Technology*. 2017, 4(1), 119-137.
4. Adu-Acheampong, R., Archer, S., & Leather, S. Resistance to dieback disease caused by *Fusarium* and *Lasiodiplodia* species in cacao (*Theobroma cacao* L.) genotypes. *Experimental Agriculture*. 2012, 48(1), 85-98.



TAMIZAJE FITOQUÍMICO Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA IN VITRO DEL EXTRACTO ETANÓLICO DE LAS HOJAS DE *Aloysia virgata* (R. & P.) Juss.

S. Haydee Chávez Orellana, Felipe Surco Laos, Rocío Bendezú Acevedo, Jorge García Ceccarelli, Neyma Aroni Huarcaya, Katty Herrera Gutiérrez, Marianella Salinas Fuentes, Manuel Valle Campos, Roberto Garayar Flores

Universidad Nacional San Luis Gonzaga, Perú.

hchavez44@gmail.com

Palabras claves: *Aloysia*, antibacteriana, flavonoides, *Staphylococcus*.

Introducción: *Aloysia virgata* (R. & P.) Juss, usada por los pobladores de la comunidad de Saisa, departamento de Ayacucho; en el tratamiento de infecciones intestinales, afecciones del riñón, desinfección de heridas. Nuestra investigación se centra en el estudio de esta especie como una fuente potencial de nuevos agentes antimicrobianos.

Métodos: El extracto etanólico fue fraccionado mediante tamizaje fitoquímico (1). La actividad antibacteriana se evaluó por el método de difusión en agar por excavación en placa (2), (3), a diferentes concentraciones, enfrentándose a cepas Gram positivas y Gram negativas ATCC. se evaluaron los siguientes parámetros: PIR, CMI y CMB.

Resultados y conclusiones: Se identificaron los siguientes metabolitos secundarios: flavonoides, aminoácidos, taninos, triterpenos, esteroides, alcaloides y catequinas. El extracto etanólico de las hojas presentó actividad solo para las cepas bacterianas Gram positivas, a la concentración de 500 mg/mL. El Porcentaje de Inhibición Relativa (PIR) del extracto etanólico mostró una mayor capacidad antibacteriana contra la cepa *Staphylococcus aureus*, con 85.86% y contra la cepa *Bacillus cereus* con 73.21%; a la concentración de 100% para ambas. En cuanto a la Concentración Mínima Inhibitoria (CMI) del extracto etanólico frente a *Staphylococcus aureus* y para *Bacillus cereus* fue de 62.5 mg/mL a partir de 500 mg/mL, y la Concentración Mínima Bactericida (CMB) fue de 125 mg/mL para ambas cepas. Se concluye que el extracto etanólico de las hojas de *Aloysia virgata* (R. & P.) Juss tiene metabolitos secundarios que presentan actividad antibacteriana sobre cepas Gram positivas (*Staphylococcus aureus* y *Bacillus cereus*).

Referencias:

1. Lock. O. Investigación Fitoquímica. Métodos en el estudio de productos naturales. 3ra ed. Ed. Pontificia Universidad Católica del Perú. Lima. 2016
2. Balouiri. M, Sadiki M., Ibnsouda, S. Methods for in vitro evaluating antimicrobial activity: A review, **J. Pharm Anal.** 2016. 6. 71-79.
3. Alves M J. Antimicrobial activity of wild mushroom extracts against clinical isolates resistant to different antibiotics. **Journal of applied microbiology**, (2012 Aug) Vol. 113, No. 2, pp. 466-75. Electronic Publication Date: 18 Jun 2012 Journal code: 9706280. E-ISSN: 1365-2672. L-ISSN: 1364-5072.



EXTRACCIÓN DEL ACEITE ESENCIAL DE CARDAMOMO (*Elettaria cardamomum*) MEDIANTE HIDRODESTILACIÓN ASISTIDA POR MICROONDAS, UTILIZANDO ULTRASONIDO COMO PRETRATAMIENTO.

José Leonardo Cano B, Yeferson Ospina B, Eunice Ríos V.

Universidad del Quindío, Colombia.

jlcanob@uqvirtual.edu.co

Palabras clave: Elettaria, Cromatografía, Ultrasonido, Microondas

INTRODUCCIÓN: El cardamomo pertenece a la familia Zingiberaceae y al género Elettaria. La extracción de aceites esenciales (AE) por técnicas como la hidrodestilación asistida por microondas (HDAM) y extracción asistida por ultrasonido (EAU), permiten mejorar los porcentajes de rendimiento, disminuyen los tiempos de extracción y son ecoamigables.¹

METODOLOGÍA: El AE de semillas de cardamomo se extrajo mediante HDAM e HDAM+EAU utilizando 400W de potencia para el microondas durante 30 minutos. La EAU se realizó en un baño ultrasónico a 40kHz y 145W de potencia por 30 minutos. Su composición se analizó por cromatografía de gases espectrometría de masas (CG-EM).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: En este estudio se identificaron como compuestos mayoritarios α -terpinilo, 1, 8-cineol, sabineno, acetato de linalilo y linalool, sumando el 86% de sus componentes totales. La EAU como pretratamiento no mostró diferencias significativas en la composición química de los AE, sin embargo, en la EAU se observó un aumento del 21,55% en el porcentaje de rendimiento, esto posiblemente se deba al fenómeno de la cavitación que conduce a una extracción rápida y completa de los componentes deseados, por efectos como la disrupción celular, la intensificación de transferencia de masa, la penetración mejorada del disolvente, la capilaridad, el alto rendimiento de recuperación y el corto tiempo de extracción. La combinación de estas dos técnicas de extracción se convierte en un paso importante para la obtención de AE de esta especie.

REFERENCIAS

1. Sereshti, H.; Rohanifar, A.; et al. Bifunctional Ultrasound Assisted Extraction and Determination of Elettaria Cardamomum Maton Essential Oil. *J. Chromatogr. A* **2012**, 1238, 46–53. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2012.03.061>.
2. Giacometti, J.; Bursać Kovačević, D.; et al. Extraction of Bioactive Compounds and Essential Oils from Mediterranean Herbs by Conventional and Green Innovative Techniques: A Review. *Food Res. Int.* **2018**, 113, 245–262. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2018.06.036>.



Hibiscus rosa-sinensis: ESTUDIO DE LA RELACIÓN ENTRE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA, LA CAPACIDAD ANTIOXIDANTE Y EL COLOR

Jesica J. Mejía-Medina, Jairo R. Martínez-Morales y Elena E. Stashenko

Universidad Industrial de Santander, Colombia.

jesica.mejia28@gmail.com

Palabras clave: antioxidantes, color, Hibiscus rosa-sinensis.

Introducción: Las plantas de Hibiscus rosa-sinensis de la familia Malvaceae son arbustos, originarios de Asia, producen flores grandes y vistosas con colores que van desde el blanco a diferentes tonalidades de rojo, naranja, amarillo y sus diferentes combinaciones. Las plantas de esta especie han sido cultivadas para usos ornamentales, alimentarios y medicinales (1).

Métodos: Se emplearon 16 cultivares de flores de H. rosa-sinensis para medir sus parámetros colorimétricos; posteriormente, cada pétalo fue extraído con mezcla hidro-alcohólica. Los extractos obtenidos se caracterizaron por UHPLC-ESI (+)-Orbitrap-MS y, posteriormente, su actividad antioxidante fue evaluada usando el ensayo ORAC (2).

Resultados y conclusiones: Entre los flavonoides identificados se encontraron algunas antocianinas derivadas de la cianidina, flavonoles glucosilados derivados de quercetina y kaempferol. Se detectaron flavan-3-oles como catequina y epicatequina. Se observó que la cianidina-soforósido fue la antocianina que se encontraba presente en todas las flores de diferentes colores desde el lila, rosado, naranja hasta el rojo, sin embargo, no se detectó en flores de colores blanco o amarillo. Se pudo establecer que la concentración de flavonoles totales fue inversamente proporcional al contenido de antocianinas totales y la cantidad de flavonoles varió según el cultivar en el siguiente orden: blanco = amarillo (98%) > naranja (90%) > rosado (81%) > rojo (17%), siendo el cultivar rojo el que presentó mayor concentración de antocianinas. A partir de las muestras evaluadas se pudo observar que, a mayor concentración de antocianinas, la actividad antioxidante aumentó de 1350 hasta 4000 $\mu\text{mol Trolox}^*/\text{g}$ muestra.

Referencias:

1. Gilani, A.; Bashir, S.; Janbaz, K.; and Shah, A. Presence of cholinergic and calcium channel blocking activities explains the traditional use of Hibiscus rosa-sinensis in constipation and diarrhoea. *J. Ethnopharmacol.*, **2005**, 102, 94–289.
2. Ou, B.; Hampsch, M.; and Prior, R. Development and validation of an improved oxygen radical absorbance capacity assay using fluorescein as the fluorescent probe. *J. Agric. Food. Chem.*, **2001**, 49, 4619-4626



Evaluación de la Presencia de Cannabinoides en Productos de Cosmética Cannábica

Paola Arango Romero¹, Ricardo Benítez Benítez², Jhan Carlos Delgado Rodríguez³, Jaime Martín⁴.

¹Química de Productos Naturales, Universidad del Cauca – Estudiante Doctorado en Ciencias Químicas, Universidad del Cauca, ²Profesor de planta del Departamento de Química, Universidad del Cauca, ³Químico, Universidad del Cauca, ⁴Profesor de planta del Departamento de Química, Universidad del Cauca.

parango@unicauca.edu.co

Palabras claves: Cannabis tetrahidrocannabinol cannabinol fitocosméticos.

Introducción: La cosmética cannábica es hoy en día importante a nivel mundial. El grupo de investigación QPN de UNICAUCA, pensando en avanzar dentro de la cadena productiva del Cannabis a partir de los resultados obtenidos en anteriores estudios, realizó la formulación de cosméticos y evaluó la presencia de los cannabinoides principales.

Métodos: Se elaboró dos productos cosméticos cannábicos, crema corporal y aceite relajante, se realizó pruebas físico-químicas y posteriormente se analizó por técnicas analíticas; cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) y cromatografía de gases acoplado a masas (CG-EM), para identificar y cuantificar la presencia de cannabinoides principales Δ^9 tetrahidrocannabinol (THC) y cannabidiol (CBD).

Resultados y conclusiones: Los resultados obtenidos en anteriores estudios realizados por el grupo de investigación Química de Productos Naturales (QPN), permitieron la selección del material vegetal de cannabis utilizado para la elaboración de los productos cosméticos cannábicos; crema corporal y aceite relajante, las pruebas físico-químicas y los análisis realizados por las técnicas analíticas cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) y cromatografía de gases acoplado a masas (CG-EM), permitieron identificar la presencia de los cannabinoides principales Δ^9 tetrahidrocannabinol (THC) y cannabidiol (CBD) en los productos cannábicos, el CBD se encontró en mayor proporción con respecto al THC, además se encontraron otros cannabinoides en menor proporción.

Los cosméticos cannábicos elaborados, presentan características físico-químicas aceptables teniendo los resultados obtenidos, se confirma la presencia de cannabinoides principales en los cosméticos. Estos resultados se convierten en un insumo importante como respaldo a los productores de Cannabis del norte del Cauca para avanzar dentro de la cadena productiva del Cannabis.

Referencias:

1. Michailidis, D., Angelis, A., Nikolaou, P. E., Mitakou, S., & Skaltsounis, A. L. Exploitation of *Vitis vinifera*, *Foeniculum vulgare*, *Cannabis sativa* and *Punica granatum* By-Product Seeds as Dermo-Cosmetic Agents. *Molecules*, 2021, 731.
2. Lazzeri, A. California Cannabis Regulations and the Federal Food, Drug & Cosmetic Act: A Product Liability Perspective of Edible Cannabis. *Hastings Bus*, 2020.
3. Al Jourdi, H., Popescu, C., Udeanu, D. I., Arsene, A., Sevastre, A., Velescu, B. S., & Lupuliasa, D. Comparative study regarding the physico-chemical properties and microbiological activities of *Olea Europaea* L. oil and *Cannabis Sativa* L. seed oil obtained by cold pressing. *FARMACIA*, 2019. 759-763.



EXTRACCIÓN SÓLIDO-LÍQUIDO DE PIGMENTOS A BASE DE ANTOCIANINAS PRESENTES EN EL FRUTO EXÓTICO DE Açai (Euterpe Oleracea)

Vladimir Ernesto Vallejo-Castillo, Jesus Antonio Arevalo-Delgado, Maria Fernanda Rojas-Campiño.

Universidad Mariana.

vevallejo@umariana.edu.co

Palabras Clave: Açai, cinética, extracción, Antocianinas

Introducción: El fruto de la palmera de açai presenta diferentes compuestos bioactivos, principalmente los flavonoides, como las antocianinas. Las cuales son una fuente de pigmentos naturales empleados en la industria de alimentos y química¹. En el presente trabajo se busca evaluar el efecto del tiempo en la extracción sólido-líquido de antocianinas.

Metodología: Se realizó una cinética de extracción sólido-líquido de antocianinas presentes en el fruto de açai, mediante agitación orbital durante 6 horas empleando etanol-agua acidificado al 55% (v/v) como solvente, con una relación de fruto:solvente de 1,5:1 (g:mL), a una temperatura de 35°C y con una agitación de 320 rpm.

Resultados y conclusiones: La cinética de extracción permitió establecer que hasta la quinta hora existe una alta velocidad de transferencia de masa, debido a la diferencia de concentraciones entre el solvente y las antocianinas presentes en el açai. A partir de este tiempo la transferencia de masa disminuye hasta alcanzar un equilibrio, lo cual se validó mediante el análisis estadístico de Tukey ($p < 0,05$). Posteriormente, se evidenció una degradación de las antocianinas, puesto que, estas presentan una alta inestabilidad térmica y variación de su color característico². En el tiempo máximo de extracción se obtuvo un contenido de antocianinas totales de $39,01 \pm 0,2$ mgCGE/100 g de fruto. Estos valores se encuentran dentro del rango informado por otros estudios³. En conclusión, el método empleado es asequible y económico, el cual permitió obtener una alta concentración pigmentos a base antocianinas. Por lo tanto, permitiría su aplicación potencial en la industria alimentaria y nutracéutica.

Referencias:

1. Anuar, N.; Mohd Adnan, A. F.; Saat, N.; Aziz, N.; Mat Taha, R. Optimization of Extraction Parameters by Using Response Surface Methodology, Purification, and Identification of Anthocyanin Pigments in Melastoma Malabathricum Fruit. *Sci. World J.* **2013**. <https://doi.org/10.1155/2013/810547>.
2. Garzón, G. A.; Narváez-Cuenca, C. E.; Vincken, J. P.; Gruppen, H. Polyphenolic Composition and Antioxidant Activity of Açai (Euterpe Oleracea Mart.) from Colombia. *Food Chem.* **2017**, *217*, 364–372. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2016.08.107>.
3. Coutinho, R. M. P.; Aparecida, E.; Fontes, F.; Vieira, L. M.; Barros, F. A. R. De; Carvalho, A. F. De; Stringheta, P. C. Physicochemical and Microbiological Characterization and Antioxidant Capacity of Açai Pulps Marketed in the States of Minas Gerais and Pará, Brazil. *Ciência Rural* **2017**, *47* (1), 1–6.



ESTUDIOS DE DOCKING EN ALILFENOLES Y PRENILFENOLES

Manuel Díaz, Mauricio Soto, Lautaro Taborga, Susana Restrepo.

Universidad Técnica Federico Santa María

manuel.diazm@alumnos.usm.cl

Palabras clave: Simulación, Docking, Prenilfenoles.

Introducción: La enzima succinato deshidrogenasa SDH se encuentra en múltiples organismos y es esencial en el proceso de respiración celular. Actualmente, la capacidad de inhibición de esta enzima, mediante la interacción con un determinado ligando se considera un buen indicador, de que tal compuesto es candidato a ser un antifúngico¹⁻³.

Métodos: Se realizó un estudio de acoplamiento molecular utilizando el programa Glide sobre la estructura cristalina de la enzima SDH (PDB: 2FBW), para ello se acoplaron 44 compuestos del tipo terpenilfenoles y terpenilfenoles hidratados en el sitio activo de la enzima y posteriormente se analizaron las interacciones ligando-proteína.

Resultados y conclusión: El análisis de los resultados del acoplamiento molecular, muestra que los terpenilfenoles y sus derivados hidratados generan buenas interacciones de tipo estéricas y electrónicas con el sitio activo de la enzima SDH, donde los docking score más altos oscilaron entre -7,0 y -9,0 kcal mol⁻¹. En la pose predicha del compuesto con mayor docking score 5-(3-hidroxi-3-metil-butil)-benceno 1,2,4-triol, se detectaron cinco enlaces de hidrógeno, dos entre los hidroxilos en posición 1 y 2 con Ser 39, otro entre Trp 173 y Tyr 58 con el grupo hidroxilo en posición 4, por último se genera un puente de hidrógeno intermediado por una molécula de agua entre el grupo hidroxilo en la cadena lateral y Tyr 58. Esperamos complementar este trabajo en el futuro, sintetizando los compuestos y realizando pruebas de actividad biológica. Así finalmente comparar y evaluar si existe correlación entre los resultados in vitro e in silico.

Referencias:

1. Yan, W.; Wang, X.; Li, K.; Li, T. X.; Wang, J. J.; Yao, K. C.; Cao, L. L.; Zhao, S. S.; Ye, Y. H. Design, Synthesis, and Antifungal Activity of Carboxamide Derivatives Possessing 1,2,3- Triazole as Potential Succinate Dehydrogenase Inhibitors. *Pestic. Biochem. Physiol.* 2019, 156 (March), 160–169. <https://doi.org/10.1016/j.pestbp.2019.02.017>.
2. Hua, X.; Liu, W.; Su, Y.; Liu, X.; Liu, J.; Liu, N.; Wang, G.; Jiao, X.; Fan, X.; Xue, C.; Liu, Y.; Liu, M. Studies on the Novel Pyridine Sulfide Containing SDH Based Heterocyclic Amide Fungicide. *Pest Manag. Sci.* 2020, 76 (7), 2368–2378. <https://doi.org/10.1002/ps.5773>.
3. Yan, Y.; Cheng, W.; Xiao, T.; Zhang, G.; Zhang, T.; Lu, T.; Tang, X. Discovery of Novel 2,4,6- Trisubstituted Pyrimidine Derivatives as Succinate Dehydrogenase Inhibitors. *Chinese J. Org. Chem.* 2020, 40 (12), 4237– 4248. <https://doi.org/10.6023/cjoc202005057>.



ESTUDIO QUÍMICO Y ACCIÓN ANTIFÚNGICA DE METABOLITOS VOLÁTILES DE *Ocotea puberula* DE LA SIERRA NEVADA DE SANTA MARTA.

Juan Manuel Alvarez Caballero, Junior Orozco Paniagua¹, Ericsson Coy-Barrera.

Universidad del Magdalena. Santa Marta, Colombia, Universidad Militar Nueva Granada, Cundinamarca, Colombia.

jalvarez@unimagdalena.edu.co.

Palabras clave: *Ocotea puberula*, sesquiterpenos, antifúngicos

Introducción: La Sierra Nevada de Santa Marta alberga una diversidad botánica única. Un ejemplo de ello son las especies de la familia Lauraceae, cuya información química y potencial biológico es casi nula, lo que ha motivado estudios con el propósito de caracterizar los compuestos responsables de su acción.

Métodos: El aceite esencial de hojas de *Ocotea puberula* fue obtenido mediante destilación por arrastre con vapor y analizado por medio de cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masas. La actividad antifúngica se evaluó sobre *Fusarium oxysporum* mediante inhibición de crecimiento micelial en medio suplementado y acción fumigante.

Resultados y Conclusiones: El análisis del aceite esencial de *O. puberula* permitió identificar un total de 27 compuestos, la mayoría de ellos sesquiterpenos (59.25%) y monoterpenos (40.75%). Los compuestos mayoritarios fueron el β -cariofileno (25.28%) y α -copaeno (12,76%), seguidos del bisabolol (6,78%), cadineno (6,72%) y humuleno (5.73%) respectivamente. La identificación de los metabolitos volátiles del aceite esencial se realizó a través de la comparación de los índices de retención experimentales y calculados en combinación con el análisis detallado de los respectivos espectros de masas de los compuestos. Por otro lado, el aceite mostró actividad antifúngica promisorio sobre el crecimiento micelial de *F. oxysporum*, con valores de inhibición superiores al 60% en los métodos. Debido al contenido de sesquiterpenos mayoritarios presentes en aceite esencial de *O. puberula* y la actividad antifúngica in vitro observada, situaría a este aceite como una opción potencial que merece ser adicionalmente explorada para el control de este tipo de fitopatógenos.

Referencias

1. Adams, R. P. Identification of essential oil components by gas chromatography/ quadrupole mass spectrometry. Allured publishing corporation, Carol Stream, IL. 2001.



IMPLEMENTACIÓN DE UN MÉTODO DE MICROEXTRACCIÓN POR DMFS Y EFS-IC PARA LA EXTRACCIÓN DE ALCALOIDES DE AGAPANTHUS PRAECOX WILLD

Juan C. Ortiz, Fernando H. Blanco, Fabio A. Cabezas.

Universidad del Cauca, Popayán, Colombia.

juankaro@unicauca.edu.co

Palabras clave: Alcaloides, *Agapanthus praecox*, extracción, DMFS, EFS-IC.

Resumen La familia Amaryllidaceae posee alcaloides ampliamente estudiados debido a sus propiedades farmacológicas; como la galantamina que es empleado en el tratamiento del Alzheimer. A pesar de que la subfamilia Agapanthoideae hace parte de esta familia, se desconoce el tipo de alcaloides, posiblemente por la dificultad para extraerlos convencionalmente. Con tal fin se empleó la dispersión de matriz en fase sólida (DMFS) y la extracción en fase sólida de intercambio catiónico (EFS-IC) para la extracción de alcaloides presentes en la especie *Agapanthus praecox* Willd y su posterior identificación por UCLAR-ESI-EM. Inicialmente se determinaron los solventes de lavado, extracción y los porcentajes de fuga y extracción de un patrón de galantamina, cuantificando por UCLAR-ESI-EM, encontrando que con la metodología de DMFS empleando un soporte polar se obtenía un porcentaje de recobro del $86.1 \pm 3,2$ % al extraer con 20 mL de una mezcla de acetonitrilo y tetrahydrofurano (80:20), y para el soporte apolar C18 del $92,4 \pm 1,2$ y $86,2 \pm 13,8$ % al extraer con 10 mL de metanol y etanol respectivamente, y para la metodología de EFS-IC un porcentaje de $92,81 \pm 0,56$ %. Dichas metodologías se emplearon para hacer la comparación entre el material vegetal y sus EET, encontrando una mayor representación porcentual basado en el área total de los iones encontrados al realizar una extracción directa del material vegetal en comparación al realizar el proceso partiendo de un EET.

Referencias

1. Stafford, G. I.; Jäger, A. K.; Van Staden, J. Activity of Traditional South African Sedative and Potentially CNS-Acting Plants in the GABA Benzodiazepine Receptor Assay. *J. Ethnopharmacol.* **2005**, 100 (1–2), 210– 215. <https://doi.org/10.1016/j.jep.2005.04.004>.
2. Reis, A.; Magne, K.; Massot, S.; Tallini, L. R.; Scopel, M.; Bastida, J.; Ratet, P.; Zuanazzi, J. A. S. Amaryllidaceae Alkaloids: Identification and Partial Characterization of Montanine Production in *Rhodophiala bifida* Plant. *Sci. Rep.* **2019**, 9 (1). <https://doi.org/10.1038/s41598-019-44746-7>.
3. Barker, S. A. Matrix Solid Phase Dispersion (MSPD). *Journal of Biochemical and Biophysical Methods*. Elsevier March 10, 2007, pp 151–162. <https://doi.org/10.1016/j.jbbm.2006.06.005>.



HÍBRIDOS CUMARINA-CHALCONA: ESTRATEGIA SINTÉTICA, CITOTOXICIDAD Y ACTIVIDAD LEISHMANICIDA IN VITRO

Sebastian Valencia Cossio, Diego Durango, Jesús Gil, Sara Robledo, Winston Quiñones, José Eduardo Cuellar.

Universidad Nacional de Colombia Sede Medellín, Universidad de Antioquia, Colombia.

sevalenciaco@unal.edu.co

Palabras claves: Leishmania panamensis, concentración media efectiva, condensación Claisen-Schmidt, 3-acetil 2H-cromen-2-ona.

Introducción: La leishmaniasis hace parte de las enfermedades tropicales desatendidas (ETD) de origen parasitario, y es endémica en Colombia con más de 11 millones de personas en riesgo [1]. Los tratamientos con antimonio son tóxicos a varios órganos [2]; alternativamente, algunas cumarinas y chalconas han mostrado actividad contra parásitos causantes de leishmaniasis [3]; por lo tanto, varios autores han propuesto los híbridos cumarina chalcona (**HCCh**) como moléculas promisorias para el control de enfermedades parasitarias [4].

Métodos: La estrategia sintética consistió en la obtención de cumarinas con diferente patrón de sustitución (condensación de Knoevenagel), y el posterior acoplamiento de aldehídos sustituidos (condensación de Claisen-Schmidt). Los **HCCh** sintetizados se purificaron (cromatografía) y caracterizaron (RMN, IR). La citotoxicidad (línea celular U 937) y la actividad in vitro contra *L. panamensis* de los compuestos se determinó de acuerdo a [5].

Resultados y conclusiones: Se sintetizaron **HCCh** mediante reacciones libres de solvente. Los rendimientos fueron del 99%, para la condensación de Knoevenagel, y del 75 a 99% para las reacciones de condensación de Claisen-Schmidt. Los híbridos presentaron bandas características en el IR (1732-1710, 1600 y 1180 cm^{-1} atribuible a C=O, C=C y C=Car, y C-O, respectivamente) y señales de RMN (^1H y ^{13}C) propias del esqueleto de cumarina (H, entre 8.48-8.70 ppm y C, a 149.1-147.4 ppm); además, el doble enlace en el sistema cinamoilo de cadena abierta se presentó a 8.12- 7.63 (δH_α) y 7.93-7.53 (δH_β) ppm con constante de acoplamiento propia de la configuración E ($J = 15.6$ a 15.9 Hz). Todos los compuestos (**H1-H5**) fueron citotóxicos a las células U-937 ($\text{CL}_{50} < 200.0$ μM) con valores entre 5.7 a 11.4 μM . La actividad anti-leishmania (CE_{50}) varió entre 2.1 a 10.7 μM ; siendo más activos los compuestos con grupos oxigenados (OH y OMe) en la posición C3'.

Referencias:

1. Mendigaña, F. MinSalud de Colombia: Plan estratégico leishmaniasis 2018-2022. **2018**, 1-64.
2. Brito, N. C., Rabello, A., Cota, G. F. Efficacy of pentavalent antimoniate intralesional infiltration therapy for cutaneous leishmaniasis: A systematic review. *PloS One*, **2017**, 12(9), e0184777.
3. De Mello, et al. A comprehensive review of chalcone derivatives as antileishmanial agents. *Eur. J. Med. Chem.*, **2018**, 150, 920–929.
4. Vazquez-Rodriguez, S., et al. Synthesis of coumarin-chalcone hybrids and evaluation of their antioxidant and trypanocidal properties. *Med. Chem Commun.*, 2013, 4(6), 993–1000.
5. Murillo, J. A., et al. Antileishmanial activity and cytotoxicity of ent-beyerene diterpenoids. *Bioor. Med. Chem.*, **2019**, 27(1), 153–160.



SLHCL-608

ESTUDIO FITOQUÍMICO Y EVALUACIÓN ALELOPÁTICA DE LOS EXTRACTOS DE ULEX EUROPAEUS L. (RETAMO ESPINOSO)

Jhon Fredy Castañeda Gómez, Ángela Patricia Ochoa Sánchez.

Universidad Surcolombiana, Neiva (Huila), Colombia.

angelasanchez1507@hotmail.com

Palabras clave: Potencial alelopático, Ulex europaeus

La alelopatía es el daño que puede causar una planta a otra, ya sea directa o indirectamente, a través de compuestos químicos que son liberados al ambiente. La presente investigación pretendió llevar a cabo el estudio fitoquímico y la evaluación biológica para determinar el efecto alelopático de la especie Ulex europaeus. Se llevó a cabo la obtención de los extractos mediante el método de maceración exhaustiva aplicando disolventes de diferente polaridad, se realizaron pruebas cualitativas para identificar la presencia o ausencia de diversos grupos de metabolitos secundarios, y pruebas para determinar el potencial alelopático y antimicrobiano de los extractos del Retamo espinoso. Se realizaron pruebas cualitativas para identificar la presencia o ausencia de diversos grupos de metabolitos secundarios. Para la evaluación de la actividad alelopática se determinó que de los seis tratamientos empleados (agua cristal Postobón, Tween 80 al 1%, Gesaprim, extracto hexánico, clorofórmico y metanólico), el extracto metanólico presentó un efecto significativo, promoviendo el crecimiento radicular de las semillas de lechuga y tomate en comparación con los otros tratamientos, a pesar de que estos extractos retardaron la germinación por un tiempo de 24 horas. Estos extractos promovieron un crecimiento significativo de las raíces en plántulas, información que fue validada estadísticamente. Finalmente, se realizaron pruebas para determinar el potencial alelopático y antimicrobiano de los extractos del Retamo espinoso a través de la inhibición de la germinación y el crecimiento radicular en semillas de Lechuga y Tomate y mediante el método de difusión en agar contra Escherichia coli.

Referencias:

1. Cruz, J. (2012). Efectos de extractos acuosos y residuos de Ipomea batatas clon CEMSA 78-354 sobre la germinación y crecimiento de cultivos y malezas.
2. Chiapusio, G., Gallet, J., & Dobremez, J. (2010). Compuestos alelopáticos: ¿herbicidas del futuro? Bogotá, CO. El manual moderno.
3. Gian, F., Pastoriza, A., & Riscala, E. (1998). Efecto alelopático de un extracto clorofórmico de Raphanus sativus L. sobre la germinación y el crecimiento de plántulas de achicoria Maracaibo. Rev. Luz.



EVALUACIÓN IN SILICO E IN VITRO DE LA LICORINA Y SUS DERIVADOS POR SÍNTESIS QUÍMICA, 6-OXOLICORINA Y 2-ACETIL-LICORINA, COMO POTENCIALES INHIBIDORES DE LA REPLICACIÓN DEL ZIKV EN CÉLULAS VERO

Juliana Andrea Cabrera Perdomo, Juan Camilo Aquite, Nicole Diaz, Paola Andrea Caicedo, Alvaro Barrera-Ocampo, Maria Francisca Villegas, Juan Cruz

Universidad ICESI

juliana.cabrera06@gmail.com

Palabras claves: Alcaloides, ZIKV, CC50, actividad antiviral

La infección por ZIKV se ha asociado con varias enfermedades del sistema nervioso central, como el síndrome de Guillain-Barré, que son especialmente dañinas para el sistema nervioso inmaduro y podrían causar microcefalia congénita en la descendencia de una mujer embarazada¹. Actualmente, no se cuenta con una vacuna o tratamiento antiviral específico para combatir la infección por este virus², por lo que es necesaria la búsqueda de nuevas alternativas que permitan una actividad antiviral frente al ZIKV es por esto que los alcaloides extraídos de plantas de la familia de Amaryllidacea se ha propuesto como potenciales agentes terapéuticos debido a la actividad antiviral reportada. Con base en lo anterior, se planteó como objetivo evaluar el efecto de la licorina y sus derivados sintetizados químicamente, 6-oxolicorina y 2-acetil licorina, en la replicación del ZIKV mediante estudios in silico e in vitro. Para lograr lo anterior, se evaluaron in silico dos proteínas importantes en la replicación del virus; estas son la NS3 y el dominio RdRp de la NS5, las cuales son considerados blancos terapéuticos importantes para el desarrollo de agentes antivirales. Posteriormente, para corroborar los datos in silico se plantearon dos estrategias antivirales; pre-tratamiento y pos-tratamiento para evaluar si se presentó una disminución del número de copias virales en cultivos celulares vero. Como resultado de la evaluación in silico se obtuvo puntajes entre -8.8 kcal/mol a -7.8 kcal, siendo la 6-oxolicorina la molécula con la mejor energía de interacción con la proteína de interés. En el caso del dominio RdRp de la NS5, los puntajes de energía libre van desde -9.0 kcal/mol a -7.6 kcal/mol, siendo en este caso también la 6-oxolicorina la molécula de mejor energía libre de interacción. Para los datos in vitro: primero se evaluó la citotoxicidad de las moléculas donde se encontró que a las 48 horas, la molécula menos tóxica fue la 6-oxolicorina con un CC50 >200uM, mientras que la licorina presentó un CC50 de 8.122uM y la 2-Acetil-licorina presentó un CC50 de 20 uM. Mediante las dos estrategias antivirales propuestas, la licorina y la 6-oxolicorina presentaron una disminución significativa de casi el 60% del número de copias virales por la infección del ZIKV, en cuanto a la 2-Acetil-licorina, se obtuvo una disminución significativa del número de copias virales en la estrategia pos-tratamiento de casi un 60% la infección por el ZIKV, lo que no ocurrió en el pre-tratamiento. Por lo tanto, se puede sugerir que estas moléculas tienen función antiviral para ZIKV, convirtiéndolos en posibles candidatos como agentes terapéuticos para la infección por el ZIKV.

Referencias:

1. Kamiyama, N.; Soma, R.; Hidano, S.; Watanabe, K.; Umekita, H.; Fukuda, C.; Noguchi, K.; Gendo, Y.; Ozaki, T.; Sonoda, A.; Sachi, N.; Runtuwene, L. R.; Miura, Y.; Matsubara, E.; Tajima, S.; Takasaki, T.; Eshita, Y.; Kobayashi, T. Ribavirin Inhibits Zika Virus (ZIKV) Replication in Vitro and Suppresses Viremia in ZIKV-Infected STAT1-Deficient Mice. *Antiviral Res.* **2017**, *146* (January), 1–11. <https://doi.org/10.1016/j.antiviral.2017.08.007>.
2. Kazmi, S. S.; Ali, W.; Bibi, N.; Nouroz, F. A Review on Zika Virus Outbreak, Epidemiology, Transmission and Infection Dynamics. *Journal of Biological Research (Greece)*. BioMed Central Ltd. March 4, 2020. <https://doi.org/10.1186/s40709-020-00115-4>.



DESARROLLO SISTEMÁTICO DE COMPUESTOS TIPO ALCALOIDE DERIVADOS DEL PRODUCTO NATURAL LICORINA CON ACTIVIDAD FRENTE A ZIKA.

Juan Camilo Aquite Londoño, María Francisca Villegas-Torres, Álvaro Barrera Ocampo, Paola A. Caicedo B.

Universidad Icesi, Cl. 18 #122-135, Cali, Colombia.

juan.aquite@correounivalle.edu.co

Palabras clave: Amaryllidaceae, licorina, agentes terapéuticos, antivirales, virus del zika.

Debido al brote del virus Zika registrado en el 2015, diversos estudios han reportado la relación de este virus con enfermedades como microcefalia y el síndrome de Guillain-Barré. Sin embargo, hasta el momento no hay un tratamiento antiviral efectivo ni vacuna para este virus. Recientemente se demostró que un compuesto producido por las plantas de la familia Amaryllidaceae, la licorina reduce la carga viral de zika en ensayos con cultivos celulares; sin embargo, este puede inducir un grado de citotoxicidad, por lo cual, una derivatización sobre sus grupos funcionales podría reducir esta característica sin afectar significativamente su capacidad antiviral. En el presente estudio se realizó un análisis sistemático de la relación entre los cambios de la estructura de la molécula y el efecto sobre la disminución de la citotoxicidad, manteniendo el potencial farmacológico. Para ello se empleó un ensayo de infección in vitro con células veroen donde se probaron diferentes modificaciones químicas sobre la molécula de licorina manteniendo la estructura central donde se observa que los cambios sobre el grupo amina por grupos amida reducen significativamente la citotoxicidad del núcleo químico. Del mismo modo, modificaciones sobre los grupos hidroxilo de la molécula generan una leve disminución en la toxicidad. Adicionalmente se realizó una ruta biomimética con la cual se puede realizar transformaciones desde núcleos tipo licorina hasta núcleos tipo homolicorina. Esta ruta es de gran utilidad sintética y cobra importancia a nivel de productos naturales, así como el descubrimiento de nuevos fármacos debido a que los compuestos de tipo homolicorina se encuentran en bajas cantidades en la naturaleza, y se ha reportado su alto potencial como agentes terapéuticos frente a diversas problemáticas de salud. se espera reproducir esta ruta a otros compuestos del tipo licorina para generar el homólogo tipo homolicorina y que este pueda ser sometido a ensayos celulares in vitro de tipo viral frente a virus como zika, dengue y SARS-CoV-2 y realizar estudios sistemáticos del mismo modo que se realizó con los derivados de licorina para encaminar la optimización frente a toxicidad-actividad antiviral de este tipo de compuestos.

Referencia:

1. Chen, D., Cai, J., Cheng, J., Jing, C., Yin, J., Jiang, J., Peng, Z., & Hao, X. (2015). Design, Synthesis and Structure-Activity Relationship Optimization of Lycorine Derivatives for HCV Inhibition. *Scientific Reports*, 5 (September), 1–9
2. Giró Mañas C, Paddock VL, Bochet CG, Spivey AC, White AJ, Mann I, Oppolzer W. (2010). Total synthesis of the lycorenine-type amaryllidaceae alkaloid (+/-)-clivonine via a biomimetic ring-switch from a lycorine-type progenitor. *J Am Chem Soc*, 132 (14), 5176-5178.
3. Zhou, T., Tan, L., Cederquist, G. Y., Fan, Y., Hartley, B. J., Mukherjee, S., and Evans, T. (2017). High content screening in hPSC-neural progenitors identifies drug candidates that inhibit Zika virus infection in fetal like organoids and adult brain. *Cell Stem Cell*, 21(2), 274-283.



SLHCL-642

ACTIVIDAD ANTIINFLAMATORIA Y CITOTÓXICA DE ALCALOIDES QUINOLÍNICOS Y EXTRACTO ETANOLICO DE HOJAS DE *Esenbeckia alata* KUNT (RUTACEAE)

Juan Manuel Alvarez Caballero¹, Luis Enrique Cuca Suárez², Ericsson Coy-Barrera¹

Universidad del Magdalena. Santa Marta, Colombia, Universidad Nacional de Colombia. Bogotá D.C., Colombia, Universidad Militar Nueva Granada, Cundinamarca, Colombia.

jalvarez@unimagdalena.edu.co

Palabras clave: Antiinflamatoria, citotoxicidad, *Esenbeckia alata*, Alcaloides.

Introducción: En la búsqueda de sustancias bioactivas de la familia Rutaceae, se llevó a cabo la evaluación de la actividad in vitro del extracto de hojas de *E. alata* y dos de sus alcaloides quinolínicos sobre seis líneas tumorales y la inflamación cutánea en oreja de ratón inducida con TPA.

Métodos El extracto obtenido de *E. alata* fue fraccionado y purificado por métodos cromatográficos convencionales hasta obtener los compuestos alcaloidales tipo quinolona. El ensayo antiinflamatorio se realizó siguiendo el protocolo reportado [1]. El ensayo citotóxico se llevo frente a las células tumorales U251, PC-3, K562, HCT-15, MCF-7 y SKLU-1.

Resultados y Conclusiones El extracto etanólico de hojas de *E. alata* y los dos alcaloides **1-2** presentaron porcentajes de inhibición del edema inducido por TPA del 56.4, 6.3 y 66.7%, respectivamente. Estos resultados permitirían sugerir estudios la realización de estudios posteriores que conduzcan a la optimización estructural con miras a modular la actividad antiinflamatoria de estos alcaloides, así como a delimitar el mecanismo de acción y, por consiguiente, exponer conclusiones orientadas a ese propósito. Los resultados de concentración inhibitoria media (CI₅₀) para el alcaloide **2** fueron 23.5, 28.2, 2.5, 15.3, 24.2 μ M, para las líneas U251, PC-3, K562, HCT-15 y MCF-7, respectivamente. Estos resultados permiten indicar que el extracto etanólico de *E. alata* podría ser una alternativa para desarrollar estudios en el tratamientode problemas tumorales. Así mismo, dada la selectividad mostrada por los alcaloides **1-2** hacia la línea K562, se propone su uso como cabezas de serie para posteriores estudios de relación estructura-actividad.

Referencias:

1. Payá, M.; Ferrándiz, M.; Erradia, F.; Terencio, M.; Kijjoa, A.; Pinto, M.; Alcaraz, M. Inhibition of inflammatory responses by series of novel dolabrane derivarives. *Eur. J. Pharmacol.* **1996**; 312, 97-105.



SLHCL-662

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA POR GC/MS DEL ACEITE ESENCIAL DE *Lantana boyacana* Moldenke, RECOLETADA EN SANTANDER-COLOMBIA

Héctor Duván Uribe V., Cristian A. Oliveros, Diego C. Durán, Robert T. González, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

Universidad Industrial de Santander, Colombia.

huribe98@gmail.com

Palabras clave: Lantana, aceite esencial, GC/MS, actividad antioxidante, actividad insecticida.

Introducción: Al género *Lantana* (Verbenaceae), lo componen aproximadamente 150 especies; está distribuido en regiones tropicales de América y África, e introducido en India (1). Algunas especies son utilizadas como alternativas de la madera, y sus aceites esenciales son conocidos por su actividad insecticida y antioxidante (2).

Metodología: Se recolectó la especie *Lantana boyacana* en el municipio de Enciso, Santander, Colombia. Para la obtención del aceite esencial (AE) se empleó la técnica de hidrodestilación asistida por la radiación de microondas (HWMD), a partir hojas y tallos. La composición química de los (AE) se determinó por GC/MS.

Resultados y conclusiones: El aceite esencial de *Lantana boyacana* Moldenke está compuesto en su mayoría por monoterpenos y por sesquiterpenos bicíclicos. Bajo los criterios de identificación tentativa usando los índices de retención lineales (columnas DB 5MS y DB-WAX) y la comparación de los espectros de masas (MS, EI, 70 eV, coincidencia > 90%), con los reportados en bibliotecas espectrales (ADAMS, NIST), se determinaron como compuestos mayoritarios trans- β -cariofileno y sabineno, con áreas relativas de 13.5% y 12.2%, respectivamente. La especie *Lantana boyacana* Moldenke es una planta de la biodiversidad colombiana, cuyos compuestos mayoritarios podrían aportar interesantes propiedades biológicas y servir como fuente natural para la elaboración de diversos bioproductos.

Referencias:

1. Holloway, JE.; Neill, A. A dictionary of common wildflowers of texas and the southern great plains. TCU press. 2005.
2. Nea, F.; Kambire DA.; Composition, seasonal variation, and biological activities of *Lantana camara* essential oils from Côte d'Ivoire. *Molecules*. 2020, 25, 2400.



MICROPROPAGACIÓN E IDENTIFICACIÓN DE ALCALOIDES BIOACTIVOS EN ESPECIES DE *Amaryllidaceae*

Trujillo-Chacón, LM, Osorio, E, Leiva-Cuenca YH, Castro-Restrepo, D.

Universidad de Antioquia. Medellín, Antioquia, Universidad Católica de Oriente. Rionegro, Antioquia.

linam.trujillo@udea.edu.co

Palabras claves: Amaryllidaceae, Amaryllidoideae, alcaloides, micropropagación.

Introducción: Las especies de la subfamilia Amaryllidoideae representa casi exclusivamente la única fuente natural de alcaloides de Amaryllidaceae (1). El amplio rango de actividades biológicas que presentan estos compuestos ha motivado estudios de bio-prospección, análisis y cuantificación de alcaloides, sin embargo, muchos se producen en pequeñas concentraciones en fuente natural (2).

Métodos: La propagación de las especies *Phaedranassa lehmannii* y *Caliphruria subdentata* en cultivo in vitro, se realizó mediante la evaluación del efecto de reguladores de crecimiento, fotoperiodo y concentración de sacarosa (2,3). Además, se determinó el contenido de alcaloides en microbulbos provenientes de los diferentes tratamientos, mediante análisis cromatográficos por GC/MS.

Resultados y discusión: El estudio del efecto de los regulares de crecimiento ácido 1-naftalenacético (ANA) y la 6-bencilaminopurina (BAP) y kinetina (kin) en la micropropagación de las especies *P. lehmannii* y *C. subdentata* en etapa de multiplicación, reveló un incremento en la generación de brotes y crecimiento de la planta. Además, el perfil de alcaloides de la fracción alcaloidal proveniente de microbulbos propagados, determinado por GC/MS, mostro que la auxina ANA y las citoquininas BAP y Kin en concentraciones de 0.2, 1.0 y 1.0 mg/L respectivamente, estimulan la ruta de biosíntesis en la producción de alcaloides tipo licorina, galantamina y crinina. Se determinó también que el fotoperiodo y la concentración de sacarosa influyen positivamente en el crecimiento, producción y acumulación interna de metabolitos de interés, siendo factores determinantes en la micropropagación de especies de la subfamilia Amaryllidoideae. Finalmente, se logró establecer que las fitohormonas estudiadas influyen en la micropropagación y producción de alcaloides.

Referencias:

1. Alzate F, Lesmes M, Cortés N, Varela S, Osorio E. Sinopsis de la familia Amaryllidaceae en Colombia Synopsis of the family Amaryllidaceae in Colombia. *Biota Colomb.* 2019;20:2–20.
2. Rahimi Khonakdari M, Rezadoost H, Heydari R, Mirjalili MH. Effect of photoperiod and plant growth regulators on in vitro mass bulblet proliferation of *Narcissus tazetta* L. (Amaryllidaceae), a potential source of galantamine. *Plant Cell Tissue Organ Cult.* 2020;142(1):187–99.
3. Trujillo-Chacón LM, Pastene-Navarrete ER, Bustamante L, Baeza M, Alarcón-Enos JE, Cespedes-Acuña CL. In vitro micropropagation and alkaloids analysis by GC–MS of Chilean Amaryllidaceae plants: *Rhodophiala pratensis*. *Phytochem Anal.* 2020;31(1):46–56.



ESTUDIO PARA POTENCIALIZAR LA ACCIÓN MULTIDIANA FRENTE A LIPASA PANCREÁTICA Y α -GLUCOSIDASA DE LAS XANTONAS PROVENIENTES DE *Garcinia mangostana*.

Juan C. Cardozo-Muñoz¹, Juliet A. Prieto-Rodríguez², Fabian H. López-Vallejo¹, Luis E. Cuca-Suárez¹, Oscar J. Patiño-Ladino¹

¹Grupo de Investigación en Química de Productos Naturales Vegetales Bioactivos (QuiProNaB), Departamento de química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Colombia. ²Grupo de Investigación Fitoquímica Universidad Javeriana (GIFUJ), Departamento de Química Facultad de Ciencias, Pontificia Universidad Javeriana, Sede Bogotá, Colombia.

jcardozom@unal.edu.co, ojpatinol@unal.edu.co.

Palabras clave: Obesidad, diabetes, inhibición-enzimática, polifarmacológico.

Introducción: Las enzimas digestivas lipasa pancreática y α -glucosidasa, son importantes en el metabolismo de lípidos y carbohidratos, convirtiéndose en blancos terapéuticos atractivos para el tratamiento de la obesidad y patologías asociadas. Inhibidores polifuncionales de estas enzimas han cobrado gran interés, siendo hallados algunas sustancias activas en diversas especies como *Garcinia mangostana*.

Metodología: La metodología comprendió el estudio fitoquímico biodirigido sobre el epicarpio del fruto de *G. mangostana* para aislar e identificar las xantonas bioactivas. El estudio de optimización farmacodinámica con el fin de diseñar moléculas potencialmente más activas inspiradas en las naturales. Síntesis y evaluación de su potencialidad para inhibir las enzimas.

Resultados y Conclusiones: El estudio fitoquímico realizado al fruto de *Garcinia mangostana* permitió el aislamiento e identificación de cinco xantonas preniladas, siendo α -mangotina y γ -mangostina los compuestos más activos. Del estudio computacional se estableció el sitio y modo de interacción frente a cada enzima, hallando sitios alostéricos de inhibición y un tipo de inhibición no competitivo para el caso de α -mangotina, y a partir de la optimización farmacodinámica se establecieron ciertas modificaciones estructurales que aumentarían su afinidad por éstas. Así se sintetizaron algunos derivados estudiados computacionalmente por modificación de los grupos fenólicos en las posiciones 1, 3, 6 del anillo base de α -mangotina, evidenciándose cambios significativos en la actividad inhibitoria y modos de inhibición frente a las enzimas de interés en comparación a los compuestos naturales. Hallando así dos xantonas naturales y tres xantonas sintéticas con un alto potencial de inhibición polifarmacológico.

Referencias:

1. Chae HS, et al. (2016) Xanthones with pancreatic lipase inhibitory activity from the pericarps of *Garcinia mangostana* L. (Guttiferae). *Eur J Lipid Sci Technol* 118(9):1416–1421.
2. Martinez-Gonzalez AI, et al. (2017) In vitro inhibition of pancreatic lipase by polyphenols: A kinetic, Fluorescence spectroscopy and molecular docking study. *Food Technol Biotechnol* 55(4):519–530.
3. Ye GJ, et al. (2019) Design and synthesis of novel xanthone-triazole derivatives as potential antidiabetic agents: α -Glucosidase inhibition and glucose uptake promotion. *Eur J Med Chem* 177:362–373.



CARACTERIZACIÓN QUÍMICA Y ACTIVIDADES BIOLÓGICAS DEL EXTRACTO DE LA FLOR DE *Ipomoea horsfalliae*

Lady J. Sierra, Rafael E. González, Yuri Córdoba, Raquel E. Ocazonez, Elizabeth Quintero, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-
MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Ipomoea horsfalliae*, LC/MS, fotoprotección.

Introducción: *Ipomoea horsfalliae* Hook., se encuentra distribuida en América y África (1). El propósito de este trabajo fue determinar la composición química de los metabolitos secundarios presentes en el extracto de la flor de *I. horsfalliae* y determinar sus actividades biológicas (antioxidante, citotóxica, sensibilizante y fotoprotectora).

Métodos: La caracterización química del extracto hidroetanólico se realizó por LC/MS. La capacidad antioxidante se evaluó por ORAC. La citotoxicidad se determinó en seis líneas celulares por MTT. El efecto sensibilizante se evaluó cuantificando por ELISA la quimioquina IL-8 en cultivo de monocitos humanos. El efecto fotoprotector se midió según la disminución del contenido de dímeros de timina formados en el ADN por exposición UV-C.

Resultados y conclusiones: En el extracto de flor de *I. horsfalliae* se detectaron ácidos dicafeoilquínico y clorogénico, escopoletina, kaempferol, y derivados glicosídicos de cianidina y pelargonidina. El extracto (1380 $\mu\text{mol Trolox/g}$) mostró actividad antioxidante mayor que BHT (460 $\mu\text{mol Trolox/g}$) y α -tocoferol (550 $\mu\text{mol Trolox/g}$). La citotoxicidad del extracto fue baja ($\text{CC}_{50} > 351 \mu\text{g/mL}$) en células de riñón, hígado y monocitos, y moderada ($\text{CC}_{50} < 151 \mu\text{g/mL}$) en fibroblastos. El extracto no mostró efecto sensibilizante (IL-8: 960-1014 pg/mL; $p < 0.01$ respecto al control). La concentración de dímeros de timina ciclobutano en ADN, expuesto a UV, sin protección (2.70 $\mu\text{g/g}$) fue mayor que con extracto (1.90 $\mu\text{g/g}$) o Parsol® (1.40 $\mu\text{g/g}$). El extracto de flor de *I. horsfalliae* expuso actividades antioxidantes y fotoprotectoras, y no mostró tendencia a causar toxicidad y sensibilización; este extracto podría utilizarse como punto de partida para desarrollar un ingrediente natural.

Referencias:

1. Meira, M.; Silva, E.; David, J.; David, J. Review of the genus *Ipomoea*: traditional uses, chemistry and biological activities. *Braz. J. Pharmacogn.* **2012**, *22*, 682-713.



QUÍMICA INORGÁNICA.

ILDCL-533

VANADIUM-DOPED SODIUM PHOSPHOMOLYBDATE SALTS AS CATALYSTS IN THE NEROL OXIDATION WITH HYDROGEN PEROXIDE

Castelo Bandane Vilanculo, Márcio José Da Silva, Sukarno Olavo Ferreira, Rene Chagas Da Silva, Nelson Contreras Coronel.

Pedagogic University of Mozambique, FCNM, Federal University of Viçosa, Brazil. Universidad Tecnológica de Pereira (UTP), Pereira (Risaralda), Colombia.

ncontrer@utp.edu.co

Key-words: Vanadium phosphomolybdates; solid catalysts; green oxidation; etherification.

Abstract In this work, we have explored the catalytic activity of Keggin-type heteropolyanions $\text{PMo}_{12-n}\text{VnO}_{60}^{(3+n)-}$ ($n = 0, 1, 2, \text{ or } 3$) in the form of Sodium salts in green oxidation routes of terpene alcohols with hydrogen peroxide. Nerol was the model molecule selected to assess the impacts of main reaction parameters, such as temperature, load catalyst, reactant stoichiometry. The effect of the presence of Vanadium in the structure of phosphomolybdate catalysts in different proportions (i.e., V1, V2, and V3 loads/ per anion) was assessed. All the catalysts were characterized by various techniques such as powder X-ray diffraction, attenuated diffuse reflectance infrared spectroscopy, thermogravimetric analysis, N_2 adsorption-desorption, surface area measurement, scanning electronic microscopy, X-ray dispersive spectroscopy, and n- butylamine potentiometric titration. The effect of allylic alcohol substrate was also assessed. Special attention was dedicated to correlating the composition and properties of the Vanadium-doped phosphomolybdic acid salts with their catalytic activity.

References

1. Coronel, N.C.; Da Silva, M.J.; Ferreira, S.O.; Da Silva, R.C.; Natalino, R. K5PW11NiO39- catalyzed oxidation of benzyl alcohol with hydrogen peroxide. *ChemSelect*, **2019**, 4, 302- 310
2. Tsolakis, N.; Bam, W.; Srai, J.S.; Kuma, M. Renewable chemical feedstock supply network design: The case of terpenes. *J. Clean. Prod.*, **2019**, 222, 802-822.
3. Denicourt-Nowicki, A.; Rauchdi, M.; Ali, M.A.; Roucoux, A. Catalytic Oxidation Processes for the Upgrading of Terpenes: State-of-the-Art and Future Trend. *Catalysts*, **2019**, 9, 893-932.



IMPACTS OF Sn(II) DOPING ON THE KEGGIN PHOSPHOMOLYBDIC ACID CATALYZED ETHERIFICATION OF GLYCEROL WITH TERT-BUTYL ALCOHOL

Márcio José Da Silva, Diego Morais Chaves, Sukarno Olavo Ferreira, Rene Chagas Da Silva, Nelson Contreras Coronel.

Federal University of Viços, Brazil. Universidad Tecnológica de Pereira (UTP) Pereira (Risaralda), Colombia.

ncontrer@utp.edu.co

Key-words: Sn(II) phosphomolybdates; solid catalysts; glycerol ethers; techno-economic analysis.

Abstract In this work, phosphomolybdic acid salts were synthesized by the proton exchanges via Sn(II) cations (i.e., $H_3-xSn_x/2PMo_{12}O_{40}$; $x = 0.0, 1.0, 2.0, 3.0$) and evaluated in the etherification reactions of glycerol with tert-butyl alcohol (TBA). The integrity of Keggin anion after the synthesis was confirmed by infrared spectroscopy analysis. Physical properties were determined through analyses of powder X-rays diffraction patterns, thermal analyses, N_2 adsorption-desorption, scanning electron microscopy. The nature of acid sites was identified by adsorbed pyridine FT-IR spectroscopy. The strength and amount of acid sites were measured by ammonia temperature-programmed desorption and potentiometric titration with n-butylamine. After investigating the impacts of Sn(II) doping on the activity of synthesized salts, we have found that the $Sn_3PMo_{12}O_{40}$ catalyst was the most active and selective toward glyceryl ethers. High yields of mono and di glyceryl tert-butyl ethers were achieved after 4 h of reaction at 393 K. The highest activity of $Sn_3PMo_{12}O_{40}$ was assigned to the greater Lewis acidity strength. The impacts of the main reaction parameters such as reactants stoichiometry, catalyst load, time, and reaction temperature were assessed.

References:

1. Nda-Umar, U.I.; Ramli, I.; Taufiq-Yap, Y.H.; Muhamad, E. N. An overview of recent research in the conversion of glycerol into biofuels, fuel additives and other bio-based chemicals, *Catalysts*. **2019**, *9*, 15-62.
2. Appaturi, J. N.; Ramalingam, R.J.; Al-Lohedan, H.A.; Khoerunnisa, F.; Ling, T.C.; Ng, E.P. Selective synthesis of dioxolane biofuel additive via acetalization of glycerol and furfural enhanced by MCM-41-alanine bifunctional catalyst. *Fuel*, **2021**, *288*, 119573.
3. Da Silva, M.J.; Liberto, N.A.; Leles, L.C.A.; Pereira, U.A. $Fe_4(SiW_{12}O_{40})_3$ -catalyzed glycerol acetylation: Synthesis of bioadditives by using highly active Lewis acid catalyst. *J. Mol. Catal. A: Chem.* **2016**, *422*, 69–83.

OBTENCIÓN DEL TRIAZENO BENZOATO DE 2-(((4-OXO-3,4-DIHDRO-1,2,3- BENZOTRIAZIN-3-IL)ETIL)TRIAZENIL)METILO A PARTIR DE LA REACCIÓN ENTRE ETILENDIAMINA Y LA SAL DE DIAZONIO PROVENIENTE DE 2-AMINO BENZOATO DE METILO. FORMACIÓN DE COMPLEJOS METÁLICOS CON MERCURIO (II)

Erika Martínez Ovalle, Gema Eunice Acosta, Diego González-Salas.

Universidad Militar Nueva Granada

diego.gonzalez@unimilitar.edu.co

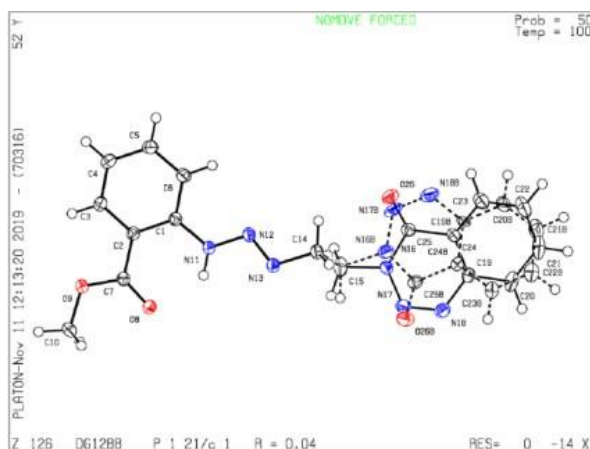
Palabras claves: Triazenos, Diazonio, Mercurio

Introducción: La identificación de iones mercurio (II) en medio acuoso es un objetivo ambicioso que tenemos gracias a la formación de complejos con ligandos orgánicos de fácil obtención. En el presente trabajo obtenemos el ligando con la presencia del grupo triazeno (-N=N-NH-) que tiene especial afinidad por metales de transición.

Métodos: La reacción entre etilendiamina y la sal de diazonio proveniente de 2-aminobenzoato de metilo se realizó en medio básico precipitando 1,2-bis-(4-oxo-3,4-dihidro-1,2,3-benzotriazin-3-il)etano (**I**) cuantitativamente, al cambiar las condiciones de reacción utilizando buffer acetato de amonio se obtuvo benzoato de 2-(((4-oxo-3,4-dihidro-1,2,3-benzotriazin-3-il)etil)triazenil) metilo (**II**) con excelente rendimiento. Se caracterizaron por difracción de Rayos-X.

Resultados y conclusiones: La obtención de (**I**) se reportó por Hunter¹, involucrando varios pasos de reacción. En el presente trabajo por una reacción en medio acuoso y gobernando el pH se logró obtener el compuesto (**I**) cuantitativamente. Al evidenciar la hidrólisis del éster metílico en el producto con la consecuente ciclación intramolecular, se decidió cambiar las condiciones de pH y llevar a cabo la reacción de N-acoplamiento de la sal de diazonio con etilendiamina usando un buffer de acetato de amonio. Se obtuvo así el compuesto (**II**) con el grupo triazeno con un hidrógeno que puede ser fácilmente retirado para la obtención del ion triazenuro y la posterior formación del compuesto de coordinación con el mercurio (II).

Ambos compuestos fueron caracterizados por sus propiedades físicas, espectros de RMN y difracción de Rayos X. La estructura cristalina de la molécula (**II**) presenta un desorden conformacional de todo el anillo en dos posiciones giradas 180°.



Referencias:

1. Hunter, N., & Vaughan, K. (2006). Synthesis and characterization of a series of 1, x-bis-(4-oxo-3, 4-dihydro-1, 2, 3-benzotriazin-3-yl) alkanes. *Journal of heterocyclic chemistry*, 43(3), 731-738.
2. J Bertolasi, V., Hunter, N. J., & Vaughan, K. (2011). An X-Ray Crystallographic Study of Five Compounds from a Series of 1, x-bis-(4-Oxo-3, 4-dihydro-1, 2, 3-benzotriazin-3-yl) alkanes. *Journal of Chemical Crystallography*, 41(8), 1105-1113.
3. Rivera, A., & González-Salas, D. (2010). Synthesis and characterization of novel triazenes from the reaction of the cyclic aminal 1, 3, 6, 8-tetraazatricyclo [4.3. 1.13, 8] undecane (TATU) with diazonium ions. *Tetrahedron Letters*, 51(18), 2500-2504.



Preparación de una MOF de Ti funcionalizada con un complejo de dióxido de molibdeno para la oxidación selectiva de monoterpenos con luz UV-Vis y O₂.

Laura Milena Valdivieso Zárate, Gustavo Emilio Ramírez Caballero, Fernando Martínez Ortega.

Universidad Industrial de Santander

lauravaldivieso@hotmail.com

PALABRAS CLAVES: UiO-67 (Zr/Ti), biperidina, transferencia de átomos de oxígeno.

INTRODUCCIÓN: El complejo de dióxido-molibdeno cataliza la Transferencia de Átomo de Oxígeno (TAO) hacia compuestos orgánicos. La formación del dímero en solución, inhibe la TAO, la cual se evita anclando el complejo en una MOF. Se usa la biperidina dicarboxilada como ligando para formar el complejo dióxido-Mo en la MOF UiO-67.

MÉTODOS: El complejo de dióxido-Mo anclado a la MOF UiO-67 (Zr/Ti) se caracteriza mediante difracción de rayos X en polvo (XRD), espectroscopia infrarroja (FT-IR), Raman, ultravioleta-visible (UV-Vis) y fotoelectrónica de rayos X (XPS), un análisis termogravimétrico (TGA), adsorción-desorción de N₂ y Microscopía electrónica de barrido (SEM).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Utilizando la MOF UiO-67 es posible intercambiar el Zr por Ti mediante su incorporación iónica post-sintética permitiendo la formación de grupos hetero-Zr-Ti con puentes oxo, que modifica las propiedades fotoquímicas y mantiene la estructura de la MOFs base.

Durante el proceso de la TAO hacia el compuesto orgánico, se forma el Mo^(v), en el cual la regeneración de la unidad catalítica activa de Mo^(vi) requiere la transferencia de electrones, lo cual facilita su interacción con el O₂ y uso la radiación UV-Vis para proporcionar la densidad electrónica. En consecuencia, el complejo de tipo dióxido-Mo anclado en la MOF UiO-67 (Zr/Ti) permite la TAO fotoinducida usando el oxígeno molecular como agente oxidante. Este sistema catalítico permitió la oxidación selectiva de monoterpenos, específicamente el α -pineno y de la carvona, observándose una alta conversión y selectividad hacia el respectivo epóxido.

REFERENCIAS:

1. Bravo-Sanabria, C. A., Solano-Delgado, L. C., Ospina-Ospina, R., Martínez-Ortega, F., & Ramírez-Caballero, G. E. (2020). Incorporation of a dióxido-molibdeno (VI) complex into a titanium-functionalized Zr(IV)-Based metal-organic framework. *Microporous and Mesoporous Materials*, 305 (March). <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2020.110359>
2. Martínez Q, H., Paez-Mozo, E. A., & Martínez O, F. (2020). Selective Photo epoxidation of (R)-(+)- and (S)-(-)-Limonene by Chiral and Non-Chiral Dióxido Mo(VI) Complexes Anchored on TiO₂-Nanotubes. *Topics in Catalysis*, (Vi). <https://doi.org/10.1007/s11244-020-01355-3>
3. Navarro Amador, R., Carboni, M., & Meyer, D. (2016). Photosensitive titanium and zirconium Metal Organic Frameworks: Current research and future possibilities. *Materials Letters*, 166, 327–338. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2015.12.023>



RELACIÓN ENTRE LA ACIDEZ SUPERFICIAL Y ACTIVIDAD DE SÍLICE-ALÚMINAS AMORFAS SIN IMPREGNAR E IMPREGNADAS CON ÁCIDO FOSFÓRICO EN LA DESHIDRATACIÓN DE METANOL

Diego Rivera-Barrera¹, Alexander Guzmán M², Daniel Molina V¹, Juan Carlos Poveda¹

¹Universidad Industrial de Santander, Carrera 27 calle 9, Bucaramanga, Santander, Colombia. ²Instituto Colombiano del Petróleo (ICP), vía Piedecuesta km 7, Piedecuesta, Santander, Colombia.

diego.rivera2@correo.uis.edu.co

PALABRAS CLAVES: Sílice-alúmina amorfa, Acidez, Actividad catalítica, Catálisis heterogénea.

INTRODUCCIÓN: Durante los últimos años, el dimetiléter (DME) ha recibido atención mundial como el combustible alternativo más prometedor, ambientalmente benigno, económico y de combustión limpia para motores diésel [1,2]. Para la producción de dimetiléter se han usado alúminas modificadas con silicio reduciendo la cantidad de coque y subproductos [3,4].

MÉTODOS : Sílice-alúminas amorfas (ASAs) fueron sintetizadas variando la ruta de síntesis, relación Si/Al y temperaturas de calcinación. Las ASAs fueron modificadas post-síntesis usando ácido fosfórico (ASAs-P). Las propiedades ácidas se determinaron por espectroscopia FT-IR-piridina. El rendimiento catalítico de los materiales fue evaluado mediante la deshidratación de metanol (T=300°C).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: En el grafting de Si/Al₂O₃, se usó la γ -alúmina como soporte, la cual presentó el 100% de conversión de metanol a dimetiléter gracias a sus sitios Lewis activos en la superficie (100). La adición de Si causa disminución de la actividad por su reacción sobre sitios activos de la alúmina. En el grafting de Al/SiO₂, se generaron sitios Lewis de diferente fuerza ácida incrementando el rendimiento catalítico. El método sol-gel produjo sitios Brønsted y Lewis fuertes, evidenciando la participación de sitios ácidos silanol pseudo puente (PSB-Al) como centros activos en la deshidratación de metanol. La modificación con fósforo provocó la disminución de la concentración de sitios ácidos fuertes y la formación de sitios débiles y medios (P-OH) reduciendo su actividad respecto a los materiales de partida. En conclusión, los sitios activos en la deshidratación de metanol fueron los sitios ácidos de Lewis de fuerza débil y media, PSB-Al y P-OH.

REFERENCIAS:

1. Haro, P.; Trippe, F.; Stahl, R.; Henrich, E. Applied Energy 108 (2013) 54-65.
2. Park, S. P.; Lee, C. S. Energy Conversion and Management, 86 (2014) 848-863.
3. Jun, K.W.; Lee, H.S.; Roh, H.S.; S.E, Park. Bull. Korean Chem. Soc. 23 (2002) 803-806.
4. Topp-Jorgensen, J. U.S. Patent, 4536485, (1985).



SÍNTESIS DE COMPLEJOS DE CROMO(III) CON LIGANDOS DERIVADOS DEL PIRAZOL.

Alejandra MATEUS-GÓMEZ¹, John J. HURTADO,²

^{1,2}Departamento de Química, Universidad de los Andes, Carrera 1 No. 18A-12, 111711 Bogotá, Colombia.

a.mateus@uniandes.edu.co

PALABRAS CLAVE: Complejos, Pincer, Cromo(III), Pirazol.

Actualmente, el tratamiento de enfermedades de impacto social es un tema de interés. La enfermedad de Chagas (causada por el parásito *Trypanosoma-cruzi*) está muy extendida en América.¹ Para su tratamiento se utilizan fármacos derivados de azoles (Nifurtimox y Benznidazol); sin embargo, este suele abandonarse debido a los efectos secundarios.²

En consecuencia, sintetizar sustancias anti-*T.cruzi* que tengan mejor actividad biológica y menos efectos secundarios ha resultado interesante.³ La síntesis de complejos metálicos llama especial atención dadas características como fácil preparación, estabilidad al aire y termoestabilidad. Además, los complejos con ligandos derivados de azoles han mostrado excelentes resultados de actividad biológica.⁴⁻⁷

En nuestro grupo de investigación se sintetizó un nuevo complejo con cromo(III) y ligando derivado de pirazol con buen rendimiento caracterizándose por diferentes técnicas de análisis, incluida la difracción de rayos X monocristalino. El complejo resultó ser prometedor contra *T. cruzi* mostrando buena actividad contra el parásito (IC₅₀= 1,08 µg/mL-1), mejor que los valores de benznidazol (BZ) (IC₅₀= 2,94 µg/mL-1). Además, el complejo se evaluó frente a líneas celulares sanas y no se mostró ser citotóxico en comparación con BZ (IC₅₀= 464,7 µg/mL-1 frente a 126,04 µg/mL-1).⁸

En la presente investigación, se sintetizaron cuatro complejos de cromo(III) con ligandos derivados del pirazol. Estos se obtuvieron con altos rendimientos y su síntesis fue sencilla y económica. Asimismo, se caracterizaron por diferentes técnicas espectroscópicas y analíticas y se esperan resultados prometedores en su actividad biológica frente a cepas de *T.cruzi* y baja o nula toxicidad frente a líneas celulares sanas.

REFERENCIAS:

1. Reed, S. L., et al; Clin. Infect. Dis. 2018, 67, 323–326.
2. Wilkinson, S. R., et al; Expert Rev. Mol. Med. 2009, 11, 1–24.
3. Patterson, S., et al; Trends Parasitol. 2014, 30, 289–298.
4. Castillo, K. F., et al; J. Braz. Chem. Soc. 2016, 27, 2334–2347.
5. Murcia, R. A., et al; Molecules 2018, 23, 1–16.
6. Novak, M. S., et al; J. Biol. Inorg. Chem. 2016, 21, 347–356.
7. Simpson, P. V., et al; Organometallics 2015, 34, 3809–3815.
8. Hurtado, J, et al; J. Mol. Struct. 2017, 1146, 365–372.



SÍNTESIS DE COMPLEJOS DE Cu(II) DERIVADOS DE LIGANDOS TIPO PINCER NO-SIMÉTRICOS Y SU POTENCIAL ACTIVIDAD CATALÍTICA.

David Enrique Ezenarro Salcedo, Daniela Fonseca López, John Jady Hurtado Belalcázar.

Universidad de los Andes - Bogotá D.C. - Colombia

jj.hurtado@uniandes.edu.co

Palabras clave: Cobre(II), Cumarina, Pirazol, Pincer.

Introducción: Los ligandos tipo pincer son agentes quelantes que se unen a un centro metálico a través de tres sitios adyacentes coplanares formando dos metalociclos de 5 o 6 miembros. Lo anterior, le confiere una mayor estabilidad al complejo permitiendo su uso en diferentes aplicaciones, especialmente en catálisis.

Métodos: Primero, se realizó la síntesis de los precursores haciendo reaccionar un compuesto derivado de piridina y ftalimida, con el respectivo pirazol. Posteriormente, la ftalimida fue sustituida por una base schiff derivada de cumarina. Una vez obtenidos los ligandos, estos se hicieron reaccionar con la respectiva sal de Cu(II).

Resultados y conclusiones: Se lograron obtener los 4 ligandos y sus respectivos complejos de Cu(II) con buenos rendimientos y fueron caracterizados completamente. Adicionalmente, se ensayaron en reacciones de interés como catalizadores.

Referencias:

1. Mukherjee, A.; Milstein, D. Homogeneous Catalysis by Cobalt and Manganese Pincer Complexes. *ACS Catal.* 2018, 8 (12), 11435–11469. <https://doi.org/10.1021/acscatal.8b02869>.
2. Younus, H. A.; Su, W.; Ahmad, N.; Chen, S.; Verpoort, F. Ruthenium Pincer Complexes: Synthesis and Catalytic Applications. *Adv. Synth. Catal.* 2015, 357 (2–3), 283–330. <https://doi.org/10.1002/adsc.201400777>.
3. Bauer, G.; Hu, X. Recent Developments of Iron Pincer Complexes for Catalytic Applications. *Inorg. Chem. Front.* 2016, 3 (6), 741–765. <https://doi.org/10.1039/C5QI00262A>.



REVISIÓN DEL MÉTODO DE LA DETERMINACIÓN DE pH EN PINTURAS AL AGUA TIPO EMULSIÓN EN COLOMBIA: ACTUALIZACIÓN METROLÓGICA

Maria Fernanda Peralta Morales, Andrea del Pilar Sandoval Rojas, Ronald Orlando Cristancho Amaya, Miguel Alfonso Ramos Sánchez.

Universidad Nacional de Colombia. Instituto Nacional de Metrología, Colombia.

mperaltam@unal.edu.co

Palabras Claves: pH, pintura, metrología, calibración.

Introducción: La industria de las pinturas es uno de los mercados más relevantes en Colombia. Uno de los métodos que permite evaluar el estado y calidad de la pintura es la determinación de pH. Por lo tanto es importante realizar un mejoramiento y actualización del método desde un enfoque metrológico.

Metodos: La determinación de pH en pinturas al agua tipo emulsión, se seguirá el procedimiento según lo establecido en la NTC 624:1972 e ISO 19396-1:2017 y según los parámetros establecidos metrológicamente variando la matriz y la calidad de la muestra con un pH metro de inmersión combinado de membrana de vidrio.

Resultados y Conclusiones: De acuerdo con la revisión bibliográfica realizada, se encuentra que la norma técnica colombiana de 1972 propone un método de medición de pH diferente a los estándares internacionales (ISO 19396-1:2017) y a los métodos implementados actualmente por las empresas colombianas. Por lo tanto, es de importancia mejorar las actividades implícitas en la medición del valor de pH en pinturas al agua tipo emulsión que favorezcan su reproducibilidad y eventualmente permitan brindar las bases para la actualización de la norma técnica colombiana.

Desde el enfoque metrológico se busca realizar un estudio de las variables que afectan la medición y evaluar los retos analíticos que involucra la determinación de pH como el tipo de pintura, número de replicas, método de lavado del electrodo, método de preparación de la muestra, entre otros.

Referencias:

1. ISO/TC 35/SC 9 General test methods for paints and varnishes. (2017). 19396-1:2017 Paints and varnishes. Determination of pH value Part 1.
2. ICONTEC. (1972). NTC 624:1972 Pinturas. Pigmentos y cargas. Determinación del pH. Bogotá.
3. Die Deutsche Forschungsgesellschaft für Oberflächenbehandlung e.V. (2017) Messmethoden der industriellen Lackiertechnik: <https://www.youtube.com/watch?v=WHyIPGrt5aw>
4. Kratz, L. (1950). Die Glaselektrode und ihre Anwendungen. Frankfurt: Dietrich Steinkopff.
5. Hughes, A. a. (2013). Testing the Waters: New Technical Applications for the Cleaning of Acrylic Paint Films and Paper Supports. New York: The Book and Paper Group Annual 32.
6. Centro Nacional de Producción Más Limpia. (2020). Estudio de mercado de las pinturas en Colombia. Medellín.



QUÍMICA ORGÁNICA.

ILCCL-471

SYNTHESIS OF NEW HYBRID NITRIC OXIDE-RELEASING MOLECULES FROM PARACETAMOL PRESENT IN EXPIRED COMMERCIAL TABLETS

Daniela Calderón Lamus, Carlos E. Puerto Galvis, Vladimir V. Kouznetsov

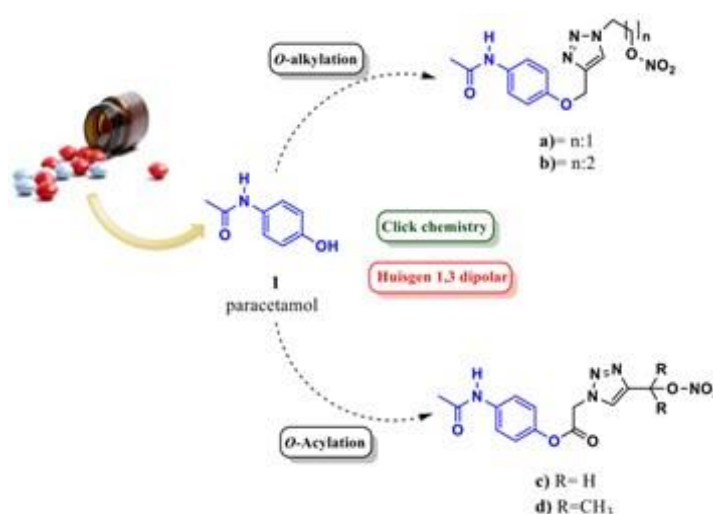
Universidad Industrial de Santander.

daniela.calderon2@correo.uis.edu.co

key-words: Molecular hybrids, paracetamol, Huisgen-1,3-dipolar.

Nitric oxide (NO) releasing molecules are relevant hybrids due to their ability to increase the intracellular concentration of NO when the body cannot produce enough for biological needs. Various studies have shown that high concentrations of NO favor growth inhibition and apoptosis of cancer cells [1].

Within this context, we developed a synthetic approach to access new acetaminophen-triazole-NO hybrids through O alkylation, O-acylation, and 1,3-dipolar cycloaddition using CuSO₄.5H₂O as a catalyzer. This methodology involved mild reaction conditions of click chemistry, green chemistry, low catalytic load (5 mol%), and short reaction times. At last, we esterified intermediate molecules. The yield of paracetamol extraction from commercial tablets was 93-96%, whereas the yields of hybrids **a-d** were 60-90% (scheme 1). The reactions were carried out under environmentally friendly conditions using recycled raw material that usually contaminates water sources [2]. Here, we were able to purify some of the compounds without using column chromatography. In addition, we used propylene carbonate as a solvent due to its low toxicity. Finally, we characterized molecules **a-d**, paracetamol, and all the intermediates isolated in their synthesis using NMR, IR, and GC-MS. We present the corresponding spectra.



Scheme 1. Synthesis of **a**, **b**, **c**, and **d** from expired paracetamol pills.

REFERENCES

- Huerta, S.; Chilka, S.; Bonavida, B. Nitric Oxide Donors: Novel Cancer Therapeutics (Review). *Int. J. Oncol.*, **2008**, *33*, 909-927.
- Bataduwaarachchi, V.R.; L. Weeraratne, C. Global medication waste management practices: challenges and opportunities in developing countries. *Inter. J. Basic Clin. Pharm.*, **2016**, *5*, 2290-2294.



EFFICIENT SYNTHESIS OF NOVEL N-PROPARGYL TETRAHYDROQUINOLINE DERIVATIVES THROUGH THE CATIONIC POVAROV REACTION AND STUDY OF ITS ANTIOXIDANT ACTIVITY AND POTENTIAL USE AS AChE and BChE INHIBITORS.

Meiby Fernández Rojas, Rícelia Gonzalez Serpa, Margarita Gutierrez Cabrera.

Universidad de Talca, Chile.

mgutierrez@utalca.cl

KeyWord: Tetrahydroquinolines, Propargylamines, Antioxidant activity, AChE and BChE.

New N-propargyl tetrahydroquinolines 2a-g have been synthesized efficiently through the cationic Povarov reaction (a domino Mannich/Friedel-Crafts reaction), catalyzed by Indium (III) chloride (InCl₃), from the corresponding N-propargylanilines preformed, formaldehyde and N-vinylformamide, with good to moderate yields. All tetrahydroquinoline derivatives obtained were evaluated in vitro as inhibitors of AChE and BChE; and free radical scavengers.

In the research of biologically active molecules, free radicals have been linked to several degenerative diseases including neurodegenerative and cardiovascular disorder, atherosclerosis and cancer (Aruoma, 1998). Although the discovery of antioxidant compounds has been an area widely studied (Kouznetsov et al., 2011; Bulut et al., 2018; Martelli and Giacomini, 2018) it is necessary to continue in the search of new natural or synthetic compounds that can act as free radical scavengers and help in the treatment or control of diseases related to oxidative stress.

Heterocyclic compounds, especially nitrogen heterocycles, are a very important class of compounds with application in the pharmaceutical industries, which comprise about 60% of all pharmacological substances. The tetrahydroquinoline (THQ) ring system, in particular, is a common structural motif found in numerous biologically active natural products showing broad biological activities (Nammalwar and Bunce, 2014).

In the last decades, a great number of synthetic methods for access to THQs derivatives have been reported (Sridharan et al., 2011). In many cases, these methodologies involve an intramolecular Friedel Crafts reaction of N-substituted anilines with a suitable functional group bound to the nitrogen atom (Abonia et al., 2013). In this sense, the use of multicomponent Povarov reaction, catalyzed by Lewis or Brønsted acids between N-arylimines (obtained from anilines and aryl (alkyl)aldehydes) and electron-rich alkenes, is maybe the most powerful tool that provides quick and efficiently THQ scaffold with great structural diversity. Recently, we have been successfully exploring the cationic version of the Povarov reaction (a domino Mannich/Friedel-Crafts reaction). This method resulted highly efficient to access different N- derivatives of THQs (Romero Bohorquez et al., 2016; Acelas et al., 2017), including the synthesis of new N-allyl/propargyl 1,2,3,4-THQs, promissory dual inhibitors against AChE and BChE enzymes (Rodriguez et al., 2016).

Our working group has some experience in the obtaining and biological evaluation of tetrahydroquinoline derivatives aimed at the treatment of Alzheimer's disease, mainly due to the inhibitory property of acetylcholinesterase that they present (Rodriguez et al., 2016), (Rodriguez et al., 2019).

Referencias:

1. Aruoma, 1998
2. Kouznetsov et al., 2011;
3. Bulut et al., 2018;
4. Martelli and Giacomini, 2018
5. Nammalwar and Bunce, 2014



ILCCL-611

Optical and Electrochemical Effect of Triarylamine Inclusion to Alkoxy BODIPY-Based Derivates.

Juan Sebastian Rocha Ortiz¹, Alberto Insuasty², Alejandro Ortiz¹.

Universidad del Valle. Aix Marseille Université, CNRS, Centrale Marseille.

juan.sebastian.rocha@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: BODIPY, Triarylamine, Charge-Tranfer, Light-Harvesting.

Organic photovoltaics has been called interest as an alternative for solving the drawbacks of first and second generation of solar cells (Silicon wafer and CIGS) due to their high cost, long payback time and use of scarce elements. In this context, the use of triarylamine and BODIPY to build molecules for their application in solar cells is promising on account of their interesting properties. This work presents the synthesis of three BODIPY-triarylamine dyads through palladium-catalyzed cross

linking and their respective characterization using several spectroscopic techniques. It's been observed that with the combinations of these two moieties there is an improvement in harvesting light properties of molecules due their absorption in an broaden region in visible spectrum. This indicates existence of a push-pull system in which the two triarylamine units acts as an electro-donor fragments and BODIPY core as electro-acceptor moiety which plays the role of antenna. On other hand, the inclusion of alkoxy units in triarylamine improve their donor strength shown a bathochromic effect respectto unsubstituted. However, is important to support these results with theoretical calculations and electrochemical studies previous evaluation of compounds in solar cells.

References:

1. Wanwong, S.; Surawatanawong, P.; Khumsubdee, S.; Kanchanakungwankul, S.; Wootthikanokkhan, J. Heteroat. Chem. 2016, 27 (5), 306–315.
2. Liao, J.; Wang, Y.; Xu, Y.; Zhao, H.; Xiao, X.; Yang, X. Tetrahedron 2015, 71 (31), 5078–5084.



SYNTHESIS OF AN EQUIMOLECULAR MIXTURE OF TWO DIASTEREOMERS OF METHYL 2-(3-(5,6-DIMETHOXY-1-OXO-2,3-DIHYDRO-1H-INDEN-2-YL)PROPANAMIDE)-3-METHYLPENTANOATE FROM RAC 3-(5,6-DIMETHOXY-1-OXO-2,3-DIHYDRO-1H-INDEN-2-YL)PROPANOIC ACID.

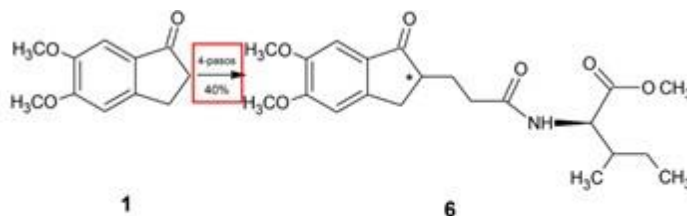
Ender E. Guerrero, Ullrich Stahl, Elvia V. Cabrera, Jhonny G. Correa, Jonathan N. Herrera, Yonathan de J. Parra, Jesús Romero, Hegira Ramírez.

Central University of Ecuador, Bolivia, Quito, University of the Americas, Ecuador, Quito.

inherrerao@uce.edu.ec

A synthetic strategy and the spectroscopic and spectrometric characterization of derivatives of 5,6-dimethoxy-2,3-dihydro-1H-inden-1-one (**1**) was carried out, obtained from the condensation of rac-3-(5,6-dimethoxy-1-oxo-2,3-dihydro-1H-inden-2-yl) propanoic acid (**4**) with L-isoleucine methyl ester hydrochloride (**5**). Indanones are key precursors in the synthesis of derivatives with important pharmacological activity and in the biosynthesis of natural products. They are present in a variety of commercial products used for the treatment of Alzheimer's disease and cancer cells¹²; in natural medicine they are used as antihypertensives and diuretics³⁴.

The synthesis of three new compounds derived from 5,6-dimethoxy-2,3-dihydro-1H-inden-1-one (**1**) was carried out, the rac-3-(5,6-dimethoxy-1-oxo-2,3-dihydro-1H-inden-2-yl) propanoic acid (**4**) and from this the diastereoisomers of methyl 2-(3-(5,6-dimethoxy-1-oxo-2,3-dihydro-1H-inden-2-yl)propanamide)-3-methylpentanoate (**6**) were obtained as products. This last compound was obtained in 4 reaction steps with an overall yield of 40%.



Graphical abstract. Synthesis of derivatives of 5,6-dimethoxy-2,3-dihydro-1H-inden-1-one (**1**).

References:

1. Leoni, L. M.; Hamel, E.; Genini, D.; Shih, H.; Carrera, C. J.; Cottam, H. B.; Carson, D. A. Indanocine, a Microtubule Binding Indanone and a Selective Inducer of Apoptosis in Multidrug-Resistant Cancer Cells. *JNCI J. Natl. Cancer Inst.* 2000, 92 (3), 217–224. <https://doi.org/10.1093/jnci/92.3.217>.
2. Dubois, B.; Tolosa, E.; Katzenschlager, R.; Emre, M.; Lees, A. J.; Schumann, G.; Pourcher, E.; Gray, J.; Thomas, G.; Swartz, J.; Hsu, T.; Moline, M. L. Donepezil in Parkinson's Disease Dementia: A Randomized, Double-Blind Efficacy and Safety Study. *Mov. Disord. Off. J. Mov. Disord. Soc.* 2012, 27 (10), 1230–1238. <https://doi.org/10.1002/mds.25098>.
3. Bhorkade, S. B.; Gavhane, K. B.; Shinde, V. S. Total Synthesis of (±) Mutisianthol and (±) Epi-Mutisianthol via Intramolecular Oxidative Heck Cyclization Approach. *Tetrahedron* 2016, 72 (16), 1954–1959. <https://doi.org/10.1016/j.tet.2016.02.057>.
4. Kakde, B. N.; Parida, A.; Kumari, P.; Bisai, A. Total Syntheses of (±)-Taiwaniaquinol D and (±)-Taiwaniaquinone D via a Key Lewis Acid-Catalyzed Nazarov Type Cyclization. *Tetrahedron Lett.* 2016, 57, 3179–3184.



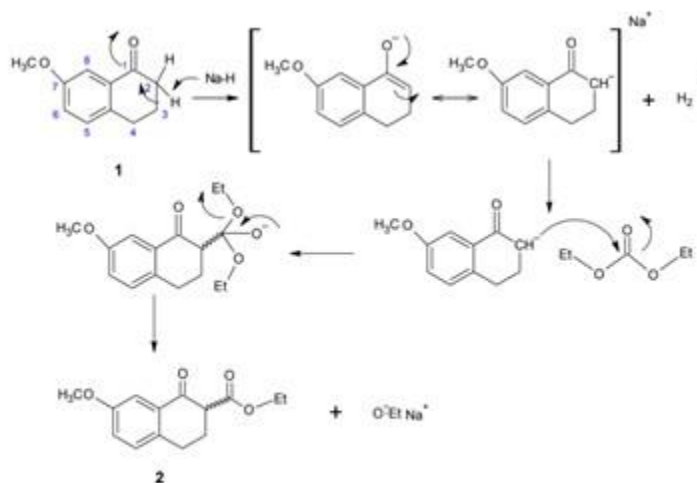
KINETIC STUDY OF THE CARBOXYLATION REACTION OF 7-METHOXY-1-TETRALONE.

Humberto Gonzalez, Ullrich Stahl, Elvia V. Cabrera, Jhonny G. Correa, Jonathan N. Herrera, Yonathan de J. Parra, Jesús Romero, Hegira Ramírez.

Universidad Central del Ecuador, Bolivia, Quito, Universidad de las Américas, Ecuador, Grupo de Investigación en Moléculas y Materiales Funcionales (MoléMater).

jnherrerao@uce.edu.ec

A kinetic study of the carboxylation reaction of 7-methoxy-1-tetralone (**1**) was carried out to obtain the β -ketoester (**2**). The pseudo-order of reaction in respect to tetralone **1** was determined by applying the power law, obtaining a good fit in the kinetic model, since the results gave a high correlation coefficient and a minimization in the deviation between the calculated and experimental data. The final product was characterized by FTIR and UV-Vis spectroscopy and the progress of reaction was monitored by high performance liquid chromatography (HPLC). Finally, the effect of temperature was studied, and the parameters of the Arrhenius equation (rate constant, activation energy and pre-exponential factor) were determined, demonstrating a high sensitivity for small temperature variations.



Graphical abstract. Reaction mechanism of the carboxylation of 7-methoxy-1-tetralone (I).

References:

1. Cabrera, E.; Gil, A.; Ortega, J.; Bedoya, L.; Sanchez, J.; Banerjee, A. A One-Pot Synthesis of 6-Isopropyl-7-Methoxy-1-Tetralone and 6-Isopropyl-7-Methoxy-2-Tetralone. *Org. Prep. Proceed. Int.* 2014, 46. <https://doi.org/10.1080/00304948.2014.903146>.
2. Reddy, P. A.; Rao, G. S. K. Vilsmeier Reaction on Some 6- and 7-Methoxy-1- and 2- Tetralones. *Proc. Indian Acad. Sci. - Chem. Sci.* 1980, 89 (5), 435–439. <https://doi.org/10.1007/BF02881057>.
3. Wen, Y.; Cai, X.; Chen, S.; Fu, W.; Chai, D.; Zhang, H.; Zhang, Y. 7-Methoxy-1-Tetralone Induces Apoptosis, Suppresses Cell Proliferation and Migration in Hepatocellular Carcinoma via Regulating c-Met, p-AKT, NF-KB, MMP2, and MMP9 Expression. *Front. Oncol.* 2020, 10, 58. <https://doi.org/10.3389/fonc.2020.00058>.



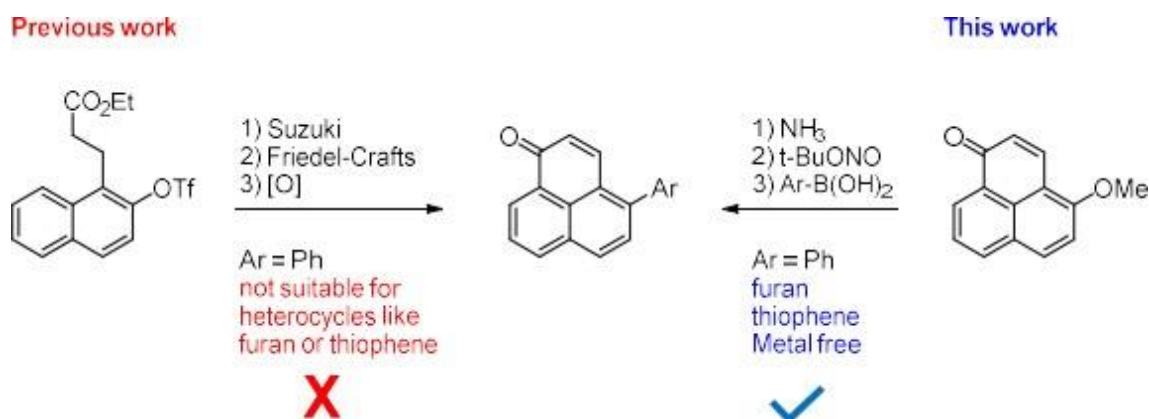
THE SYNTHESIS OF 4-ARYL-PHENALENONES REVISITED.

Catalina Hoyos, Marisol Cano, Julián Barrera, Felipe Otálvaro.*

Síntesis y Biosíntesis de Metabolitos Naturales, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia.*(FO)

leon.otalvaro@udea.edu.co

The synthesis of 4-phenylphenalenones [1], a group of phytoalexins exclusive from *Musa acuminata* (bananas), has been revisited to extend the scope of the derivatives that can be prepared. The discovery that 4-methoxyphenalenone participates in a selective substitution reaction allowed the preparation of aryl derivatives without the need for transition metal catalyst. The results solve the previously uncovered problem of preparing electron-rich 4-heteroaryl substituted phenalenones [2] and provide the most efficient and general synthesis of this type of phytoalexins to date [1-2].



This work was financially supported by Universidad de Antioquia, Grants CODI 2017-16205 y 2020-33470.

- [1] Luis, J. G.; Fletcher, W. Q.; Echeverri, F.; Grillo, T. *Tetrahedron* 1994, 50, 10963–10970.
[2] Cano, M.; Rojas, C.; Hidalgo, W.; Sáez, J.; Gil, J.; Schnedier, B.; Otálvaro, F. *Tetrahedron Letters* 2013, 54, 351-354.



BIOLOGICAL EFFECTS OF DERIVATIVES OF 4-OXO-THIOCHROMAN OVER LEISHMANIA SP TRYPANOSOMA SP.

Ortiz, C.1*; Vargas, E2; Quiñonez, W1*; Echeverri López, L. F1; Robledo, S2; Upegui, Y2;

¹Química Orgánica de Productos Naturales, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia, Calle 70 N° 52-21, P. O. Box 1226, Medellín, Colombia

²Programa de Estudio y Control de Enfermedades Tropicales, PECET, Universidad de Antioquia, Sede de Investigación Universitaria, SIU, Laboratorio 632; Calle 62 N° 52-59, Medellín, Colombia

*{cristian.ortizb@udea.edu.co}..

Introduction

Neglected diseases are a disease group composed of leishmaniasis and trypanosomiasis diseases both are caused by the trypanosomatid family. Due to their high incidence and the lofty number of countries where are endemic, have threatened one-sixth of the world population, bringing about damage to the health of around 1 million people worldwide every year, and it is estimated that is 1 billion at risk [1, 2, 3, 4]

Trypanothione reductase (TR) is a suitable example of this kind of the targets because this enzyme is exclusive and highly conserved in the trypanosomatidae family, their molecular function is essential to preserve the homeostatic equilibrium of the intracellular stages through controlling oxidative burst generated by the host as a defense mechanism during infection. [8]

Previously research has allowed establishing that an isosteric replacement of carbonyl group by sulfone group, leads to compounds with pretty high bioactivity and selectivity (IC₅₀ 3 μM, SI= 153). This work presents several facts such as twenty analogs synthesis and virtual screening through molecular dynamics and molecular docking that lead to getting a better understanding of interaction parasite-molecule

Methodology

The chemical reactions used for the functionalization of the initial compound were planned following the strategy called approximation by active fragments. [5, 6, 7,12] The bioactivity assays were performed on in-vitro over intracellular amastigotes of *L.panamensis* and the cytotoxicity was determined on human muscle cells of the U-937 cell line. The in-silico analyzes for the analysis of protein-ligand interaction on the trypanothione reductase enzyme (TR) were developed with the open-source protocol SwissDock, autodock, and gromacs software [9, 11]

Results

20 new compounds were obtained who were used in virtual screening. It giving as results 6 promissory new bioactive molecules, on the other hand, Indirect bioassays over TR enzyme allowed us to verify that the nucleus 4- oxo-thiochromone-1,1-dioxide induces a strong intoxication of the parasite due to ROS, and to suggest that its mechanism of action is due to the disturbances of the molecular recognition mechanisms between the TR enzyme and its substrate.

Acknowledgment

Authors tanks to University of antioquia/CODI to finnacial support

Bibliography

- Organización Mundial de la Salud, “Control de las Leishmaniasis,” Ginebra , 2010.
 “WHO | Leishmaniasis,” WHO, 2019.
 D. Bathis, Saurabh Goli, Biology, Control and New Approaches for Its Treatment. Taylor & Francis Group, 2017.
 D. O’Connell, “Neglected diseases,” Nat. Rev. Microbiol., vol. 449, no. March, p. 157, 2007.
- E. Vargas, F. Echeverri, Y. Upegui, S. Robledo, and W. Quiñones, “Hydrazone Derivatives Enhance Antileishmanial Activity of Thiochroman-4- ones,” *Molecules*, vol. 23, no. 1, p. 70, Dec. 2017.
 E. Vargas, F. Echeverri, I. Vélez, S. Robledo, and W. Quiñones, “Synthesis and Evaluation of Thiochroman-4-One Derivatives as Potential Leishmanicidal Agents,” *Molecules*, vol. 22, no. 12, p. 2041, Nov. 2017.
 S. Clara et al., “(12) United States Patent,” 2012.
 M. Omar F. Khan. “Trypanothione Reductase: A Viable Chemotherapeutic Target for Antitrypanosomal and Antileishmanial Drug Design”. In: *Drug Target Insights* 2.1999 (2007),
 A. Grosdidier, V. Zoete, and O. Michielin, “SwissDock, a protein-small molecule docking web service based on EADock



SLCCL-422

DSS,” *Nucleic Acids Res.*, vol. 39, no. suppl, pp. W270–W277, Jul. 2011.

T. Sander, J. Freyss, M. von Korff, and C. Rufener, “DataWarrior: An Open-Source Program For Chemistry Visualization And Analysis,” *J. Chem. Inf. Model.*, vol. 55, no. 2, pp. 460–473, Feb. 2015. ILCL-215

Morris, G. M., Huey, R., Lindstrom, W., Sanner, M. F., Belew, R. K., Goodsell, D. S. and Olson, A. J. (2009) Autodock4 and AutoDockTools4: automated docking with selective receptor flexibility. *J. Computational Chemistry* 2009, 16: 2785-91.

Cristian Ortiz et al. “Synthesis and Evaluation of Antileishmanial and Cytotoxic Activity of Benzothiopyrane Derivatives”. In: *Molecules* 25.4 (2020), p. 800

SÍNTESIS DE COMPUESTOS DEL TIPO 2-HIDROXIPROPANAMIDA A PARTIR DE LA FUNCIONALIZACIÓN DE L-TRIPTÓFANO

Diego Quiroga, Judy Cifuentes

Universidad Militar Nueva Granada. Colombia.

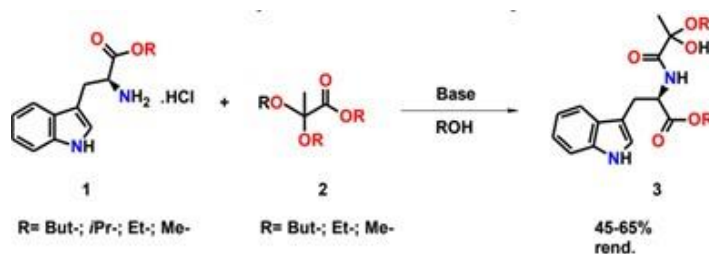
diego.quiroga@unimilitar.edu.co

Palabras claves Amidación, esterificación, 2-hidroxiopropanamida, inhibidores de 11 β -HSD1.

Introducción: Los compuestos del tipo 2-hidroxiopropanamida son de gran interés en Química medicinal, dado su potencial uso como inhibidores de 11 β -hidroxiesteroide deshidrogenasa tipo-1 (11 β -HSD1), una enzima que cataliza la conversión de cortisona glucocorticoide inactiva en cortisol, reacción que ha sido relacionada con la fisiopatología de la diabetes y el síndrome metabólico (1).

Métodos: En este trabajo se presenta un método de síntesis alternativo a (2) empleando 2-aminoácidos. El compuesto **3** fue preparado mediante una síntesis convergente desde los precursores **1** y **2**. El precursor **1** fue obtenido vía esterificación de L-triptófano mientras que **2** fue sintetizado por secuencia esterificación/protección de piruvato de sodio.

Resultados y conclusiones: La esterificación de L-triptófano empleando SiMe₂Cl y diferentes alcoholes presentó rendimientos entre 70- 90% bajo condiciones suaves. La obtención de **2** procedió con mayor facilidad cuando se empleó piruvato de sodio en lugar de ácido pirúvico. Las variables optimizadas para llevar a cabo la amidación entre los precursores **1** y **2** fueron temperatura, tiempo, relación estequiométrica e influencia de los sustituyentes. Se encontró que la reacción entre **1** y **2** sólo procede en medio básico bajo temperaturas cercanas a 80°C. Por otro lado, cuando el precursor **2** presenta sustituyentes voluminosos (por ejemplo, R = n-Pr y n-Bu), se generan múltiples productos de degradación, lo cual sugiere que la congestión estérica dificulta el ataque nucleofílico del grupo amino en **1**, impidiendo la formación del enlace de amida. En conclusión, se presenta un método alternativo de síntesis de compuesto tipo 2- hidroxiopropanamida con rendimientos moderados empleando 2-aminoácidos como precursores.



Referencias:

1. Wan, Z.-K., Chenail, E., Li, H.-Q., Ipek, M., Xiang, J., Suri, V., Hahm, S., Bard, J., Svenson, K., Xu, X., Tian, X., Wang, M., Li, X., Johnson, C.E., Qadri, A., Panza, D., Perreault, M., Mansour, T.S., Tobin, J.F., Saiah, E. Discovery of HSD-621 as a potential agent for the treatment of type 2 diabetes. *ACS Med. Chem. Lett.*, **2013**, 4 (1), 118-123.
2. Yu, S.-J., Zhu, C., Bian, Q., Cui, C., Du, X.-J., Li, Z.-M., Zhao, W.-G. Novel ultrasound-promoted parallel synthesis of trifluoroatrolactamide library via a one-pot passerini/hydrolysis reaction sequence and their fungicidal activities. *ACS Comb. Sci.*, **2014**, 16 (1), 17-23.
3. Williams, J.; Liana Allen, C.; Rosie Chhatwal, A. Direct amide formation from unactivated carboxylic acids and amines. *Chem. Commun.*, **2012**, 48, 666-668.



¿QUÉ TAN IMPORTANTE PUEDE SER EL GRUPO HIDRAZONA EN LAS PROPIEDADES FOTOFÍSICAS, FOTOQUÍMICAS Y ELECTROQUÍMICAS DE UN COMPUESTO SENCILLO?

Jorge Castaño Valencia, Manuel Chaur Valencia

Palabras Claves: Fotoisomerización, hidrazona, isómero, solvatación.

Con este trabajo se pretende evaluar el efecto que tiene la identidad del solvente en las propiedades fotofísicas, fotoquímicas y electroquímicas de dos hidrazonas diferenciadas entre sí por la configuración de su enlace imino, de modo que tal dependencia pueda ser analizada de manera sistemática.

Se estudió las propiedades fotofísicas y electroquímicas de dos hidrazonas estructuralmente relacionadas mediante espectroscopía UV-vis y voltamperometría cíclica. Además, se estudió la fotoisomerización del isómero E usando una lámpara de mercurio de alta presión como fuente de radiación. Los resultados obtenidos fueron analizados respecto al grupo hidrazona. La hidrazona E se sintetizó a partir de la condensación de 2-hidracinopiridina y 2- piridíncarboxaldehído a temperatura ambiente. La hidrazona Z, por su parte, se obtuvo luego de resolver la mezcla resultante de irradiar una solución del isómero E con luz UV. El estudio de las propiedades fotofísicas de ambos isómeros se llevó a cabo en diferentes solventes, mostrando que éstas dependen principalmente de la solvatación del grupo hidrazona.¹ Por otro lado, las medidas de voltamperometría cíclica mostraron que los procesos redox para ambos isómeros son irreversibles y que la reducción del grupo hidrazona se desplaza catódicamente para el isómero Z debido a su enlace de hidrógeno intramolecular.² En cuanto a la fotoisomerización del isómero E, los datos obtenidos respondieron a una cinética reversible de primer orden.³ De esta manera, es posible concluir que el grupo hidrazona domina las propiedades electroquímicas, fotofísicas y fotoquímicas de los dos isómeros configuracionales bajo estudio.

Referencias:

- (1) (a) Rossini, E.; Knapp, E. W. *J. Comput. Chem.* 2016, 37, 1082–1091. (b) Rossini, E.; Bochevarov, A. D.; Knapp, E. W. *ACS Omega* 2018, 3, 1653–1662.
- (2) Gordillo, M.; Soto-Monsalve, M.; Carmona-Vargas, C.; Gutiérrez, G.; D'vries, R.; Lehn, J. M.; Chaur M. *Chem. - A Eur. J.* 2017, 23, 14872–14882.
- (3) Chrastil, J. *Computers Chem.* 1993, 17, 103–106.

Muchas gracias a la Vicerrectoría de Investigaciones y al Centro de Excelencia en Nuevos Materiales (CENM) de la Universidad del Valle por sus valiosos aportes económicos.



SLCCL-684

OBTENCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DE PÉPTIDOS UTILIZADOS EN DOPAJE COMO CANDIDATOS A PATRONES DE REFERENCIA IN HOUSE.

Juan Diego Zapata Velásquez, David Augusto Ramírez Celis, Zuly Jenny Rivera Monroy, Javier Eduardo García Castañeda, Jorge Ariel Martínez Ramírez..

El uso de péptidos para dopaje ha aumentado considerablemente, mientras que los métodos analíticos para detectarlos son cada vez más insuficientes. En ese sentido, es necesario desarrollar métodos más robustos para el control de dopaje y verificar la validez de los análisis utilizando patrones de referencia in house.

Metodología:

Los péptidos se obtuvieron mediante la síntesis de péptidos en fase sólida (SPPS), utilizando la estrategia Fmoc/tBu. Estos fueron purificados mediante extracción en fase sólida (RP-SPE), y posteriormente se caracterizaron por cromatografía líquida de alta resolución en fase reversa (RP-HPLC) y espectrometría de masas (MS-ESI-Q3).

Resultados y conclusiones.

Se obtuvieron los péptidos GHRP-4, GHRP-5, GHRP-6, desmopresina y vasopresina. Además, se obtuvo la sermorelina y sus fragmentos sermorelina (1-11), sermorelina (13-20) y sermorelina (22-29) mediante SPPS-Fmoc/tBu. El análisis mediante RP-HPLC de los péptidos crudos evidenció que todos los péptidos se obtuvieron con purezas cromatográficas mayores al 80 %. Tras la purificación mediante SPE de los mismos, se obtuvieron fracciones con pureza cromatográfica de hasta el 99 %. El análisis por MS permitió confirmar la identidad de todos los péptidos. Se concluyó que estos péptidos de interés en dopaje se pueden obtener de manera rápida, con buenos rendimientos y alta pureza. Además, se logró su caracterización mediante HPLC y MS, lo que permite la utilización de los mismos como patrones de referencia en el desarrollo de técnicas analíticas enfocadas en su detección.

Referencias

- (1) D.M.M. Jaradat, Thirteen decades of peptide synthesis: key developments in solid phase peptide synthesis and amide bond formation utilized in peptide ligation, *Amino Acids*, 50, 39–68 (2018).
- (2) O. Barroso, D.J. Handelsman, C. Strasburger, M. Thevis, Analytical challenges in the detection of peptide hormones for anti-doping purposes, *Bioanalysis*, 4, 1577–1590 (2012).
- (3) D.S. Insuasty Cepeda, H.M. Pineda Castañeda, A.V. Rodríguez Mayor, J.E. García Castañeda, M. Maldonado Villamil, R. Fierro Medina, Z.J. Rivera Monroy, Synthetic Peptide Purification via Solid-Phase Extraction with Gradient Elution: A Simple, Economical, Fast, and Efficient Methodology, *Molecules (Basel, Switzerland)*, 24, (2019).

Palabras Clave:

Péptidos, Dopaje, Cromatografía, Patrones.

Instituciones Financiadoras

MINDEPORTES. Código de proyecto 51286.

Universidad Nacional de Colombia - Facultad de Ciencias.



ESTUDIO DE DOCKING, SÍNTESIS Y ACTIVIDAD ANTIFÚNGICA DE GERANILFENOLES HIDRATADOS FRENTE A *Botrytis cinerea*

Mauricio Soto Cañete, Lautaro Taborga, Luis Espinoza, Katy Diaz, Andrés Olea, Ana Estévez-Braun, Ángel Amesty

Universidad Técnica Federico Santa María

mauricio.sotoc@usm.cl

Palabras claves: Geranilfenoles Hidratados, Docking, *Botrytis cinerea*

Introducción: Los geranilfenoles y sus derivados hidratados son metabolitos secundarios que se encuentran principalmente en organismos marinos. El objetivo de este trabajo es realizar un estudio sistemático del efecto de la sustitución del anillo y la hidratación de la cadena lateral sobre la actividad de los geranilfenoles frente a *B. cinerea*.

Metodos: Mediante las reacciones de alilación de Friedel-Crafts y posterior hidratación se sintetizaron 8 geranilfenoles y 16 geranilfenoles hidratados, los cuales fueron utilizados para realizar ensayos de inhibición del crecimiento micelial frente a *B. cinerea* y posteriormente se utilizaron para un estudio de docking molecular en la enzima succinato-deshidrogenasa (PDB 2FBW)

Resultados y conclusion: En este trabajo se sintetizaron 8 geranilfenoles mediante la reacción de alilación de Friedel-Crafts asistida por microondas y catalizada por BF_3OEt_2 y 16 geranilfenoles hidratados en la cadena de geranilo, mediante la reacción de adición electrofílica catalizada por ácido p-toluensulfónico en presencia de H_2O . Los compuestos fueron evaluados para conocer la actividad antifúngica frente a *botrytis cinerea*, entregando valores de EC_{50} entre 17 y 300 $\mu\text{g}/\text{mL}$, siendo el compuesto hidratado derivado de geranil-2,6-dimetoxihidroquinona el que presenta una mejor actividad. Sobre la base de los resultados antes mencionados, nuestros esfuerzos se enfocaron en explicar un posible mecanismo de acción, y para ello se realizó un estudio de acoplamiento molecular utilizando el software Glide en la estructura cristalina reportada (PDB 2FBW). El análisis de los resultados muestra un buen acoplamiento estérico y electrónico con la proteína 2FBW. Los docking score oscilaron entre -9,2 y -5,4 kcal/mol.

Referencias:

1. Faulkner, D. J., Marine natural products. *Nat. Prod. Res.* 2001, 18, 1R-49R.
2. Soto, M.; Espinoza, L.; Chavez, M. I.; Diaz, K.; Olea, A. F.; Taborga, L., Synthesis of New Hydrated Geranylphenols and in Vitro Antifungal Activity against *Botrytis cinerea*. *Int. J. Mol. Sci.* 2016, 17.
3. Qu, T.; Gao, S.; Li, J.; Hao, J. J.; Ji, P., Synthesis and antifungal activity of 2-allylphenol derivatives against fungal plant pathogens. *Pestic. Biochem. Physiol.* 2017, 135, 47-51.



SÍNTESIS Y EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTITRIPANOSOMAL, ANTIPLASMODIAL Y HEMOLÍTICA IN VITRO DE ANÁLOGOS QUINOLINICOS

Roger Espinosa Sáez, Sara Robledo Restrepo, Camilo Guzmán Teran, Hiltony Villa Dangond.

Universidad Córdoba, Universidad de Antioquía

rdespinosasaez@correo.unicordoba.edu.co

Palabras Claves: Quinolinas, Antiplasmodial, Citotoxicidad, Antitripanosomal.

Introducción: los compuestos con núcleo quinolinico son de gran importancia por su gran diversidad de usos farmacológicos, principalmente en el tratamiento de enfermedades parasitarias desatendidas como el Chagas y la Malaria [1-2]. En este contexto, este trabajo tiene como finalidad sintetizar compuestos tipo estilquinolinas y evaluar su actividad antiprotozoaria in vitro.

Materiales y métodos: para la síntesis se usó una reacción de condensación entre quinaldina e hidroxiquinaldina con diferentes aldehídos aromáticos[1], para la actividad Antitripanosomal y Hemolítica in vitro se empleó espectrofotometría, para la actividad Antiplasmodial in vitro fluorimetría, para la citotoxicidad se usó el método del MTT [2].

Resultados y conclusión: Se sintetizaron los compuestos: 2-[(E)-2-(Quinolin-2-yl)etenil]fenilacetato (**1**), 2-[(E)-2-(8-Hidroxiquinolin-2-il)etenil]fenilacetato (**2**), 2-Metoxi 6-[(E)-2-(quinolin-2-il)etenil]fenilacetato (**3**), 2-Metoxi-6-[(E)-2-(8-hidroxiquinolin-2- il)etenil]fenilacetato (**4**), 4-Bromo-2-[(E)-2-(quinolin-2-il)etenil]fenilacetato (**5**) y 2-Etoxi-4- [(E)-2-(quinolin-2-il)etenil]fenilacetato (**6**), con rendimientos del 40% al 90%. Todos los compuestos son citotoxicos con valores de CL50 que van de 8.9 a 25.3 µg/mL, en cuanto a la actividad Antitripanosomal in vitro, todos mostraron alta actividad con CE50 de 4.6 µg/mL a 34.6 µg/mL en comparación con el Benznidazol (BZ) con CE50 14.7 µg/mL. En relación a la actividad Antiplasmodial in vitro, los compuestos **1-6** mostraron moderada y alta actividad con CE50 de 20.9 µg/mL, 29.11 µg/mL, 34.9 µg/mL, 27.4 µg/mL, 17.3 µg/mL y 16.9 µg/mL respectivamente, en comparación con la Cloroquina (CQ) con un CE50 de 3.3 µg/mL, en cuanto a la actividad hemolítica in vitro, estos compuestos son considerados no hemolíticos. Los compuestos **1-4** en la actividad Antitripanosomal, **5** y **6** en la Antiplasmodial, se pueden considerar promisorios y selectivos hacia los parásitos.

Referencias:

1. Cantero-López, P.; Robledo Restrepo, S. M.; Yañez, O.; Zúñiga, C.; Santafé-Patiño, G. G. Theoretical study of new LmDHODH and LmTXNPx complexes: structure-based relationships. *Structural chemistry* **2020**, 32, 167-167. <https://doi.org/10.1007/s11224-020-01624-7>
2. Insuasty, D.; Robledo, S. M.; Vélez, I. D.; Cuervo, P.; Insuasty, B.; Quiroga, J.; Noguera, M.; Cobo, J.; Abonia, R. A Schmidt rearrangement-mediated synthesis of novel tetrahydro-benzo[1,4]diazepin-5-ones as potential anticancer and antiprotozoal agents. *European Journal of Medicinal Chemistry* **2017**, 141, 567-583. doi: 10.1016/j.ejmech.2017.10.024.



OBTENCIÓN DE PIRAZOLOPIRIDINAS Y TETRAHIDROPIRAZOLOISOQUINOLINAS EMPLEANDO EL DiFAC, ESTRATEGIAS MULTICOMPONENTE E IRRADIACIÓN MICROONDAS

John Jair Lozano Oviedo, Paola Andrea Cuervo Prado, Fabian Orozco Lopez

Universidad Nacional de Colombia.

jlozano@unal.edu.co

Palabras Claves: Cribado-virtual, pirazolopiridinas, terc-enamidas, microondas.

Introducción: El núcleo pirazolopiridínico ha mostrado modulación positiva sobre el receptor GABA-A1, constituyendo una alternativa terapéutica para afecciones del sistema nervioso central². Su estudio, empleando estrategias del diseño racional de fármacos y procesos sintéticos novedosos³, está orientado a la obtención de derivados moleculares que resultan ser relevantes en la química medicinal.

Métodos : Se aplicó el diseño de fármacos asistido por computador DiFAC, en una serie de pirazolopiridinas, determinando sus propiedades ADMETox, interacciones con el receptor 6DWO y las energías de afinidad mediante acoplamiento molecular; los prototipos fueron sintetizados mediante una reacción tricomponente entre 5-aminopirazol, cetonas cíclicas y terc-enamidas, promovida por irradiación microondas.

Resultados y Conclusiones Por medio del cribado virtual se seleccionaron 6 prototipos con núcleo pirazolopiridínico y tetrahidropirasoquinolinico/isoquinolinico, los cuales presentaron alta afinidad por el sitio alostérico de los benzodiazepinas ubicado en la interfase entre las subunidades alfa y gamma, en la porción extracelular del receptor 6DWO; dicha afinidad resultó superior en comparación con los fármacos de referencia empleados en el estudio. Los prototipos moleculares seleccionados se sintetizaron empleando estrategias multicomponente, calentamiento no convencional inducido por microondas e implementando condiciones de reacción que van de la mano con los lineamientos de la química sostenible. Los productos de interés se obtuvieron con rendimientos favorables

Referencias:

1. Thompson, S.-A.; Wingrove, P. B.; Connelly, L.; Whiting, P. J.; Wafford, K. A. Tracazolate Reveals a Novel Type of Allosteric Interaction with Recombinant γ -Aminobutyric Acid A Receptors. *Mol. Pharmacol.* 2002, 61 (4), 861–869. <https://doi.org/10.1124/mol.61.4.861>.
2. Shi, D.; Padgett, W. L.; Hutchinson, K. D.; Moore, S. P.; Daly, J. W. Pyrazolopyridines: Effect of Structural Alterations on Activity at Adenosine- and GABA(A)-Receptors. *Drug Dev. Res.* 1997, 42 (1), 41–56. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1098-2299\(199709\)42:1<41::AID-DDR4>3.0.CO;2-R](https://doi.org/10.1002/(SICI)1098-2299(199709)42:1<41::AID-DDR4>3.0.CO;2-R).
3. Khadem, S.; Udachin, K. A.; Enright, G. D.; Prakesch, M.; Arya, P. One-Pot Construction of Isoindolo[2,1-a]quinoline System. *Tetrahedron Lett.* 2009, 50 (48), 6661–6664. <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2009.09.075>.



EFFECTO DE LA RADIACIÓN ULTRAVIOLETA EN COMPLEJOS METÁLICOS BASADOS EN UNA BIS(HIDRAZONA) PIRIDÍNICA.

Jolaine Galindo Betancourth, Manuel Chaur Valencia

Universidad del Valle

jolaine.galindo@correounivalle.edu.co

PALABRAS CLAVE: bis(hidrazona), complejo, fotoisomerización, radiación.

Las hidrazonas, compuestos con diversidad química y de fácil obtención, han sido empleadas para el diseño de diversos sistemas con propiedades atractivas como interruptores moleculares y arquitecturas supramoleculares autoensambladas. Por ello, es relevante extender el conocimiento del efecto de la diversidad estructural de las hidrazonas en sus propiedades. En este sentido, se sintetizó una bis(hidrazona) piridínica (5-E,E) caracterizada por espectroscopias RMN, FTIR, UV-vis y espectrometría de masas. Además, se estudió cinéticamente su fotoisomerización por RMN ¹H. Finalmente, se examinó la respuesta de complejos metálicos a la irradiación ultravioleta mediante RMN ¹H y UV-vis.

La bis(hidrazona) 5-E,E se sintetizó mediante una metodología de dos pasos, sustitución nucleofílica aromática y condensación de 2-piridincarboxaldehído y 2,6-dihidrazinopiridina, confirmando su configuración y conformación por RMN ¹H y NOESY. La cinética de fotoisomerización del 5-E,E se determinó por espectroscopia RMN ¹H. Los datos de composición porcentual de cada isómero se ajustaron utilizando el programa Dynafit, comprobando una reacción consecutiva de dos pasos reversibles. Posteriormente, los complejos metálicos se prepararon con 5-E,E y sales de Ni²⁺, Zn²⁺ y Ag (1:1) en etanol. Como el ligando libre puede fotoisomerizarse con luz UV, se examinó la respuesta de los complejos formados a dicho estímulo por espectroscopia RMN ¹H y UV-vis. Encontrando que el complejo de plata es afectado en mayor medida por la irradiación debido a que se produjeron cambios observables; lo contrario se dio para los complejos de zinc y níquel.

REFERENCIAS:

1. Su, X.; Aprahamian, I. Chem. Soc. Rev. 2014, 43 (6), 1963–1981. DOI: 10.1039/C3CS60385G
2. Day, A. C.; Whiting, M. C. Organic Syntheses; John Wiley & Sons, Inc.: Hoboken, NJ, USA, 2003; pp 3. DOI: 10.1002/0471264180.os050.02
3. Shao, B.; Aprahamian, I. ChemistryOpen 2020, 9, 191–194. DOI: 10.1002/open.201900340 (4) Yang, Q.; Tang, J. Dalton Trans. 2019, 48, 769–778. DOI: 10.1039/C8DT04243H
4. Brien, K. A.; Garner, C. M.; Klausmeyer, K. K.; Feazell, R. P. J. Chem. Crystallogr. 2005, 35 (11), 875–883. DOI: 10.1007/s10870-005-5132-x
5. Kuzmic, P. Anal. Biochem. 1996, 237 (2), 260–273. DOI: 10.1006/abio.1996.0238



SÍNTESIS DE NUEVOS DERIVADOS PERTENECIENTES AL NÚCLEO ISOINDOLO[2,1-a]QUINOLIN-11(5H)-ONA DE INTERÉS BIOLÓGICO.

Omar León, Juan F. Quiroga, Angie Vannesa Sánchez Bejarano, Juan David Ávila Rincón, Leidy Johanna Días Huertas, Ricaurte Rodríguez.

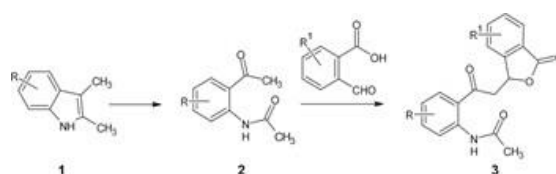
Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

rrodriguez@unal.edu.co

Palabras clave: Ftalilo, oxidación de Witkop, condensación Claisen-Schmidt

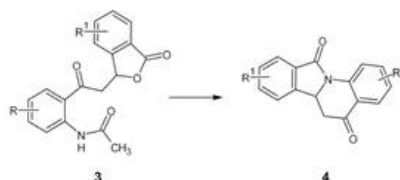
Introducción: Los derivados del núcleo isoindolo[2,1-a]quinolina se han caracterizado por mostrar una amplia e interesante variedad de actividades biológicas tales como antioxidante, antiinflamatoria e incluso anticancerígena.¹ La búsqueda de nuevas metodologías y estrategias para su obtención favorecerá el descubrimiento de nuevas entidades químicas potencialmente bioactivas y de alto valor agregado.

Métodos: Derivados del 2,3-dimetilindol (1) fueron sometidos a oxidación de Witkop, los compuestos tipo (2) obtenidos se hicieron reaccionar mediante condensación de Claisen-Schmidt con derivados del ácido 2-formilbenzoico para la obtención de derivados de ftalilo (3) que resultaron intermediarios claves en la síntesis de compuestos tipo (4) pertenecientes al núcleo principal



Esquema 1. Síntesis de compuestos derivados de ftalilo (3).

Resultados y conclusiones: Es importante mencionar que, así como el núcleo principal (4), el intermediario obtenido (3) ha sido probado como compuesto bioactivo, ofreciendo respuestas positivas en actividades tales como anti VIH-1 y antifúngica.^{2,3} Lo anterior, evidencia la versatilidad de estos compuestos en la aplicación de su actividad biológica y en su empleo como herramienta en la síntesis de diferentes derivados pertenecientes a otros núcleos. Los compuestos tipo (3) fueron identificados mediante sus propiedades espectroscópicas y espectrométricas empleando técnicas como FT-IR, ¹H-RMN, ¹³C-RMN y EMAR. Los análisis anteriores corroboraron la efectividad de la ruta sintética de los derivados de ftalilo buscados. Finalmente, los compuestos tipo 3 están siendo empleados en la síntesis de los derivados del núcleo principal (4) probando diferentes condiciones de reacción, como lo muestra el siguiente



Esquema 2. Síntesis de compuestos derivados pertenecientes al núcleo isoindolo[2,1-a]quinolina.

La identificación de (4) mediante ¹H-RMN permite concluir que se encontró una eficiente ruta sintética para la obtención de derivados del núcleo isoindolo[2,1-a]quinolina.

Referencias:

- Merchán, D.; Sojo, F.; Arvelo, F.; Kouznetzov, V. Synthesis of dihydroisoindolo[2,1-a]quinolin-11-ones, their in silico ADMET properties and in vitro antitumor activities. *RSC Adv.* 2020, 10, 42287-42296. DOI: 10.1039/D0RA04555A
- Qin, X.-D.; Dong, Z.-J.; Liu, J.-K.; Yang, L.-M.; Wang, R.-R.; Zheng, Y.-T.; Lu, Y.; Wu, Y.-S.; Zheng, Q.-T. Concentricolide, an Anti-HIV Agent from the Ascomycete *Daldinia concentrica*. *HCA.* 2006, 89, 127-133. DOI: 10.1002/hlca.200690004
- Fan, L.; Luo, B.; Luo, Z.; Zhang, L.; Fan, J.; Xue, W.; Tang, L.; Li, Y. Synthesis and antifungal activities of 3-substituted phthalide derivatives *Zeitschrift für Naturforschung B.* 2019, 74 (11-12), 811-818. DOI: 10.1515/znb-2019-0110



VALORIZACIÓN DE CICLOHEXANONA HACIA CICLOHEXILAMINA MEDIANTE CATALIZADORES BASADOS EN IRIDIO.

Doris Ruiz, Marco Herrera.

Universidad de Concepción, Facultad Cs. Químicas, Concepción, Chile.

doruiz@udec.cl

Palabras claves: Catálisis, Aminocompuestos, Ciclohexilamina, Iridio.

En este trabajo se estudió la aminación reductiva directa de ciclohexanona mediante catálisis heterogénea utilizando amoníaco e hidrógeno en fase gas. La producción selectiva de la amina primaria ciclohexilamina desde ciclohexanona se realizó mediante la acción de catalizadores 1.5 % en masa de Iridio sobre SiO₂, TiO₂, Al₂O₃ y Carbón activado (Cact).

Los catalizadores soportados fueron sintetizados por impregnación húmeda a partir del precursor Ir(acac)₃ y activados mediante reducción obteniendo finalmente catalizadores 1.5%Ir/SiO₂, 1.5%Ir/TiO₂, 1.5%Ir/Al₂O₃ y 1.5%Ir/Cact. Un estudio adicional permitió estudiar el efecto de la temperatura de calcinación en la dispersión y el diámetro metálico.

Todos los catalizadores fueron caracterizados por las técnicas; TGA, Fisisorción de N₂, DRX, XPS, SEM-EDS, TEM, DTP-NH₃ y TPR. Los ensayos de aminación reductiva de ciclohexanona fueron estudiados bajo condiciones de 80 °C, 4 bar de NH₃ y 2 bar de H₂ en 50 mL de ciclohexano con una relación sustrato:Ir de 70. El análisis de productos y conversión de ciclohexanona fue realizada mediante cromatografía de gases acoplada a detección masas GC-MS.

Los catalizadores demostraron ser activos y selectivos hacia la obtención de la amina primaria ciclohexilamina. Los resultados, en relación a las propiedades de los sólidos, indicaron que la aminación reductiva se ve afectada por factores como dispersión metálica, nivel de reducción del metal y cantidad y naturaleza de sitios disponibles, entre otros. Específicamente en la transformación de ciclohexanona a ciclohexilamina se obtiene mayor actividad y selectividad con catalizadores que presentan una alta superficie específica y alto poder hidrogenante (1.5%Ir/SiO₂) y además elevada acidez (1.5%Ir/Cact). La conversión y la selectividad máxima hacia ciclohexilamina fue de 100% y 97%, respectivamente, y se obtuvo con el catalizador 1.5%Ir/SiO₂.

Referencia:

1. Chary, K. V. R., Seela, K. K., Naresh, D., & Ramakanth, P. Characterization and reductive amination of cyclohexanol and cyclohexanone over Cu/ZrO₂ catalysts. *Catalysis Communications*, 2018, 9(1), p. 75–81.



ACETATO DE NÍQUEL (II) ANCLADO A POLIACRILATO COMO CATALIZADOR PARA LA TRANSPOSICIÓN DE BECKMANN

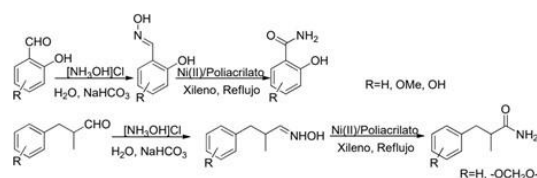
Hernán Gabriel Astudillo Campo, Olga Lucia Hoyos Saaverdra

Universidad del Cauca, Colombia

hernanastudillo@unicauca.edu.co

key-words: Transposición Beckmann, aldoximas, poliacrilato.

Introducción: La transposición de Beckmann es útil para obtener amidas primarias desde aldehídos, evitando agentes oxidantes, y activación de ácidos carboxílicos. Sin embargo, presenta inconvenientes como: uso de catalizadores ácidos, metálicos y difícil recuperación. Se estudió un catalizador de Ni(II) soportado, para convertir oximas de salicilaldehídos y helional, a sus amidas.



Metodología: Se condensaron hidroxilamina y el salicilaldehído correspondiente a 20°C, produciendo oximas. El catalizador se ancló mediante reflujo de poliacrilato de sodio, ácido acético y se neutralizó con carbonato de níquel(II). Se produjeron las amidas refluendo oxima, xileno y catalizador. Los compuestos se caracterizaron mediante técnicas espectroscópicas, TGA y análisis elemental.

Resultados y conclusiones: Aunque no afectan la conversión a amidas, los productos secundarios de condensación de hidroxilamina y aldehído (helional, 4-OH-salicilaldehído y 4-OMe-salicilaldehído) se minimizaron prolongando la agitación a temperatura ambiente y pH neutro. El acetato de Ni(II) se preparó a partir de su carbonato. Por FT-IR se observaron las vibraciones correspondientes al grupo acetato, agua de hidratación, y tensión correspondiente a Ni-O-C. El catalizador soportado, presentó cambios en las señales del grupo carboxilato. La conversión catalítica de las oximas, evidenció la estabilidad térmica del catalizador a tiempos prolongados. Se requirió alta carga catalítica para obtener resultados comparables al catalizador no-anclado, este último es difícil de recuperar. Los espectros de oximas y amidas son similares a los reportados.

Conclusiones: Se sintetizaron oximas con alto rendimiento y pureza. Se obtuvieron amidas usando acetato de Ni(II) libre e inmovilizado con buenos rendimientos, permitiendo la conversión sustratos aromáticos y aldehídos sobre C-secundarios, y su fácil separación.

Referencias

1. Allen, C. L.; Lawrence, R.; Emmett, L.; Williams, J. M. J., Mechanistic Studies into Metal-Catalyzed Aldoxime to Amide Rearrangements. *Advanced Synthesis & Catalysis* **2011**, 353 (18), 3262-3268.
2. Li, Z.; Fang, C.; Zheng, Y.; Qiu, G.; Li, X.; Zhou, H., Multicatalytic Beckmann rearrangement of 2-hydroxylarylketone oxime: Switchable synthesis of benzo[d]oxazoles and N-(2-hydroxylaryl)amides. *Tetrahedron Letters* **2018**, 59 (44), 3934-3937.
3. Gao, J.; Qiu, Y.; Hou, B.; Zhang, Q.; Zhang, X., Treatment of wastewater containing nickel by complexation- ultrafiltration using sodium polyacrylate and the stability of PAA-Ni complex in the shear field. *Chemical Engineering Journal* **2018**, 334, 1878-1885.



SÍNTESIS DE N,N-AQUIL-BIS-(N-METILARIL)ACILAMIDAS, PRECURSORES PARA POTENCIALES MOLÉCULAS TENSOACTIVAS

Mary Gerly Arenas Vargas

Universidad Industrial de Santander, Colombia.

maryarenas.arenas@gmail.com

Palabras claves: Síntesis, acilamidas, tensoactivos.

Los surfactantes están catalogados como uno de los compuestos más versátiles en la industria, debido a su capacidad de alterar las propiedades interfaciales y superficiales del sistema. Estas propiedades y sus aplicaciones hacen de los tensoactivos, moléculas de interés sintético y la búsqueda de metodologías eficientes resultan un importante reto. Inicialmente se obtuvieron las N,N-dibenciletano-1,2-diaminas a partir de benzaldehído y etilendiamina. La reacción transcurre a reflujo en etanol (17 horas), seguido de una reducción con NaBH₄. Posteriormente, la N,N dibenciletano-1,2-diamina se hace reaccionar con cuatro diferentes cloruros de ácido. Los cuatro nuevos N,N-aquil-bis-(N-metilaryl)acilamidas sintetizados fueron caracterizados por TF-IR, IES-EM y RMN. Se obtuvo de manera inicial el precursor N,N-dibenciletano-1,2-diamina con un rendimiento del 82%, a través de una aminación reductiva vía la formación de bases de Schiff, en reflujo de etanol durante 17 horas e in situ se llevó a cabo una reducción mediada por NaBH₄. Posteriormente se logró la síntesis de la estructura N,N-aquil-bis-(N-metilaryl)acilamida con un rendimiento del 71%, por medio de una reacción de amidación mediada por trietilamina via cloruro de acilo obtenidos de cuatro diferentes ácidos grasos. Las estructuras obtenidas se caracterizaron por espectroscopia infrarroja (IR), espectrometría de masas (IES-EM), espectroscopía de resonancia magnética nuclear (RMN).

En conclusión, fue posible sintetizar de manera sencilla y con reacciones clásicas las cuatro diferentes estructuras N,N-aquil-bis-(N-metilaryl)acilamida, las cuales se dispondrán a un proceso de sulfonación con el fin de conseguir estructuras tensoactivas de gran capacidad interfacial y superficial.

Referencias:

1. Schramm, L.L.; Stasiuk, E.N.; Marangoni, D.G. Surfactants and their applications. Annu. Rep. Prog. Chem., Sect. C: Phys. Chem. 2003, 99, 3-48. Universidad Industrial de Santander- UIS



SÍNTESIS DE UNA NUEVA SERIE MONOHIDROXILADA DE ANÁLOGOS DE BRASINOESTEROIDES CON FUNCIÓN BENZOILADA EN LA CADENA LATERAL

Maria Nuñez Gutierrez, Luis Espinoza Catalán, Cesar González, Paula Droggett,

Departamento de Química, Universidad Federico Santa María.

maria.nunezg@sansano.usm.cl

Palabras claves: Síntesis, Brasinoesteroides, 23,24-bisnor-5 α -colano, Espectroscopía.

Introducción: Los Brasinoesteroides (BRs) son un grupo de hormonas encargada de controlar el crecimiento y desarrollo vegetal. Estas hormonas exhiben su efecto a muy bajas concentraciones. Por ello, en la actualidad se dedican muchos esfuerzos en la búsqueda de nuevos análogos de BRs que posean actividad promotora de crecimiento vegetal.

Métodos: Se presenta la síntesis de una nueva serie monohidroxilada de análogos de BRs con función benzoilada en la cadena lateral (**9**) partiendo del Ácido 3 β -acetil-23,24-Bisnor-5-cólenico (**1**) el cual es transformado para introducir funciones oxigenadas en C6 del anillo B y posterior eliminación entre C2-C3 del anillo A en el esteroide. Todos los intermedios fueron caracterizados espectroscópicamente [**1**].

Resultados y Conclusiones: Se obtuvo una nueva serie monohidroxilada en C3 de análogos de BRs con función benzoilada p-sustituída con grupos electrodonadores y electroattractores (**9**). Esta nueva serie de análogos de BRs cumple con tres de las características que poseen los BRs de origen natural. La síntesis se realizó partiendo con el ácido 3 β -acetil-23,24-Bisnor-5-cólenico (**1**) el cual se convirtió en (**2**) mediante una reacción de metilación con diazometano para posteriormente realizar una epoxidación del alqueno entre C5-C6 (**3**) seguido de la apertura de epóxido en medio ácido (**4**) y luego oxidación de la bromohidrina (**5**), continuando con una reducción sobre C5 (**6**) [**2**]. Seguido se protegió la cetona (**7**) para reducir el grupo éster en la cadena lateral (**8**) [**3**]. Finalmene, (**9**) se obtuvo mediante la reacción de benzoilación entre el alcohol (**8**) y el cloruro de benzoilo correspondiente [**4**]. Los compuestos fueron caracterizados por técnicas espectroscópicas de IR y RMN 1D-2D.

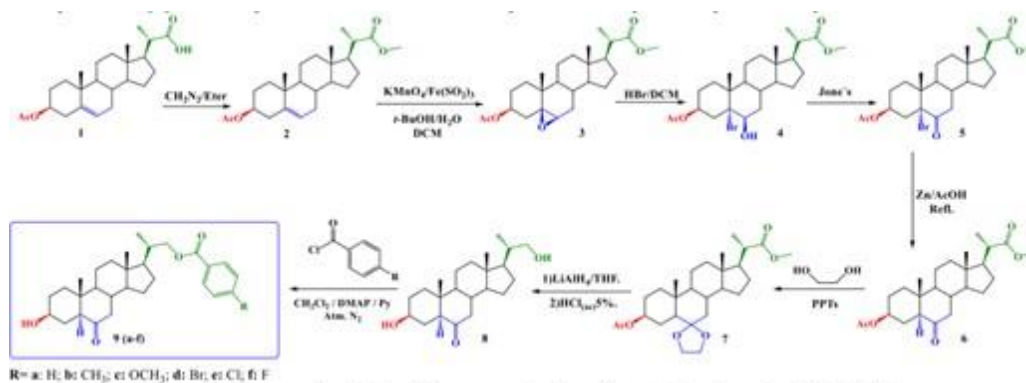


Figura 1. Esquema de síntesis de la nueva serie de análogos de Brasinoesteroides **9** (a-f).

Referencias:

1. T. Back, R. Pharis. J. Plant Growth Regul., **2003**, 22: 350–361.
2. M. Iglesias, E. Símuta, S. Xochihua, O. Viñas, S. Montiel, S. Meza, and J. Sandoval. J. Mex. Chem. Soc., **2005**, 49: 143-147.
3. Duran, M.; González, C.; Acosta, A.; Olea, A.; Katy, D.; and Espinoza, L.; Synthesis of Five Known Brassinosteroid Analogs from Hyodeoxycholic Acid and Their Activities as Plant-Growth Regulators, Int. J. Mol. Sci., 2017, 18, 516
4. Carvajal, C.; González, C.; Olea, A.; Fuentealba, M.; and Espinoza, L. Synthesis of 2- deoxybrassinosteroids analogs with 24-nor, 22(S)-23-dihydroxy-type side chains from hyodeoxycholic acid, Molecules, 2018, 23, 1306.



SÍNTESIS DE NUEVAS CUMARINAS CONJUGADAS CON PIRAZOLINAS DE POTENCIAL USO PARA EL DISEÑO DE SONDAS FLUORESCENTES Y/O COLORIMÉTRICAS EN LA DETECCIÓN DE IONES DE INTERÉS AMBIENTAL.

Nestor Fabian Bravo Piñeros, Jaime Antonio Portilla Salinas, Alexis Tigreros Ortiz.

Universidad de los Andes.

nf.bravo@uniandes.edu.co

Palabras clave: Cumarina, Pirazolina, Quimiosensor, Propiedades fotofísicas, Detección metales

Introducción Dada la importancia de algunos metales en el medioambiente y a los problemas de salud que pueden generar, se ha trabajado considerablemente en el desarrollo de quimiosensores para su detección. Son numerosos los quimiosensores colorimétricos y/o fluorescentes que se han reportado para aniones, cationes o moléculas neutras.²

Aunque probablemente por medio de técnicas instrumentales como absorción atómica (AA) y espectroscopia de emisión por plasma de acoplamiento inductivo (ICP-AES) se alcancen límites de detección muy buenos y sea difícil competir contra ellos, es importante profundizar en la síntesis de quimiosensores dadas las ventajas en tiempo real, menor costo y desde luego la simplicidad. Además, es interesante la síntesis y el diseño de estructuras novedosas nunca antes reportadas, para usarlas en campos ya explorados pero con más ventajas en respuesta, eficacia y selectividad. Así, por su arquitectura molecular, los derivados de cumarina y pirazolina se consideran como fluoróforos notables debido a que tienen excelentes propiedades fotofísicas.^{4,5,6}

Con base en lo anterior, se diseñaron y sintetizaron moléculas híbridas con núcleos cumarina-N heterociclos del tipo pirazolina con el fin de observar el alcance de las moléculas en la detección de iones en disolución. Los compuestos se obtuvieron a partir de una condensación de las 3-acetilcumarinas con 4-formilpiridina para formar los intermediarios α,β -insaturados. Posteriormente, estos intermediarios se ciclo condensaron con 2-piridilhidrazina para formar las pirazolinas híbridas. El seguimiento de las reacciones se realizó por medio de cromatografía en capa delgada (CCD) y los productos se purificaron mediante cromatografía de columna (CC). La caracterización de los compuestos se llevó a cabo con métodos de análisis estructural, tales como espectroscopía de RMN, espectrometría de masas de alta resolución (HRMS), espectroscopia de UV-vis y de fluorescencia.

Los estudios de absorción y emisión se hicieron en diferentes disolventes de menor a mayor polaridad. Los cambios en las propiedades fotofísicas fueron leves, debido a las pequeñas variaciones en las polaridades de las sustancias al comparar sus estados fundamental y excitado. El estudio en la detección de iones se hizo mezclando una solución del sensor con diferentes especies iónicas en disolución, e identificando los cambios de color o de las propiedades fluorescentes. De esta manera se observaron cambios en los espectros de absorción y de emisión de los sensores moleculares en presencia de Ni, Cu (Cambian color y apagan fluorescencia) y Zn, Cd (encienden fluorescencia) que son metales tóxicos para el medio ambiente.

Los resultados obtenidos aportarán al desarrollo de futuras generaciones de quimiosensores más sensibles y selectivos, donde el diseño de nuevos métodos de detección aportará a la comunidad científica herramientas adecuadas para monitorear y/o extraer especies inorgánicas contaminantes en el contexto medio ambiental y en la industria en general.

Bibliografía

1. Lee, S, Bok, K, Kim, J, Kim, S, Kim, C. *Tetrahedron* **2016**, 72, 5563–5570.
2. Shao, J. *Dyes Pigm.* **2010**, 87, 272–276.
3. Kotchapidist, P., Prachumrak, N., Sunonnam, T., Tarsang, R. *Dyes Pigm.* **2015**, 112, 227–235.
4. (a) Jiao, Y.; Zhou, L.; He, H.; Yin, J.; Duan, C. *Talanta* **2017**, 162, 403–407. (b) Li, Q.; Hu, Y.; Hou, H.; Yang, W.; Hu, S. *Inorganica Chim. Acta* **2018**, 471,705–708. (c) Goswami, S; Sen, D; Das, A.K; Das, N.K.; Aich, K; Fun, H.-K.; Quah, C.K.; Maity, A.K.; Saha, P. *Sens. Actuators B* **2013**, 183, 518– 525. (d) Shiraiishi, Y.; Nakamura, M.; Hirai, T. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, 17, 25027–25036.
5. (a) Romero, E.; D’Vries, R.; Zuluaga, F.; Chaur, M. J. *Braz. Chem. Soc.* **2015**, 26, 1265–1273. (b) Landge, S.; Tkatchouk, E.; Benítez, D.; Lanfranchi, D.; Elhabiri, M.; Goddard, W.; Aprahamian, I. *J. Am. Chem. Soc.* **2011**, 133, 9812–9823.
6. Burdette, S. *Nat. Chem.* **2012**, 4, 695–696.

SÍNTESIS EFICIENTE DE DERIVADOS DE 1-ANILINO-3-OXO-1,3-DIHI-DRO-2- BENZOFURAN-1-CARBOXAMIDA

Jonnathan Cifuentes, Cristian Camilo Sanín Villamil, Angie Ximena Ruíz Ávila, Mónica Yadira Dotor Robayo, Ricarte Rodríguez

Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

rrodrigueza@unal.edu.co

Palabras claves: Reacción de Strecker-Ftalilos-Actividad Herbicidas

Introducción: Las isobenzofuranonas, más conocidas como ftalilos, son estructuras privilegiadas ya que tienen importancias por sí solas o como intermediarios en la construcción de otras moléculas. Exhiben diferentes tipos de actividad biológica, entre las que se encuentran actividad herbicida, antioxidante, anti bacterial y anti HIV, entre otras.¹⁻³

Métodos: Nuestra síntesis parte del ácido 2-formilbenzoico realizando una reacción tipo Strecker para obtener los derivados de diaminoisocumarinas (4).⁴ Luego estos derivados se someten a una reacción de oxidación obteniéndose los derivados de ftalilos correspondientes en excelentes rendimientos y en tiempos cortos (Figura 1).



Figura 1. Síntesis de derivados de 1-anilino-3-oxo-1,3-dihidro-2-benzofuran-1-carboxamida

Resultados y conclusiones: Mediante estas nuevas condiciones de reacción hemos logrado obtener derivados del núcleo 1-anilino-3-oxo-1,3-dihidro-2-benzofuran-1-carboxamida (5), este tipo de compuestos son importantes porque pertenecen a la familia de las isobenzofuranonas más conocidas como ftalilos. Creemos que el mecanismo por el cual ocurre esta reacción es mediante la generación in situ del ácido peroxiacético, el cual epoxida el doble enlace al que están unidos los grupos aminos. Este epóxido sufre una reorganización al producto deseado. Nuestro objetivo final es convertir estos compuestos en nuevas moléculas con actividad herbicida.

La metodología que usamos es exitosa al compararla con la previa reportada por Opatz y Ferenc.⁵ Nuestra metodología es superior en los siguientes aspectos: 1. Requiere menos tiempo de reacción (6-8 h). 2. Se realiza a temperatura ambiente. 3. Los rendimientos son iguales o superiores a los reportados. 4. No se observa la formación de subproductos.

Referencias:

1. Merchán, D.; Sojo, F.; Arvelo, F.; Kouznetsov, V. Synthesis of dihydroisindolo[2,1-a]quinolin-11-ones, their in silico ADMET properties and in vitro antitumor activities. *RSC Adv.* 2020, 10, 42287-42296. DOI: 10.1039/D0RA04555A
2. Qin, X.-D.; Dong, Z.-J.; Liu, J.-K.; Yang, L.-M.; Wang, R.-R.; Zheng, Y.-T.; Lu, Y.; Wu, Y.-S.; Zheng, Q.-T. Concentricolide, an Anti-HIV Agent from the Ascomycete *Daldinia concentrica*. *HCA.* 2006, 89, 127-133. DOI: 10.1002/hlca.200690004
3. Fan, L.; Luo, B.; Luo, Z.; Zhang, L.; Fan, J.; Xue, W.; Tang, L.; Li, Y. Synthesis and antifungal activities of 3-substituted phthalide derivatives *Zeitschrift für Naturforschung B.* 2019, 74 (11-12), 811-818. DOI: 10.1515/znb-2019-0110
4. Opatz, T; Ferenc, D. Facile Preparation of 3-Amino-4-(arylamino)-1H-isochromen-1-ones by a New Multicomponent Reaction. *Eur. J. Org. Chem.* 2005, 5, 817-821. DOI: 10.1002/ejoc.200400685.
5. Opatz, T; Ferenc, D. Ring Contracting Rearrangements of 3-Amino-4-(arylamino)-1H-isochromen-1-ones. *Eur. J. Org. Chem.* 2006, 5, 121-126. DOI: 10.1002/ejoc.200500575

SÍNTESIS REGIOSELECTIVA DE 7-DIALQUILAMINOMETIL-8-HIDROXIQUINOLIN-2(1H)-ONAS MEDIADA POR UNA REACCIÓN TIPO MANNICH

Angélica Salinas Torres¹, Hugo Rojas Sarmiento¹, Diana Becerra Córdoba^{1*}, Juan Castillo Millán^{1,2*}.

¹Grupo de Catálisis de la UPTC, Escuela de Ciencias Química, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja 150003, Colombia. ²Procesos Ambientalmente Amigables, Escuela de Ciencias Química, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja 150003, Colombia.

diana.becerra08@uptc.edu.co, juan.castillo06@uptc.edu.co

Palabras clave: Reacción Mannich, 8-hidroxiquinolin-2(1H)-ona, orto-C-alkilación.

Introducción: La quinolin-2(1H)-ona es un importante sistema aza-heterocíclico con diversas aplicaciones en la química orgánica y medicinal [1–3]. Por este motivo, se plantea la síntesis regioselectiva de 7-dialquilaminometil-8-hidroxiquinolin-2(1H)-onas **4** mediada por una reacción tipo mannich entre aminas secundarias **1**, paraformaldehído **2** y 8-hidroxiquinolin-2(1H)-ona **3** en ausencia de catalizador.

Métodos: Una mezcla de la amina secundaria **1**, paraformaldehído **2** y 8-hidroxiquinolin-2(1H)-ona **3** en acetonitrilo se agitó a temperatura ambiente por 24 horas. Posteriormente, se efectuó la evaporación del disolvente a presión reducida y purificación del crudo de reacción por cromatografía flash para obtener la 7-dialquilaminometil-8-hidroxiquinolin-2(1H)-ona **4**.

Resultados y conclusiones: Inicialmente, se estudiaron las condiciones óptimas de la reacción tipo Mannich en ausencia y presencia de ácidos de Lewis y Brønsted-Lowry. Posteriormente, el protocolo se extendió con éxito a la reacción tipo Mannich entre aminas secundarias **1a–d**, paraformaldehído **2** y 8-hidroxiquinolin 2(1H)-ona **3** en acetonitrilo bajo agitación a temperatura ambiente por 24 h, obteniéndose las 7- dialquilaminometil-8-hidroxiquinolin-2(1H)-onas **4** en buenos rendimiento (Esquema 1). La metodología sintética involucra la orto-C-alkilación del ión imonio **5** (formado in situ) por el C-7 de la quinolin-2(1H)-ona **3**. Es importante señalar que los subproductos de para-C-, N- y O alquilación no fueron detectados por espectroscopía de RMN ¹H. En conclusión, se desarrolló un protocolo tricomponente que se destaca por su simplicidad operativa, excelente regioselectividad, buenos rendimientos, la formación de dos enlaces en un solo paso y la liberación de agua como único subproducto.



Esquema 1. Síntesis tricomponente de 7-dialquilaminometil-8-hidroxiquinolin-2(1H)-onas **4**.

Referencias

- [1] Abonia, R.; Castillo, J.; Cuervo, P.; Insuasty, B.; Quiroga, J.; Ortíz, A.; Noguerras, M.; Cobo, J. Eur. J. Org. Chem. **2010**, 2010, 317–325.
- [2] Abonia, R.; Insuasty, D.; Castillo, J.; Insuasty, B.; Quiroga, J.; Noguerras, M.; Cobo, J. Eur. J. Med. Chem. **2012**, 57, 29–40.
- [3] Vettorazzi, M. M.; Insuasty, D.; Lima, S.; Gutiérrez, L.; Noguerras, M.; Marchal, A.; Abonia, R.; Andújar, S.; Spiegel, S.; Cobo, J.; Enriz, R. D. Bioorg. Chem. **2020**, 94, 103414.



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE DERIVADOS DE CLOROFILA CON APLICACIÓN EN FOTOOXIDACIÓN BENCÍLICA

Bleidy J. Muñoz, Julio R. Pinzón.

Universidad Industrial de Santander, Colombia.

bleidy.munoz@saber.uis.edu.co

Palabras clave: Clorofila, feotina, complejos metálicos, fotooxidación.

Introducción: Las clorofilas absorben luz eficientemente en la región visible del espectro. La excitación electrónica de estas moléculas genera un estado singlete que por entrecruzamiento de sistemas produce un estado triplete, que le transfiere su energía eficientemente al oxígeno triplete produciendo oxígeno singlete que es útil en reacciones de oxidación.²

Metodología: El extracto de clorofilas se obtuvo mediante extracción sólido-líquido, la separación se realizó por medio de cromatografía flash. Los fotocatalizadores se prepararon a partir de feofitina y sales de cada metal (Cu, Zn, Co, Fe). La fotooxidación se realizó irradiando las mezclas de reacción con LEDs de 660 nm.

Resultados y conclusiones: Se realizaron ensayos de fotooxidación agitando las mezclas de reacción expuestas al aire en solución de acetonitrilo e irradiando con LEDs de 660nm. Se ensayaron cuatro fotocatalizadores diferentes y cuatro compuestos bencílicos como sustrato. El seguimiento de las reacciones se hizo por HPLC. Se evaluó la concentración de fotocatalizador, la concentración de sustrato y el tiempo de exposición a temperatura constante de 20°C. Una vez optimizadas las condiciones de reacción, se encontró que los fotocatalizadores utilizados son capaces de convertir eficientemente los sustratos en sus correspondientes productos de oxidación bencílica con buen rendimiento. Sin embargo, los fotocatalizadores sufren de degradación oxidativa. La caracterización de las clorofilas, sus derivados, los fotocatalizadores preparados y los productos de fotooxidación se realizó por UV-Vis, FTIR ATR, RMN y MS-ESI.

Referencias:

1. Milne, B. F.; Toker, Y.; Rubio, A.; Nielsen, S. B. Unraveling the Intrinsic Color of Chlorophyll. *Angew. Chem.* **2015**, 127 (7), 2198–2201.
2. Krieger-Liszky, A. Singlet Oxygen Production in Photosynthesis. *J. Exp. Bot.* **2005**, 56 (411), 337–346.



RELACIÓN ESTRUCTURA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE LA BETANINA Y LA BETANIDINA FUNDADA EN TEORÍA DE FORMAS

Iliana María Ramírez Velásquez, Francisco José Caro Lopera, Alvaro Bedoya.

Instituto Tecnológico Metropolitano, Universidad de Medellín.

ilianaramirez@itm.edu.co

Introducción: El presente trabajo aborda los compuestos betanina y betanidina con el fin de elucidar la relación estructura-actividad antioxidante. Con este fin se ha empleado la denominada Teoría de Formas para establecer símiles entre las geometrías de las moléculas y determinar correspondencias con los descriptores: BDE, PA, ETE, IP, PDE.

Métodos: La Teoría de Formas es un método de discriminación robusto, utilizado en este caso, para comparar clústers de átomos. Se implementaron algoritmos fundados en un descriptor de Teoría de Formas llamado distancia Riemann para determinar paralelismos con los descriptores asociados con los mecanismos referidos a la actividad antioxidante.

Resultados y conclusiones: El mecanismo SPLET es el más favorable en las dos moléculas, dado que el descriptor de menor valor es el PA, 11.6 kcal/mol para ambos compuestos y corresponde al grupo C17COOH, por lo tanto, es el primer grupo que se desprotona. Este resultado es concordante con el obtenido por el método geométrico, ya que la menor distancia de Riemann corresponde al radical que presentó el menor valor de PA en cada compuesto, lo que implica coincidencias tanto en el mecanismo antioxidante más favorable como en el primer grupo que se desprotona.

El método fundado en Teoría de Formas es meramente geométrico y pese a ello mostró correspondencia con los descriptores asociados a las reacciones químicas relacionadas con la actividad antioxidante.

Referencias:

1. Yusuff, O. K.; Abdul Raheem, M. A. O.; Mukadam, A. A.; Sulaimon, R. O. Kinetics and Mechanism of the Antioxidant Activities of *C. Olitorius* and *V. Amygdalina* by Spectrophotometric and DFT Methods. *ACS Omega* 2019, 4 (9), 13671–13680. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b00851>.
2. Kanner, J.; Harel, S.; Granit, R. Betalains--a New Class of Dietary Cationized Antioxidants. *J Agric Food Chem* 2001, 49 (11), 5178–5185. <https://doi.org/10.1021/jf010456f>.
3. Dryden, I.; Mardia, K.; Sons, J.; Winkler, G. I. L. Dryden and K.V. Mardia: Statistical Shape Analysis. John Wiley Sons, 1998. 2000.

LA REACCIÓN DE FRIEDLÄNDER EN COMBINACIÓN CON LA CONDENSACIÓN TIPO KNOEVENAGEL COMO ESTRATEGIA DE SÍNTESIS DE 2,4-DI((E)-ESTIRIL)QUINOLINAS

Vera Diana, Ardila Diana, Lipez Kelly, Rodríguez Diego, Becerra Ruben, Palma Alirio.

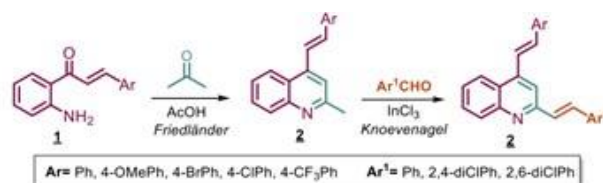
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

dianave.alarcon@gmail.com

Palabras clave: 2'-Aminoalcalonas, quinolinas, estililquinolinas.

Introducción: Las estililquinolinas revelan un amplio espectro de actividad biológica.¹ De los métodos conocidos de síntesis de 2(4)-estirilquinolinas, ninguno utiliza 2'-aminoalcalonas,² pero, recientemente, hemos demostrado que, a partir de ellas, vía reacción de Friedländer, se accede a 4-estirilquinolinas 2,3- disustituidas.³ Como se muestra a continuación, también son sustratos apropiados para preparar 2,4- bis-estirilquinolinas.

Metodología: Por reacción de Friedländer de las 2'-aminoalcalonas **1** y la acetona en medio ácido se obtuvieron las (E)-2-metil-4-estirilquinolinas **2**, las cuales, por condensación tipo Knoevenagel con diferentes aldehídos aromáticos en la presencia de InCl₃, fueron transformadas en las 2,4-di((E)-estiril)- quinolinas **3** (Esquema 1).



Esquema 1. Ruta de síntesis empleada para acceder a las nuevas bis-estirilquinolinas **3**.

Resultados y conclusiones: Se estableció que el calentamiento a 80 °C durante 18 horas de **1** con acetona en AcOH genera los productos de Friedländer **2**, cuyos rendimientos, independientemente de la naturaleza del sustituyente arilo en **1**, superan el 75%. El enlace C_{sp}-H del metilo presente en **2**, a continuación, es activado con InCl₃ en tolueno a reflujo, facilitando su olefinación con los aldehídos aromáticos seleccionados, y generando con altos rendimientos (> 70%) los productos de la condensación tipo Knoevenagel **3**. Los productos **2** y **3** representan sustancias cristalinas con puntos de fusión bien definidos, y su caracterización se realizó por IR, ¹H/¹³C RMN y HR-MS. El análisis de los espectros de ¹H RMN reveló que la configuración del fragmento estililo en **2**, así como la de los dos fragmentos estililo en **3** es E, lo cual significa que tanto la reacción de Friedländer como la condensación tipo Knoevenagel transcurrieron con completa estereoselectividad.

Referencias:

1. Kamal, A.; Rahim, A.; Riyaz, S.; Poornachandra, Y.; Balakrishna, M.; Ganesh, C.; Ali, S.; Sridhar, B. and Kumar, P. Regioselective synthesis, antimicrobial evaluation and theoretical studies of 2-styryl quinolines. *Org Biomol Chem.*, **2015**, 13, 1347–1357.
2. Kumar, D.; Kumar, A.; Mohsin, M.; Ansari, I.; Gautam, A. and Chakraborti, A. In(OTf)₃-catalyzed synthesis of 2-styryl quinolines: scope and limitations of metal Lewis acids for tandem Friedländer annulation–Knoevenagel condensation. *RSC Adv.*, **2015**, 5, 2920-2927.
3. Meléndez, A.; Plata, E.; Rodríguez, D.; Ardila, D.; Guerrero, S. A.; Acosta, L. M.; Cobo, J.; Nogueras, M. and Palma, A. Straightforward synthesis of novel 4-styrylquinolines/4-styrylquinolin 2-ones and 9-styryldihydroacridin-1(2H)-ones from substituted 2'-aminoalcalones. *Synthesis*, **2020**, 52, 1804–1822

REACCIÓN DE FORMACIÓN DE C-TETRAMETILCALIX[4]RESORCINARENO: ESTUDIO DE LA FORMACIÓN DE CONFÓRMEROS MEDIANTE RP-HPLC

Pineda-Castañeda Héctor Manuel, Rivera-Monroy Zuly Jenny, Maldonado-Villamil Mauricio

Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C., Colombia.

hmpinedac@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: C-tetrametilcalix[4]resorcinareno, Confórmeros, RP-HPLC , RP-SPE.

INTRODUCCIÓN: Los resorcinarenos también conocidos como calix[4]resorcinarenos son compuestos macrocíclicos polihidroxilados derivados del resorcinol, sintetizados por primera vez por Baeyer et al. a partir de aldehídos alifáticos y aromáticos^{1,2}. Están constituidos por cuatro anillos de resorcinol unidos entre sí en las posiciones 4 y 6 por un enlace metileno; con frecuencia este suele estar sustituido por cadenas alifáticas y/o aromáticas permitiendo la formación de isómeros conformacionales (estereoisomería)³. Teniendo en cuenta aspectos como la posición de las unidades de resorcinol y los sustituyentes en los puentes de metileno, se han reportado cinco posibles confórmeros para los resorcinarenos: i) corona, ii) bote, iii) silla, iv) silla de montar y v) diamante. Se ha reportado que la conformación más estable, para la mayoría de los casos, es el tipo corona, que presenta cavidades profundas estabilizadas mediante puentes de hidrógeno formados por los grupos hidroxilo presentes^{4,5}.

MÉTODOS: Se desarrolló un método por cromatografía líquida de alta eficiencia en fase reversa (RP HPLC) para estudiar la formación de confórmeros obtenidos en la reacción de formación de c-tetrametilcalix[4]resorcinareno. El método cromatográfico fue empleado para diseñar una estrategia para purificar los productos de reacción usando columnas de extracción en fase sólida (RP-SPE) y elución en gradiente.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Los perfiles cromatográficos de la reacción de ciclocondensación entre resorcinol y acetaldehído mostraron la presencia de tres productos bajo las diferentes condiciones de reacción y precipitación estudiadas. Mediante RP-SPE fue posible enriquecer los productos, que fueron posteriormente caracterizados mediante RP-HPLC, ¹H-NMR y ¹³C-NMR. Este trabajo exploró y estableció un nuevo método de análisis RP-HPLC y de separación mediante RP-SPE de isómeros conformacionales obtenidos en la reacción de formación de c-tetrametilcalix[4]resorcinareno.

REFERENCIAS:

1. Y.K. Agrawal; R.N. Patadia. Studies on Resorcinarenes and Their Analytical Applications. *Rev. Anal. Chem.* **2006**, 25 (3), 155–239. <https://doi.org/https://doi.org/10.1515/REVAC.2006.25.3.155>.
2. Shah, M. D.; Agrawal, Y. Calixarene: A New Architecture in the Analytical and Pharmaceutical Technology. *J. Sci. Ind. Res. (India)*. **2012**, 71, 21–26.
3. Jain, V. K.; Kanaiya, P. H. Chemistry of Calix[4]Resorcinarenes. *Russ. Chem. Rev.* **2011**, 80 (1), 75–102. <https://doi.org/10.1070/rc2011v080n01abeh004127>.
4. Castillo-Aguirre, A. A.; Pérez-Redondo, A.; Maldonado, M. Influence of the Hydrogen Bond on the Iteroselective O-Alkylation of Calix[4]Resorcinarenes. *J. Mol. Struct.* **2020**, 1202, 127402. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.127402>.
5. Español, E. S.; Villamil, M. M. Calixarenes: Generalities and Their Role in Improving the Solubility, Biocompatibility, Stability, Bioavailability, Detection, and Transport of Biomolecules. *Biomolecules* **2019**, 9 (3). <https://doi.org/10.3390/biom9030090>.

SÍNTESIS ONE-POT TRI-COMPONENTE DE 4-ESTIRILQUINAZOLINAS A PARTIR DE 1-(2-AMINOFENIL)-3-ARILPROP-2-EN-1-ONAS

Lipez Kelly, Rodríguez Diego, Ardila Diana, Vera Diana, Mantilla Juan Pablo, Palma Alirio.

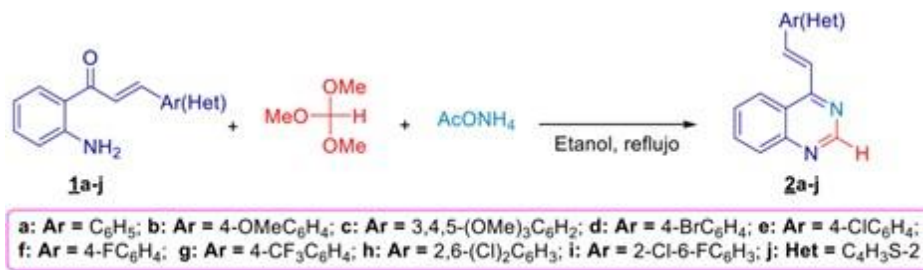
Universidad Industrial de Santander. Bucaramanga, Colombia.

kell_jo_08@hotmail.com

Palabras clave: Quinazolininas, estirilquinazolininas, 1-(2-aminofenil)-3-arylprop-2-en-1-onas, 2'-aminochalconas

Introducción Sintética y biológicamente, los compuestos quinazolinínicos representan dianas de gran interés.^{1,2} Curiosamente, ninguno de los métodos de síntesis de quinazolininas emplea 1-(2-aminofenil)-3-arylprop-2-en-1-onas como sustratos de partida. Basados en el potencial químico de esta clase de 2'-aminochalconas,³ hemos evaluado su uso en la síntesis de 4-estirilquinazolininas, aplicando una metodología one-pot tri-componente.

Métodos Mediante el calentamiento en etanol a reflujo de las 2'-aminochalconas **1a-j** con ortoformiato de trimetilo y acetato de amonio, este último como fuente de amoniaco, se realizó la síntesis one-pot tri-componente de las 4-estirilquinazolininas objetivo **2a-j**, las cuales fueron purificadas por cromatografía de columna sobre gel de sílice (Esquema 1).



Esquema 1. Síntesis one-pot tri-componente de las 4-estirilquinazolininas **2a-j**.

Resultados y conclusiones Se estableció que la reacción de **1** con ortoformiato de trimetilo y acetato de amonio en etanol a reflujo y tiempos de reacción de 5-18 h, produce las 4-estirilquinazolininas **2** con rendimientos superiores al 70 %, independientemente de la naturaleza del sustituyente (hetero)arilo de **1**. Los compuestos **2** se aislaron como sustancias sólidas con puntos de fusión bien definidos, y su caracterización se realizó por IR, ¹H/¹³C-RMN y HR-MS. La formación del núcleo quinazoliníco se corroboró por la presencia en la zona de más alta frecuencia de los espectros ¹H RMN, del singlete generado por el protón 2-H. Los espectros también revelaron que la configuración E del fragmento estirilo de **1** se retiene en las quinazolininas **2**. En correspondencia con los datos espectroscópicos obtenidos, se concluye que 2'-aminochalconas del tipo **1** contienen los elementos estructurales requeridos para realizar la construcción efectiva del núcleo quinazoliníco en su versión one-pot multicomponente.

Referencias:

1. Bose, D. S.; Ramesh, N. A convenient access to 2,4-disubstituted quinazolines via One-Pot three-component reaction under mild conditions. *Synth. Commun.* **2020**, *50*, 1495–1503.
2. Yan, Y.; Shi, M.; Niu, B.; Meng, X.; Zhu, C.; Liu, G.; Chen, T.; Liu, Y. Copper catalyzed aerobic oxidative decarboxylative amination of arylacetic acids: a facile access to 2-arylquinazolines. *RSC Adv.* **2016**, *6*, 36192–36197.
3. Meléndez, A.; Plata, E.; Rodríguez, D.; Ardila, D.; Guerrero, S. A.; Acosta, L. M.; Cobo, J.; Noguera, M.; Palma, A. Straightforward synthesis of novel 4-styrylquinolines/4-styrylquinolin-2-ones and 9-styryldihydroacridin-1(2H)-ones from substituted 2'-aminochalcones. *Synthesis.* **2020**, *52*, 1804–1822.



Diseño de inhibidores de la enzima feruloil esterasa C (6FAT) de *Fusarium oxysporum* derivados de D-glucosamina empleando herramientas computacionales como docking molecular y cálculos de teoría funcional de la densidad.

Diego Quiroga.

Universidad Militar Nueva Granada

diego.quiroga@unimilitar.edu.co

Palabras claves: D-glucosamina, N,S-ditiocarbamatos de alquilo, *Fusarium oxysporum*, feruloil esterasa C, docking molecular, teoría funcional de la densidad (DFT), análisis de componentes principales (PCA).

Introducción: Los enlaces éster entre el ácido ferúlico y los grupos hidroxilo de los polisacáridos son atacados por enzimas microbianas llamadas feruloil esterases, siendo segregadas por microorganismos¹. Uno de los fitopatógenos que segrega dicha enzima, es *Fusarium oxysporum*, responsable de millonarias pérdidas anuales.

Métodos: Utilizando el software Autodock, fueron realizados los cálculos de acoplamiento molecular entre enzima-ligando. El PCA se realizó utilizando cuatro parámetros (energía de unión, energías de desolvatación, energía electrostática, energía total de cada ligando y gap HOMO-LUMO). Los ligandos se obtuvieron a partir de D-glucosamina, disulfuro de carbono y aceptores de Michael en ausencia de disolvente.

Resultados y conclusiones: El PCA estableció que el ligando más diferenciable y con mayor afinidad con la enzima 6FAT, como alta estabilidad corresponde al compuesto **5a**. Este ligando presenta energía de afinidad de -5,84 kJ/mol y un gap HOMO-LUMO de 0,1632 hartree, evidenciando poca reactividad. Las interacciones que predominan en la formación del complejo son del tipo π -sulfuro entre los residuos HIS452 y TYR351, y los átomos de azufre del fragmento R-NCS₂R, π - π stacking entre los anillos de fenilo del ligando y el residuo PHE342 y puentes de hidrógeno entre el hidroxilo del fragmento CH₂OH y los residuos GLN129 y CYS200. Los rendimientos obtenidos en la síntesis química² fueron menores comparados con los derivados obtenidos a partir de 2-aminoácidos. Pese a esto, el uso de irradiación de ultrasonido en ausencia de disolvente, postula a esta metodología como ecoamigable y prometedora para la obtención de inhibidores de 6FAT derivados de D-glucosamina.

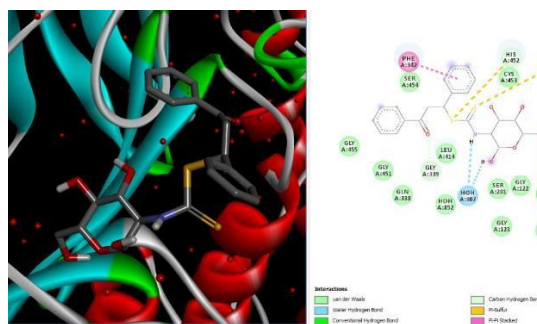


Figura 1. Diagrama 3D y 2D del complejo 6FAT-5a

Referencias:

1. Puchart, V.; Vršanská, M.; Mastihubová, M.; Topakas, E.; Vafiadi, C.; Faulds, C. B.; Tenkanen, M.; Christakopoulos, P.; Biely, P. Substrate and Positional Specificity of Feruloyl Esterases for Monoferuloylated and Monoacetylated 4-Nitrophenyl Glycosides. *Journal of Biotechnology* **2007**, 127 (2), 235-243. <https://doi.org/10.1016/j.jbiotec.2006.06.020>.
2. Dimarogona, M.; Topakas, E.; Christakopoulos, P.; Chrysinia, E. D. The Crystal Structure of a *Fusarium Oxysporum* Feruloyl Esterase That Belongs to the Tannase Family. *FEBS Letters* **2020**, 594 (11), 1738-1749. <https://doi.org/10.1002/1873-3468.13776>.
3. Quiroga, D.; Becerra, L. D.; Coy-Barrera, E. Ultrasound-Assisted Synthesis, Antifungal Activity against *Fusarium Oxysporum*, and Three-Dimensional Quantitative Structure-Activity Relationship of N, S -Dialkyl Dithiocarbamates Derived from 2-Amino Acids. *ACS Omega* **2019**, 4 (9), 13710-13720. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b01098>.



REACCIÓN TRICOMPONENTE ENTRE EL L-TIROSINATO DE ETILO, TIRAMINA Y FORMALDEHIDO

Laura Leal-Colorado, Rodolfo Quevedo.

. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

lfealc@unal.edu.co

Palabras claves: L-tirosina; tiramina; ciclofano; macrociclo; puente de hidrogeno.

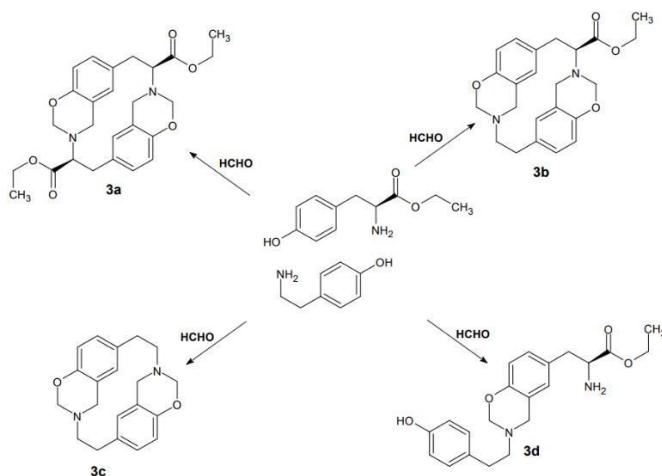
Los ciclofanos son compuestos macrocíclicos que poseen dos o más anillos aromáticos unidos por sus posiciones meta o para por espaciadores alifáticos cortos [1]. Las reacciones de macrociclación necesarias para la obtención de ciclofanos presenta grandes dificultades debido a que los productos son estructuras conformacionalmente rígidas y se presenta competencia entre la formación del macrociclo y la obtención de oligómeros lineales. En general, existen dos estrategias útiles para la obtención de estos compuestos; la primera de ellas es la formación de plantillas con metales como Hg, Pt o Pd y la segunda, trabajar bajo condiciones de alta dilución. Empleando estas estrategias se obtienen ciclofanos con rendimientos del 10 al 60 % dependiendo de la complejidad estructural del macrociclo [2-4].

En este trabajo se presenta la síntesis y análisis estructural de un nuevo azaciclofano asimétrico obtenido por medio de una macrociclación asistida por puentes de hidrogeno que involucra tres componentes, 2 compuestos de tipo 4-hidroxifeniletilamina (éster etílico de tirosina y tiramina) y formaldehído (esquema 2). Los resultados permitieron establecer que es posible extender la aplicación de la estrategia de macrociclación desarrollada en nuestro grupo de investigación hasta la obtención de macrociclos de mayor complejidad.



Esquema 2. Reacción del L-tirosinato de etilo, tiramina y formaldehído

A una solución de éster etílico de L-tirosina (0,5 g; 3 mmol) y tiramina (0,38 g; 3 mmol) en 10 mL en etanol 96%, se adicionó formaldehído (37%) en exceso. La mezcla de reacción se dejó en reposo hasta evaporación del disolvente. El sólido obtenido se suspendió en agua, se filtró y lavo con etanol. Se obtuvieron 607 mg (1,5 mmol), rendimiento 56 %, con un punto de fusión de 109-110°C, bandas características en IR correspondientes tensiones del enlace carbono doble enlace oxígeno (1733 cm^{-1}) y amina terciaria (1500 y 1228 cm^{-1}) y con una fórmula molecular correspondiente a $\text{C}_{23}\text{H}_{27}\text{N}_2\text{O}_4$ determinada por análisis elemental.



Esquema 3. Productos de reacciones en competencia.



Considerando la estructura de las 4-hidroxifeniletilaminas de partida es posible la competencia entre varias reacciones, lo que podría llevar a 4-productos diferentes (Esquema 3); un azaciclofano simétrico conformado por dos unidades de éster etílico de tirosina (**3a**) [10-12], un azaciclofano simétrico formado por dos unidades de tiramina (**3c**) [10-12], dímeros y/o oligómeros lineales (**3d**) [13] y por último el azaciclofano asimétrico producto de la reacción entre los 3 componentes (**3b**).

El producto mayoritario fue obtenido como un sólido amorfo amarillo oscuro, con un punto de fusión de 109-110°C. El espectro de infrarrojo muestra señales características correspondientes tensiones del enlace carbono doble enlace oxígeno (1733 cm⁻¹) y amina terciaria (1500 y 1228 cm⁻¹).

El análisis de los espectros de RMN ¹H mostró señales de base ancha y algunos multipletes no resueltos, además de un mayor número de señales en comparación con lo reportado en la literatura para **3a** y **3c** [9]. La asignación de las señales permitió confirmar la presencia de anillos trisustituidos provenientes tanto del éster etílico de tirosina como de tiramina junto con metilenos pertenecientes a núcleos benzoxazínicos. El análisis de los espectros de RMN ¹³C permitió confirmar la presencia del macrociclo. Por último, el análisis elemental se determinó que la fórmula molecular del compuesto es C₂₃H₂₇N₂O₄, lo cual corresponde al macrociclo asimétrico.

Esta reacción tricompone entre L-tirosinato-de-etilo, tiramina y formaldehído mostro que la diferencia en basicidad entre los nitrógenos de las dos aminas favorece la formación de un nuevo azaciclofano. Agradecemos a la Universidad Nacional de Colombia por la financiación del trabajo a través del proyecto de investigación No. 48195, al Departamento de Química y al grupo de investigación Química Macrocíclica por permitir el desarrollo de este trabajo.

REFERENCIAS:

1. R. Quevedo, M. González, and C. Díaz Oviedo, *Tetrahedron Lett.* 53 (13), 2012, 1595–1597, doi: 10.1016/j.tetlet.2012.01.064.
2. E. Zaborova, A. Six, H. Amokrane, F. Charra, F. Mathevet, A. Attias, D. Kreher, *Pure Appl. Chem.*, 2016, 88, 1005–1025, doi: 10.1515/pac 2016 0818.
3. Q. Guo, J. Zhou, H. Mao, Y. Qiu, M. Nguyen, Y. Feng, J. Liang, D. Shen, P. Li, Z. Liu, M. Wasielewski, J. Stoddart, *J. Am. Chem. Soc.* 2020, doi: 10.1021/jacs.0c01114.
4. H. Takemura, K. Sako, T. Iwanaga, A. Tatsumi, Y. Mogami, H. Watanabe, M. Aoki, S. Yūki, Y. Hayano, M. Itaka, *Tetrahedron*, 2018, 74 (16), 1991–2001, doi: 10.1016/j.tet.2018.03.002.
5. R.-Quevedo, B. Moreno Murillo, *Tetrahedron Lett.*, 2009, 50 (8), 936–938, , doi: 10.1016/j.tetlet.2008.12.023.
6. N. Nuñez dallos, A. Reyes, and R. Quevedo, *Tetrahedron Lett*, 2012, 53, 530–534, doi: 10.1016/j.tetlet.2011.11.086.
7. R. Quevedo, Maharramov, A.; Mahmudov, K.; Kopylovich, M., Pombeiro, A. (Eds.) Wiley: New York, USA, 2016; pp. 49 62. DOI: <https://doi.org/10.1002/9781119113874.ch3>.
8. N. Nuñez Dallos, C. Díaz Oviedo, and R. Quevedo , *TetrahedronLett.* , 2014, 55 (30), 4216–4221,doi: 10.1016/j.tetlet.2014.05.048.
9. R. Quevedo, *J. Mol. Struct.*, 2020, 1207, 127777, doi: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.127777>



SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UNA Sonda HÍBRIDA DE FERROCENO PARA LA DETECCIÓN ÓPTICA Y ELECTROQUÍMICA DE CIANURO

Carlos Arturo Peña Bernal

Universidad de los Andes.

ca.pena2072@uniandes.edu.co

Palabras claves: Ferroceno, pirazolo[1,5-a]pirimidina, sonda, cianuro

La detección selectiva y cuantificación sensible de cianuro es una problemática del mundo actual que requiere de sensores basados en moléculas pequeñas que ofrezcan diferentes formas de detectar este contaminante. De esta manera, la síntesis racional de un pigmento híbrido inorgánico/orgánico de ferroceno y pirazolo[1,5-a]pirimidina es apropiado para este análisis.

Se realiza la síntesis de los precursores y producto final a partir de la síntesis asistida por microondas. Posterior a esto, se realiza la síntesis de la pirazolopirimidina por sonoquímica a través de un método simple que presenta buenos rendimientos.

Se obtiene una sonda molecular que actúa como un pigmento de coloración intensa debido a los fenómenos de separación de carga de la molécula y las propiedades electrónicas. De esta forma, se tiene una sonda selectiva hacia el ion cianuro ya que es esta transferencia de carga la que influye al receptor al hacerlo menos reactivo frente a otros iones. En consecuencia, el sensor actúa como un sensor colorimétrico para la detección y cuantificación de cianuro. Adicionalmente, se realizaron los análisis electroquímicos influenciados por los cambios en el potencial y actividad redox de la molécula que están influenciados por el cambio de la distribución electrónica del ferroceno.

Referencias:

1. Tigreros, A.; Castillo, J.; Portilla, J. *Talanta*, 2020, 215, 120905
2. Tigreros, A.; Rosero, H.; Castillo, J.; Portilla, J. *Talanta* 2019, 196, 395 Jayasudha, P.; Manicannan, R.; Elango, K.P. *Sensor. Actuat. B-Chem.* 2015, 221, 1441



SÍNTESIS DE NUEVAS (E)-4'-(2-ESTIRIL)-[2,2'-BIQUINOLIN]-4(1H)-ONAS VÍA LA CONDENSACIÓN DE CLAISEN-SCHMIDT EN COMBINACIÓN CON LA ADICIÓN NUCLEOFÍLICA CONJUGADA TIPO AZA MICHAEL

Rodríguez Diego, Lipez Kelly, Becerra Ruben, Álvarez Geraldine, Ardila Diana, Vera Diana, Palma Alirio.

Universidad Industrial de Santander. Bucaramanga, Colombia.

diegoroib@gmail.com

Palabras clave: Biquinolinas, Claisen-Schmidt, adición aza-Michael.

INTRODUCCIÓN: Las 2,2'-biquinolinas son compuestos importantes desde los puntos de vista biológico y sintético.^{1,2} Curiosamente, no existen reportes sobre síntesis de (E)-4'-(2-estiril)-[2,2'-biquinolín]-4(1H)-onas **3** usando 4-estirilquinolinil-2-carbaldehídos **1** como precursores. En este trabajo describimos cómo a partir de 2-formilquinolinas **1** se accede a biquinolinas del tipo **3** en dos etapas de reacción.

MÉTODOS: La condensación de cantidades equimolares de los aldehídos **1** con la 2'-aminoacetofenona en una mezcla etanol-hidróxido de potasio a 5-10 °C, produce las chalconas **2**, las cuáles en una etapa posterior, por calentamiento en AcOH-HCl, son transformadas en los productos deseados quinolina-quinolona **3** (Esquema 1).



Esquema 1. Ruta de síntesis diseñada para acceder a los compuestos conjugados **3**.

RESULTADOS: La reacción de **1** con la 2-aminoacetofenona en medio básico y en frío generó las 2'-aminochalconas **2** con rendimientos cercanos al 80% y en tiempos de reacción de 1-4 horas. Los intermediarios **2**, posteriormente, por calentamiento en una mezcla de ácido acético-ácido clorhídrico, fueron transformadas, vía una adición nucleofílica intramolecular tipo aza-Michael, en los híbridos moleculares **3**. Las 4-estirilquinolina-4'-quinolonas **3** se aislaron como sustancias sólidas y con rendimientos superiores al 70%. Las estructuras de **2** y **3** fueron inequívocamente determinadas mediante las técnicas espectroscópicas IR, ¹H/¹³C-RMN y HR-MS. Adicionalmente, los experimentos RMN evidenciaron que el fragmento estirilo de **1** no sufrió modificación alguna durante las transformaciones realizadas, es decir, su configuración E se retuvo en **2** y **3**. A la luz de los resultados obtenidos, se concluye que la ruta de síntesis diseñada constituye una estrategia eficiente para llevar a cabo la construcción de los nuevos híbridos moleculares **3**.

REFERENCIAS:

1. Saugues, E.; Debaud, A. L.; Anizon, F.; Bonnefoy, N.; Moreau, P. Synthesis and Biological Activities of Polyquinoline Derivatives: New Bcl-2 Family Protein Modulators. *Eur. J. Med. Chem.* **2012**, *57*, 112–125.
2. Tomar, M.; Lucas, N. T.; Gardiner, M. G.; Müllen, K.; Jacob, J. Facile Synthesis and Coupling of Functionalized Isomeric Biquinolines. *Tetrahedron Lett.* **2012**, *53*, 285–288.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NUEVOS HÍBRIDOS MOLECULARES DEL TIPO BENZIMIDAZOL-QUINOLINA

Ardila Diana, Vera Diana, Lipez Kelly, Rodríguez Diego, Becerra Rubén, Muñoz Nicolás, Palma Alirio.

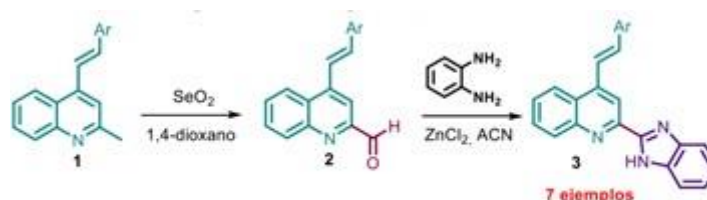
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

marielost0426@gmail.com

Palabras clave: Estirilquinolinas, quinolina-benzimidazoles, híbridos moleculares.

INTRODUCCIÓN Los híbridos moleculares centrados en los núcleos de la quinolina y benzimidazol destacan por su amplio espectro de actividad biológica. Sin embargo, híbridos del tipo (E)-2-(1H-benzo[d]imidazol-2-il)-4-estirilquinolina **3** no han sido estudiados, por lo que hemos desarrollado un protocolo de dos etapas para prepararlos a partir de (E)-2-metil-4-estirilquinolinas.

Metodología Las (E)-2-metil-4-estirilquinolinas **1**, preparadas previamente mediante la reacción de Friedländer de 2'-aminochalconas y acetona, fueron transformadas en los (E)-4-estirilquinolin-2-carbaldehídos **2** por oxidación con dióxido de selenio en 1,4-dioxano. La ciclo-condensación de **2** con orto fenilendiamina en la presencia de ZnCl₂, resultó en la formación de las esperadas (E)-2-(1H benzo[d]imidazol-2-il)-4-estirilquinolinas **3** (Esquema 1).



Esquema 1. Ruta de síntesis de los nuevos híbridos moleculares del tipo **3**.

Resultados y conclusiones La ruta de síntesis implementada para acceder a los híbridos moleculares de interés **3** involucra las transformaciones químicas que se detallan en el Esquema 1. Según este enfoque sintético, la reacción de **1** con SeO₂ en 1,4-dioxano a reflujo durante 1 hora, produce los formil-derivados **2** con rendimientos superiores al 80%. En la segunda etapa, los aldehídos **2** y la orto-fenilendiamina son sometidos a una ciclo-condensación catalizada por cloruro de zinc, y de esta manera transformados en los nuevos híbridos moleculares benzimidazol-estirilquinolina **3** con rendimientos superiores al 65%. Los productos intermedios y finales fueron aislados como sustancias sólidas y caracterizados inequívocamente por IR, ¹H/¹³C-RMN y HR-MS. Los resultados obtenidos llevan a concluir que la ruta de síntesis diseñada e implementada es un método alternativo para construir de manera fácil y eficiente, quimiotecas representativas de híbridos moleculares del tipo **3**, cuyas características físico químicas y espectroscópicas se reportan por primera vez.

Referencias:

1. Tigliani, D.; Salahuddin; Mazumder, A.; Shahar, M.; Kumar, R. and Jawed, M. Benzimidazole-Quinoline Hybrid Scaffold as Promising Pharmacological Agents: A Review. *Polycycl. Arom. Compd.*, **2021**.
2. Meléndez, A.; Plata, E.; Rodríguez, D.; Ardila, D.; Guerrero, S. A.; Acosta, L. M.; Cobo, J.; Noguera, M. and Palma, A. Straightforward synthesis of novel 4-styrylquinolines/4-styrylquinolin-2-ones and 9-styryldihydroacridin-1(2H)-ones from substituted 2'-aminochalcones. *Synthesis*, **2020**, 52, 1804–1822.
3. Bellam, M.; Gundluru, M.; Sarva, S.; Chadive, S.; Reddy, V.; Tarte, V. and Reddy, S. Synthesis and antioxidant activity of some new N-alkylated pyrazole-containing benzimidazoles. *Chem. Heterocycl. Compd.*, **2017**, 53, 173–178.



QUÍMICA TEÓRICA Y COMPUTACIONAL

ILECL-556

ELECTRONIC, STRUCTURAL, AND OPTICAL PROPERTIES OF $Y_{2-x}RE_xWO_6$ AND $La_{1-x}RE_xCuOS$ (RE=Eu AND Sm) PHOSPHORS

D. Espinoza, S. Conejeros y J. Llanos

Universidad Católica del Norte, Antofagasta, Chile.

despinoza01@ucn.cl

key-words: Inorganic materials, Optical properties, DFT calculations.

INTRODUCTION: The rare earth (RE) ions activated phosphors are characterized by their excellent optical properties. This type of compound has drawn much attention because of potential applications in many fields, such as solid-state lighting devices, biomedical imaging, plasma display, optical sensors and recently in solar cells, nano- and biotechnology.

METHODS: The inorganic phosphors were prepared via solid-state reactions at high temperature. The samples were characterized by powder X-ray diffraction (PXRD), diffuse reflectance measurements, and photoluminescence (PL) spectroscopy. Furthermore, periodic DFT calculations were carried out to gain insights into the optical and electronic properties of $Y_{2-x}RE_xWO_6$ and $La_{1-x}RE_xCuOS$ phosphors.

RESULTS AND CONCLUSIONS: The main results are summarised below:

$Y_{2-x}RE_xWO_6$: The coordination environments at the Y^{3+} sites are analysed in detail. It was found that the RE^{3+} cations occupy different sites of the host-matrix. The measured decay curves show that the Sm^{3+} ions form clusters at all compositions, while the Eu^{3+} ions are randomly distributed in the host structure. In addition, DFT calculations on the undoped material and on 144-atom supercells are in good agreement with experiment.

$La_{1-x}RE_xCuOS$: The calculated structural parameters, band gaps and electronic properties for the $LaCuOS$ and $SmCuOS$ compounds are in excellent agreement with experiment. Preliminary DFT calculations on a 64-atom supercell suggest that $La_{1-x}Sm_xCu_{10}O_{16}S_{16}$ might behave as a transparent conductor.

REFERENCES:

1. Espinoza, D.; Allan, N.L.; Castillo, R.; Conejeros, S.; Brito, I.; Martin, I.R.; Alemany, P.; Llanos, J. Energy transfer, structural and luminescent properties of the color tunable phosphor $Y_2WO_6:Sm^{3+}$. *Journal of Alloys and Compounds*. **2020**, 835, 155381. DOI: 10.1016/j.jallcom.2020.155381
2. Castillo, R.; Espinoza, D.; Conejeros, S.; Llanos, J. The Analyses of Luminescent Properties and Structure of the Tetragonal Phase of $Y_2WO_6:Eu^{3+}$ -doped Phosphor. *Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie*. **2020**, 646, 1122-1129. DOI: 10.1002/zaac.202000024
3. Llanos, J.; Corte, R.; Guizouarn, T.; Peña, O. Preparation, magnetic and optical properties of layered oxychalcogenides $SmCuOCh$ (Ch=S or Se). *Materials Research Bulletin*. **2006**, 41, 1266-1271. DOI: 10.1016/j.materresbull.2006.01.012



QM/MM STUDY OF THE GUINEA PIG L-ASPARAGINASE ENZYME REACTION PATHWAY: RELEVANCE OF THE PROTONATION STATE OF LYS188.

L. Sánchez, F. E. Medina, and G. A. Jaña.

Universidad Andrés Bello, Santiago, Chile.

les.sanchezquim@gmail.com

key-words: L-Asparaginase, QM/MM methods, Enzymatic catalysis.

L-Asparaginases (L-ASNase) enzymes of bacterial origin are used in the treatment of Acute Lymphoblastic Leukemia (ALL), since they are capable of hydrolyze the amino acid L-asparagine to aspartic acid, with a subsequent formation of an ammonia molecule. Thus, L-ASNase emerged as a very promising therapeutic target against tumorigenesis. However, its use has been demonstrated to cause debilitating side effects such as pancreatitis, autoimmune response, among others. These effects are attributed to its bacterial origin. To avoid these side effects, it has been proposed that mammalian L-ASNase could be a good alternative to combat ALL¹. In this regard, it has recently been found that guinea pig L-ASNase enzyme exhibits a K_m value similar to that of bacterial enzymes, however, the value of the enzyme's rate constant (k_{cat}) is lower than those required for its use in therapies. Therefore, identifying which factors affect the rate of the hydrolysis reaction is of particular interest; one way to address this issue is to study the mechanism of asparagine hydrolysis catalyzed by the L-ASNase enzyme at the atomic level. Understanding the interaction of L-ASNase with its enzymatic environment is crucial and therefore in this work the first stage of the reaction mechanism has been studied through QM/MM calculations. The minimum energy path was found by using the Conjugate Peak Refinement (CPR) algorithm, using B3LYP/6-31G(d) for QM region, CHARMM36 to model MM region and link atom model for QM/MM boundaries. All calculations were performed using CHARMM and Q-Chem programs. The results obtained show that a lysine (Lys188) is critical for the rate-limiting step. Furthermore, our results suggest that when Lys188 is protonated the activation energy is 20 kcal·mol⁻¹, which is in full agreement with the available experimental value. However, in its deprotonated state the activation energy rose above ~30 kcal·mol⁻¹. Based on the results obtained, we try to build up rules for what protonation state is the most favorable for Lys188 and what is the electrostatic effect associated with this effect.

References:

1. Schalk, A. M., Nguyen, H. A., Rigouin, C., & Lavie, A. (2014). Identification and structural analysis of an L-asparaginase enzyme from guinea pig with putative tumor cell killing properties. *Journal of Biological Chemistry*, **2014**, 289, 33175-33186.



COMPUTATIONAL STUDY OF THE GLUCOSYLATION MECHANISM OF RESVERATROL BY SUCROSE PHOSPHORYLASE OF THE ORGANISM BIFIDOBACTERIUM ADOLESCENTIS

C. Febres-Molina, G. A. Jaña

Universidad Andrés Bello, Santiago - Chile.

c.febresmolina@uandresbello.edu

key-words: Glucosylation, Resveratrol, Sucrose phosphorylase, QM/MM.

Oxidative stress and inflammation are nowadays known to be the root causes of most of the conditions that afflict all types of people globally. Natural polyphenolic compounds have many properties with important applications in the food, cosmetic and pharmaceutical industries, mainly due to their great antioxidant, anti-inflammatory and anticancer capacity.¹ Unfortunately, these molecules have very low solubility (water) and bioavailability. Glucosylation of polyphenols is a good alternative to overcome these drawbacks. Specifically, for the natural polyphenol resveratrol this process is performed by the native enzyme sucrose phosphorylase (SP) from the organism *B. adolescentis* very inefficiently. However, the Q345F point mutation in SP has been shown to achieve 97% monoglucosylation of this molecule and the exact mechanism is still unknown.² Considering all the aforementioned, we studied in this work the glucosylation reaction of resveratrol by the mutant enzyme SP Q345F through QM/MM calculations, considering different sizes of quantum mechanical zones as well as different functionals and basis sets. Within the framework of the results and at a BP86/6-31G* level of theory with dispersion correction D3(0), the structure of an oxocarbenium ion-like transition state and the minimum energy adiabatic path that connects reactants with products were obtained, suggesting a concerted but asynchronous mechanism. Subsequently, the energy correction at wB97X-V/cc-pVDZ and D3(0) level of theory yielded a 16.67 kcal/mol energy barrier, which fits perfectly within the known experimental range for this type of enzymes. The understanding of the glucosylation mechanism of the SP enzyme with the natural polyphenol resveratrol presented in this work could serve as the basis for subsequent studies on related enzymes.

References:

1. Rasouli, H.; Farzaei, M. H.; Khodarahmi, R. Polyphenols and their benefits: A review. *Int. J. Food Prop.* **2017**, 20(sup2), 1700–1741.
2. Kraus, M.; Grimm, C.; Seibel, J. Switching enzyme specificity from phosphate to resveratrol glucosylation. *ChemComm.* **2017**, 53(90), 12181–12184.



RATIONAL DESIGN OF NOVEL MATRICES FOR MALDI MS ASSAYS: AN IN SILICO PERSPECTIVE

Carlos A. Padilla, Luis M. Diaz-Sánchez, Marianny Y. Combariz, Cristian Blanco-Tirado, Aldo F. Combariza

Universidad de Sucre - Universidad Industrial de Santander (UIS)

carlos.padilla@unisucrevirtual.edu.co

Palabras claves: MALDI, Rational-Design, Quantum-Chemistry, Mass-Spectrometry

Introducción: Matrices used in MALDI analytical-techniques are of paramount importance for the ionization process and efficient mass-charge spectral generation. Here, we explore the rational design of MALDI matrices from a computational-chemistry viewpoint, using algorithms based on quantum and statistical mechanics principles to calculate and analyze relevant physical-chemical properties of MALDI matrices(1).

Métodos: A total of 34 novel MALDI matrices based on Fluorene (SFS-, CN-SFS-, FL-), Dibromofluorene (FL-), Carbazole and Triphenylamine cores were analyzed, including DCTB and α -CNPVs as reference/control systems(2,3). Relevant physical-chemical parameters were calculated using ab initio, semiempirical and DFT methods with specialized quantum-chemistry software, employing High-Performance Computing (HPC) tools.

Resultados y conclusiones: The presence of -CN and -NO₂ substituent groups increase the ionization-energy (E_i) in all matrices, which is suitable for the matrix-analyte Electron-Transfer process. Comparing SFS- with CN-SFS and FLA-matrices, the -CN group in the backbone breaks the molecular planarity and increase the E_i in 0.7 eV (67.54 kJ/mol), except when the -CN is combined with the -OCH₃ group as substituent (E_i increases 0.6 eV). Comparing all matrices evaluated, the FLs have the major IP values (above 8eV) alongside FLAs. On the other hand, the -OH group decreases the IP values, due to their positive mesomeric-effect. The next step is to evaluate other physical-chemical parameters such as UV-vis absorption in solid state, the solubility values on several solvents used in MALDI, and crystal formation. Finally, we emphasize that these results will allow the analysis of the physical-chemical behavior between compound families to detect useful patterns.

Referencias:

1. Tammekeivi, E.; Ghiami-Shomami, A.; Tshepelevitsh, S.; Trummal, A.; Ilisson, M.; Selberg, S.; Vahur, S.; Teearu, A.; Lõkov, M.; Peets, P.; Pagano, T.; Leito, I. J. Am. Soc. Mass Spectrom. 2021, 32(4), 1080–1095. <https://doi.org/10.1021/jasms.1c00037>.
2. Castellanos-García, L.; Agudelo, B.; Rosales, H.; Cely, M.; Ochoa-Puentes, C.; Blanco-Tirado, C.; Sierra, C.; Combariza, M. J. Am. Soc. Mass Spectrom. 2017, 28(12), 2548–2560. <https://doi.org/10.1007/s13361-017-1783-z>.
3. Ramírez-Pradilla, J.; Blanco-Tirado, C.; Combariza, M. ACS Appl. Mater. Interfaces. 2019, 11(11), 10975–10987. <https://doi.org/10.1021/acsami.8b22246>.



DISEÑO IN SILICO DE UN RECEPTOR PEPTÍDICO PARA EL RECONOCIMIENTO DE CALCITONINA ASOCIADA CON EL CARCINOMA MEDULAR DE TIROIDES

María Paula Zamudio-Ramirez, James Guevara-Pulido.

Universidad El Bosque

mzamudior@unbosque.edu.co

Palabras Clave: Calcitonina, biomarcador, biorreceptor, mimetización.

El Carcinoma medular de tiroides presenta una secreción anormal de calcitonina que es catalogada como un biomarcador. Si se diagnosticara en menor tiempo podría iniciarse un tratamiento que pueda asegurar que sea curativo. Desarrollar métodos de cuantificación de biomarcadores presentes en cáncer con biosensores reduciría el impacto de estas enfermedades.

- Virtual screening basado en estructura (AutoDock Vina y AutoDock Tools).
- Comparación de estructuras diseñadas y análisis SAR.
- Evaluación de toxicidad por medio de los Softwares PreADMET y Lazar de los biorreceptores diseñados.
- Análisis retro-sintético para la obtención de los biorreceptores diseñados.

Se tomó el sitio activo del receptor CTR y los aminoácidos del mismo que interactuaban con la calcitonina, a partir de los cuales se diseñó un total de 16 biorreceptores, se realizaron cálculos de afinidades con el Software AutoDock Vina y se compararon con las obtenidas con el CTR. Se obtuvo un biorreceptor con una energía mayor que la esperada y con un menor número de aminoácidos. Es posible por medio de inteligencia artificial (in silico) diseñar biorreceptores con afinidades iguales o mayores a las enzimas naturales, reduciendo así los desechos y el tiempo que se podría generar al hacerlo de forma experimental.

Referencias:

1. Rodríguez-Salazar, L., Guevara-Pulido, J., Morales-Mendoza, E., & Ibla, F. In silico design of peptide receptor for carboxyhemoglobin recognition [Versión electrónica] Informatics in Medicine Unlocked, 2019, 14, 1–5. <https://doi.org/10.1016/J.IMU.2019.01.003> (Consultado el 20/Octubre/2020).
2. Meng, X., Zhang, H., Mezei, M., Cui, M. Molecular Docking: A powerful approach for structure based drug discovery. Curr Comput Aided Drug Des [Versión electrónica], 2011, PubMed. <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/21534921/> (Consultado el 19/Octubre/2020).
3. Meneses, L., Cuesta, S. Determinación Computacional de la Afinidad y Eficiencia de Enlace de Antiinflamatorios No Esteroides Inhibidores De la Ciclooxygenasa-2 [Versión electrónica], 2015. Revista ecuatoriana de medicina y ciencias biológicas, 36(2), 17-25. <https://doi.org/10.26807/remcb.v36i1-2.260> (Consultado el 25/Octubre/2020).



Análisis quimi-topológico de 25 herbicidas regulados por el Instituto Colombiano Agropecuario

Emilbus A. Uribe, Brayan Rodríguez Blanco, Laura Valentina Rojas Sánchez, Mario Barón Rodríguez.

Universidad Santo Tomás Sedes Bogotá y Bucaramanga.

emilbusuribe@usantotomas.edu.co

Palabras claves: Quimi-topología Herbicidas Agrupamientos Dendrogramas.

Introducción: Los herbicidas son sustancias químicas usadas para el control de las plagas en los cultivos. Diversos estudios muestran que estas sustancias pertenecen a grupos robustos. En este trabajo, teórico, se encontró que existen relaciones de similitud entre herbicidas de diferentes grupos, y que estos resultados son corroborados por estudios previos.

Métodos: Se construyó una matriz de datos 24x25 (24: propiedades y 25 herbicidas). Con la matriz de datos normalizada se realizaron 12 análisis de agrupamientos. Se extrajo la base topológica de cada uno [1] y se estudiaron propiedades topológicas como clausura, frontera e interior de tres subconjuntos de Q.

Resultados y Conclusiones: La clausura y la frontera de uno de los subconjuntos sugiere la existencia de relaciones entre herbicidas postsiembra y presiembra. El conjunto interior sugiere que los herbicidas glifosato y Glufosinato solo se parecen entre ellos y no se parecen a otros elementos de este subconjunto (A). Es decir que si se pensara en una sustancia reemplazo para el glifosato debería pensarse en el Glufosinato y no ningún uno de los herbicidas contemplados en A. Este resultado, en particular, es interesante porque corrobora estudios experimentales previos donde sólo se sugiere el reemplazo del Glufosinato por glifosato [2].

La clausura y frontera de otro de los subconjuntos (B) están constituidas por los mismos elementos, esto mismo ocurre con el subconjunto C. Aquí se encuentran relaciones entre: a) la Pendimetalina, Quinclorac y el Propanil, y b) el Diuron, Atrazina y Metribuzina y el Norflurazon.

Referencias:

1. A) Restrepo, G.; Villaveces, J. L. From Trees (Dendrograms and Consensus Trees) to Topology. *Croat. Chem. acta* 2005, 78 (2), 275–281. C) Uribe, E. A.; Ramírez-Romero, M. C.; Trujillo-González, D. E. Estudio Teórico Quimi-topológico de Sustancias Químicas TMO_n (TM= Sc-Zn y N= 1-4). 2020.
2. A) Culpepper, A. S.; York, A.; Control and Crop Response to Glufosinate Applied to 'PHY 485 WRF' cotton. *Weed Technol.* 2009, 23 (3), 356–362. B) Cook, S. K.; Wynn, S. C.; Clarke, J. H. How Valuable Is Glyphosate to UK Agriculture and the Environment? *Outlooks Pest Manag.* 2010, 21 (6), 280–284.



Estudio teórico de la microsolvatación de glifosato aniónico y catiónico.

Dumer Stiven Sacanamboy Papamija, Elkin Alberto Tívez Marrugo.

Universidad de la Amazonia

d.sacanambo@udla.edu.co.

El glifosato es un herbicida mayormente comercializado a nivel mundial, y el uso desmedido en sistemas agrícolas permite que el glifosato y sus subproductos lleguen a áreas no deseadas por lixiviación y escorrentía. Esta investigación tiene como propósito evaluar teóricamente la microsolvatación de glifosato zwitteriónico. Para realizar esta tarea, se utilizó el algoritmo híbrido SnippetKick, que está diseñado para generar un conjunto de conformeros a partir de una exploración estocástica, así como la búsqueda del mínimo global a través de la implementación del programa Mopac con el método semi-empírico PM6-DH2.

Los resultados obtenidos indicaron que las diferentes estructuras encontradas presentaron patrones de interacción entre sus grupos fosfato y carboxilo, sin embargo, la mayor interacción con las moléculas explícitas de agua se encuentran interaccionando con el

grupo fosfato, formando redes tipo puente de hidrogeno. Además, se observa que a partir de cuatro moléculas explícitas de agua se comienzan a evidenciar interacciones tipo puente de hidrogeno donador-aceptor. Un análisis topológico de la densidad electrónica sobre los puntos críticos de enlace (BCPs) permitió describir el conjunto de interacciones de naturaleza no covalentes. además de la generación de los puntos críticos de anillo (RCPs) favorecen la estabilidad de los sistemas por la formación de estructuras cíclicas mediante sus interacciones y finalmente el entrecruzamiento de los BCPs y RCPs evidenciaron la presencia de puntos críticos de caja (CCPs) que incrementan la estabilidad del conjunto de conformaciones evaluadas.

Referencias:

1. Hadad, C., Florez, E., Acelas, N., Merino, G., & Restrepo, A. (2019). Microsolvation of small cations and anions. *International Journal of Quantum Chemistry*, 119(2), 1–4. <https://doi.org/10.1002/qua.25766>
2. International Agency for Research on Cancer. (2015). IARC Monographs Volume 112: evaluation of five organophosphate insecticides and herbicides 20. *World Health Organization*, 112, 1–2. <https://doi.org/10.1111/j.1742-6723.2004.00593.x>
3. Yáñez, O. O. (2018). Desarrollo e Implementación de Algoritmos Híbridos para la Exploración de la Superficie de Energía Potencial en Clusters Atómicos y Moleculares. Universidad Andres Bello



Determinación de propiedades Mecánicas del silicato de calcio hidratado (C-S-H) por Dinámica Molecular.

Jose Beltrán¹, Andrés López¹, Leonardo Muñoz-Rugeles¹, Rafael Cabanzo¹, Enrique Mejía^{1,*}

¹Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular (LEAM), Parque Tecnológico de Guatiguará (PTG), Universidad Industrial de Santander, Piedecuesta, Santander, Colombia,

emejia@uis.edu.co

Palabras clave: Gel C-S-H, recocido simulado, propiedades mecánicas

La complejidad estructural a nivel molecular del gel de silicato de calcio hidratado (C-S-H), productos de hidratación dominante dentro de los productos que constituye la pasta de cemento, no ha permitido su completa comprensión. La urgente necesidad de evaluar el efecto entre la composición química y las propiedades mecánicas permanece esencialmente inexplorada, debido a la existencia de limitantes experimentales para la caracterización estructural completa, lo que presentó un desafío en la comunidad científica, conllevando a la integración de tratamientos experimental-teórico, para obtener un mayor acercamiento y comprensión a la estructura. El propósito de este trabajo es evaluar el efecto de diferentes relaciones Calcio-Silicio (C/S) y Agua Silicio (W/S) sobre las propiedades mecánicas del sistema. Para lo cual se realizó un recocido simulado, llevando la estructura de 300K a 1000K durante un tiempo de 28 ps y posterior enfriamiento durante 28 ps, lo que permitió la formación de poros en el espacio interlamilar de la estructura. Además, se evaluaron los módulos de Bulk, Shear, Young y relación de Poisson. Los resultados obtenidos permiten evidenciar efecto la composición química del gel C-S-H sobre las propiedades mecánicas.

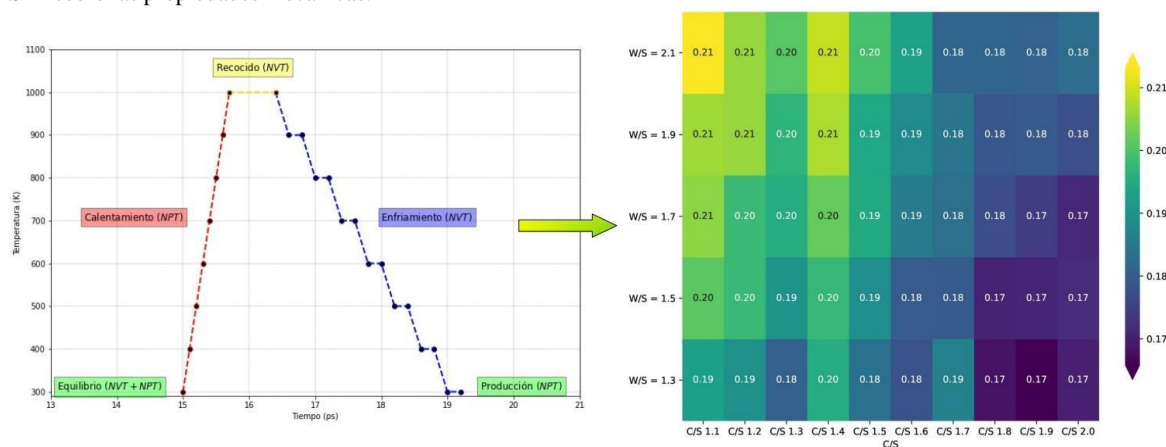


Figura 1. Esquema recocido simulado (Simulated Annealing) y las relaciones de Poisson para modelos de C-S-H bajo diferentes relaciones C/S y W/S.

Referencias:

- Hou, D., Ma, H., Zhu, Y., y Li, Z. (2014). Calcium silicate hydrate from dry to saturated state: structure, dynamics and mechanical properties. *Acta materialia*, 67, 81–94.
- Hou, D., Zhang, J., Li, Z., y Zhu, Y. (2015). Uniaxial tension study of calcium silicate hydrate (c-s-h): structure, dynamics and mechanical properties. *Materials and structures*, 48(11), 3811–3824.
- Cygan, R. T., Liang, J.-J., y Kalinichev, A. G. (2004). Molecular models of hydroxide, oxyhydroxide, and clay phases and the development of a general force field. *The Journal of Physical Chemistry B*, 108(4), 1255–1266.
- Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T., y Flannery, B. P. (2007). *Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing*. Cambridge university press.



Efecto de la porosidad en las propiedades mecánicas del silicato de calcio hidratado (C-S-H)

Andrés López¹, Jose Beltrán¹, Leonardo Muñoz-Rugeles¹, Rafael Cabanzo¹, Enrique Mejía^{1,2}

¹Laboratorio de Espectroscopia Atómica y Molecular (LEAM), Parque Tecnológico de Guatiguará (PTG), Universidad Industrial de Santander, Piedecuesta, Santander, Colombia,

emejia@uis.edu.co

Palabras Clave: Gel C-S-H, Dinámica Molecular, Recocido Simulado, Porosidad.

El cemento es el material de construcción más ampliamente empleado, donde el comportamiento mecánico es considerado como la propiedad fundamental. Dicha propiedad se encuentra asociado al gel de silicato de calcio hidratado, constituyendo el 60% de los productos de hidratación que componen a la pasta de cemento. Sin embargo, las limitaciones experimentales para evaluar la dependencia de la porosidad sobre la composición química y propiedades mecánicas del gel C-S-H permanece en gran parte sin explorar. Pese a ello los datos experimentales han demostrado la existencia de una relación entre la resistencia a la compresión y la resistencia a la tracción indirecta del cemento la cual no es constante, sino que depende de la porosidad. En el presente trabajo se evaluó el efecto de la porosidad de modelos del gel C-S-H, con diferentes relaciones de Calcio Silicio (C/S) y Agua-Silicio (W/S), obtenidos a partir del mineral análogo Tobermorita 14 Å, el cual se sometió a un proceso de recocido simulado en Dinámica Molecular, donde se elevó la temperatura a 1000 K y calentando durante 28 [ps], dando la formación de la estructura amorfa y porosa característica del gel C-S-H. Ahora bien, para determinar el volumen del poro formado en el transcurso de la simulación se implementó el método alpha shapes. Los resultados muestran una relación entre el volumen del poro y la reducción de los módulos de Bulk, Shear y Young del sistema.

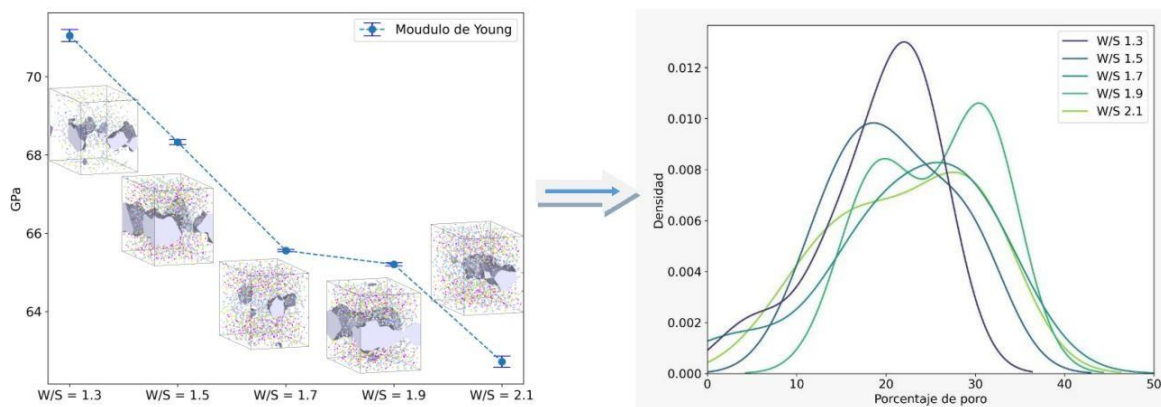


Figura 1. Perfil del Modulo de Young para modelos del gel de C-S-H para diferentes relaciones W/S y distribución de densidad del porcentaje de poro para estos modelos.

Referencias:

- Hou, D., Ma, H., Zhu, Y., y Li, Z. (2014). Calcium silicate hydrate from dry to saturated state:structure, dynamics and mechanical properties. *Acta materialia*, 67, 81–94.
- Cygan, R. T., Liang, J.-J., y Kalinichev, A. G. (2004). Molecular models of hydroxide, oxyhydroxide, and clay phases and the development of a general force field. *The Journal of Physical Chemistry B*, 108(4), 1255–1266.
- Edelsbrunner, H., & Mücke, E. P. (1994). Three-dimensional alpha shapes. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, 13(1), 43-72.
- Akkiraju, N., Edelsbrunner, H., Facello, M., Fu, P., Mucke, E. P., & Varela, C. (1995, January). Alpha shapes: definition and software. In *Proceedings of the 1st international computational geometry software workshop* (Vol. 63, p. 66).



Estudio de las Interacciones de Derivados de Tipifarnib con el Sitio de Unión de la Enzima CYP51

Laura Polania-Varón¹, Maicol Ahumedo-Monterrosa², Elkin A Tilvez¹

¹Universidad de la Amazonia, Programa de Química, Florencia, Caquetá, Colombia 180002. ²Universidad de Cartagena, Programa de Química, Cartagena, Bolívar, Colombia 130001

lau.polania@udla.edu.co, mahumedom@unicartagena.edu.co.

Palabras clave: Chagas; Docking; Trypanosoma; CYP51; Tipifarnib.

La enfermedad de Chagas es una enfermedad tropical olvidada potencialmente mortal que afecta alrededor de 15 millones de personas en el mundo, según cifras de la Organización Mundial de la Salud (WHO). Una investigación teórica realizada en nuestro laboratorio reportó un modelo QSAR con un nuevo conjunto de derivados de tipifarnib con valores aceptables de posible actividad inhibitoria contra parásitos de *T. cruzi*. Las estructuras obtenidas del modelo QSAR junto con otros derivados de tipifarnib reportados en la literatura fueron usadas para estudiar las interacciones intermoleculares formadas con la enzima lanosterol 14 α desmetilasa (CYP51). La herramienta computacional docking molecular fue usada para obtener las conformaciones proteína-ligando, considerando un receptor rígido y el ligando flexible.

Los resultados muestran que 18 enantiómeros-(R) son potencialmente activos frente a la enzima y presentan modos de enlace similares, donde se forma un enlace covalente coordinado entre el átomo de nitrógeno del anillo imidazol y el átomo de hierro (Fe³⁺) del cofactor hemo. Los restantes enantiómeros-(R) y todos los enantiómeros-(S) presentaron conformaciones alternas estabilizadas por puentes de hidrógeno y puentes de halógeno. Los resultados del modelamiento molecular indican que dos derivados de tipifarnib que fueron propuestos mediante el modelo QSAR podrían tener una actividad biológica equivalente o mayor a la del posaconazol y llegar a ser promisorios para combatir la enfermedad de Chagas.

Referencias:

1. Granados, K. S, Tilvez, E. A, Ahumedo, M., (2019). Modelado de las Relaciones Cuantitativas Estructura–Actividad (QSAR) de Análogos del tipifarnib con Actividad Antichagásica. *Inf. Technol*, 30(1), 3-14.
2. Kraus, J.M., Tatipaka, H. B, McGuffin, S. A, Chennamaneti, N. K et al. (2010). Second Generation Analogues of the Cancer Drug Clinical Candidate tipifarnib for Anti-Chagas Disease Drug Discovery. *Journal of Medicinal Chemistry*, 53(10), 3887-3898.



SÍNTESIS DE ACETALES POR CATÁLISIS ÁCIDA PARA LA APLICACIÓN EN FRAGANCIAS COMO PROTECTOR DE GRUPOS CARBONILO Y ESTABILIZACIÓN SENSORIAL

Jhared Eduardo Martínez Valdés^{1,2}, Juan David Camayo Quintana^{1,2}, Alejandra Gutierrez Cossío² y Lizbeth Lorena López Parra¹

¹Grupo de investigación en Electroquímica y medio ambiente, Universidad Santiago de Cali 'La Tour S.A.

lizbeth.lopez00@usc.edu.co

Palabras clave: acetales, catálisis, fragancias.

Para ciertas aplicaciones en la industria cosmética es necesario adicionar a las formulaciones acetales que minimicen los cambios en los perfiles de las fragancias. La mayoría de los acetales utilizados tienen precios elevados y ocasionan un aumento de los costos de fabricación de los productos terminados.

Se sintetizaron tres acetales de interés en la industria de fragancias por catálisis ácida utilizando como reactivos el hidroxicitronelal, el lilial y el helional con etanol, para producir los acetales dietílicos correspondientes, variándose la carga del ácido, el tipo del ácido, el tiempo de reacción y la relación aldehído/alcohol.

Los productos obtenidos fueron dietil acetal del hidroxicitronelal, dietil acetal del lilial y dietil acetal del helional, en los que se comparó el ácido nítrico, el ácido sulfúrico y el ácido clorhídrico como catalizador, siendo este último el que presentó mayores porcentajes de conversión y además una menor cantidad de subproductos. El mejor rendimiento de conversión de cada acetal se obtuvo a una concentración del ácido al 0.01%. En cuanto al tiempo de reacción no hubo diferencia significativa entre 30 min, 1 hora y 2 horas. Se identificaron y cuantificaron los acetales producidos por medio de cromatografía de gases con acople a espectrometría de masas y espectroscopia infrarroja. Los acetales obtenidos fueron evaluados por pruebas organolépticas y fisicoquímicas, lo que permitió concluir que podrían utilizarse como materia prima en la producción de fragancias a un menor costo.

Referencias:

1. Dong, J.; Yu, L.; Xie, J. A Simple and Versatile Method for the Formation of Acetals/Ketals Using Trace Conventional Acids. *ACS Omega*. **2018**, 3(5), 4974–4985.
2. Li, L.; Korányi, T. I.; Sels, B. F.; Pescarmona, P. P. Highly-efficient conversion of glycerol to solketal over heterogeneous Lewis acid catalysts. *Green Chemistry*. **2012**, 14(6), 1611–1619.
3. Leonard, N. M.; Oswald, M. C.; Freiberg, D. A.; Nattier, B. A.; Smith, R. C.; Mohan, R. S. A simple and versatile method for the synthesis of acetals from aldehydes and ketones using bismuth triflate. *Journal of Organic Chemistry*. **2002**, 67(15), 5202–5207.



FORMULACIÓN Y ANÁLISIS DE ESTABILIDAD Y ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA DE UN DESODORANTE NATURAL

Daniel Quinayás Tello, Lizbeth Lorena López Parra.

Grupo de investigación en Electroquímica y medio ambiente, Universidad Santiago de Cali

daniel.quinayas00@usc.edu.co

Palabras clave: Desodorante, Pickering, aceite esencial.

Múltiples estudios han mostrado que los compuestos presentes en desodorantes y antitranspirantes, principalmente los antibacteriales como algunas sales de aluminio, el triclosán, y conservantes como los parabenos, tienen efectos negativos en la salud de las personas, lo que lleva a la búsqueda de alternativas con ingredientes naturales.

Se realizaron cinco formulaciones de un desodorante natural tipo crema, emulsionado por partículas sólidas, utilizando materiales ambientalmente sustentables y aceites esenciales de citronela y de pino. Adicionalmente se realizaron pruebas de crecimiento bacteriano para *Staphylococcus aureus* a los extractos y a las formulaciones por el método de difusión en disco.

Al analizar las diferentes formulaciones utilizando el aceite esencial de citronela y el aceite de pino, se encontró que el mejor para el desarrollo de un desodorante comercial es el aceite de citronela, pues es más efectivo ante la bacteria *Staphylococcus aureus*. La efectividad del extracto de citronela y de pino comparado con el control positivo (ciprofloxacina) es del 66.7% y 41.7% respectivamente. Por otro lado, para el desarrollo de un desodorante efectivo se encontró que la combinación de aceite esencial de citronela/óxido de zinc es la ideal como formulación y con una alternativa comercial real y promisorio. Las formulaciones utilizando bicarbonato de sodio no presentaron características sensoriales positivas en un periodo de estudio de 6 meses del producto terminado. Los componentes volátiles de las formulaciones fueron estudiados utilizando cromatografía de gases acoplada a masas identificando el citronelal, el limoneno, el isopulegol y el linalool como productos principales.

Referencias:

1. Abu, M. H.; Goda, E. S.; Gab-Allah, M. A.; Hong, S. E.; Pandit, B.; Lee, S.; Gamal, H.; Rehman, A. U.; Yoon, K. R. Xanthan gum-derived materials for applications in environment and eco friendly materials. *Journal of Environmental Chemical Engineering*. **2021**, Vol. 9(1) p. 104702.
2. Bayala, B.; Coulibaly, A. Y.; Djigma, F. W.; Nagalo, B. M.; Baron, S.; Figueredo, G.; Lobaccaro, J. M. A.; Simpore, J. Chemical composition, antioxidant, anti-inflammatory and antiproliferative activities of the essential oil of *Cymbopogon nardus*, a plant used in traditional medicine. *Biomolecular Concepts*. **2020**, 11(1), 86–96.



ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LAS PROPIEDADES FARMACOLÓGICAS DE LIGANDOS 2N2O Y 4N TETRADENTADOS Y SU POTENCIAL APLICACIÓN LA ENFERMEDAD DE ALZHEIMER

Nicolás Puentes-Díaz¹, Diego Chaparro Gutiérrez^{2*}, Areli Flores-Gaspar³ y Jorge Alf-Torres¹

¹Universidad Nacional de Colombia, ²Universidad de Melbourne, ³Universidad Militar Nueva Granada

dchaparro@student.unimelb.edu.au

Palabras Clave: Alzhéimer, estrés oxidativo, iones metálicos, DFT.

Introducción: El alzhéimer es una enfermedad multifactorial caracterizada por la formación de placas seniles, el estrés oxidativo y la desregulación de iones metálicos a nivel cerebral^{1,2}. En este trabajo se evaluaron 50 ligandos tipo salen y sus respectivos complejos de cobre(I/II) para determinar los mejores candidatos a fármaco.

Métodos: Mediante herramientas bioinformáticas y de estructura electrónica al nivel de teoría DFT/M062X, se estudiaron los ligandos y sus complejos de cobre(I/II) de acuerdo con: **1)** cumplimiento de las reglas de cinco de Lipinski, **2)** permeación de la barrera hematoencefálica, **3)** potencial estándar de reducción, y **4)** afinidad por los iones de cobre.

Resultados y conclusiones: Los resultados obtenidos muestran que la mayor parte de moléculas tendría una correcta absorción y estabilidad mediante administración oral bajo las reglas de cinco de Lipinski, y su permeación de la barrera hematoencefálica calculada se encuentra en una zona de buena permeabilidad con un Log BB > -1,0.³ Respecto a las afinidades por los iones de cobre, se obtuvo que la mayor parte de ligandos tienen una afinidad que supera a aquella del péptido β-amiloide: 10⁶, por lo que se puede establecer una competencia por el metal y formar los complejos respectivos. Los potenciales estándar de reducción calculados muestran que un grupo de derivados de la N,N'-bis(1-(piridin-2-il)metanimina) tienen la capacidad de actuar como agentes antioxidantes ya que tienen valores de potencial estándar de reducción superiores al del par O₂/H₂O₂ en condiciones fisiológicas (0,30 V). Por otro lado, las estructuras sustituidas con halógenos se sitúan como los mejores candidatos a ligandos redistribuidores para los iones de cobre.

Referencias:

1. Adlard, P. A.; Bush, A. I. Metals and Alzheimer's Disease: How Far Have We Come in the Clinic? *J. Alzheimer's Dis.* **2018**, 62 (3), 1369–1379.
2. Alf-Torres, J.; Mirats, A.; Maréchal, J. D.; Rodríguez-Santiago, L.; Sodupe, M. 3D Structures and Redox Potentials of Cu²⁺-Aβ(1-16) Complexes at Different PH: A Computational Study. *J. Phys. Chem. B* **2014**, 118 (18), 4840–4850.
3. Abraham, M. H.; Takács-Novák, K.; Mitchell, R. C. On the Partition of Ampholytes: Application to Blood–Brain Distribution. *J. Pharm. Sci.* **1997**, 86 (3), 310–315.

Xiao, Z.; Wedd, A. G. The Challenges of Determining Metal–Protein Affinities. *Nat. Prod. Rep.* **2010**, 27 (5), 768.



SPAE

II SIMPOSIO PANAMERICANO DE
ACEITES ESENCIALES



VOLUMEN II



Índice de Trabajos

Plenarias XVIII COLACRO

PCC01

Modern strategies of analysis of the volatile fraction and sensory evaluation: a successful complementary combination for food characterization and control.

Dr Carlo Bicchi

PCC02

Recent advances in nano liquid chromatography coupled to mass spectrometry.

Dr. Fernando Lanças

PCC03

Biorefinery of food by-products with health properties: moving towards SDGs.

Dra. Elena Ibañez

PCC04

Neuroprotective activity of bioactive compounds from food by-products, plants and microalgae: A comprehensive study.

Dr. Alejandro Cifuentes

PCC05

Novel implementations of GCxGC The Power and the Passion.

Dr. Philip Marriott

PCC06

Advances in Ionic Liquid-Based Stationary Phases and Sorbent Materials for Chromatography and Sample Preparation

Dr. Jared Anderson

PCC07

Social problems and chromatographic science: separation that unites.

Dra. Elena Stashenko

PCC08

Comprehensive two-dimensional liquid chromatography coupled to mass spectrometry for unravelling of complex natural products.

Dra. Paola Dugo

Plenarias II SPAE

PSP01

Valor agregado y mercado de aceites esenciales.

Dr. Arnaldo Bandoni

PSP02

The chemistry of the Brazilian pitch (breu) resins: Chemistry in the light of thnopharmacology.

Dra. Suzana Leitao

PSP03



The genus Baccharis: a diversified factory of volatile compounds.

Dr. Eduardo Dellacassa

PSP04

The genus Baccharis: a diversified factory of volatile compounds Plant Volatiles: From Emission to Perception.

Dra. Natalia Dudareva

PSP05

Exploring the potential of ionic liquids as gas chromatographic stationary phases for the analysis of essential oils.

Dra. Cecilia Cagliero

PSP06

Olfato con sentido – Un enfoque bioquímico de la percepción de olores.

Dr. Rodrigo Torres

PSP07

Sample Preparation: the excluded essential in Green Analytical Chemistry.

Dra. Elia Psillakis

PSP08

Influencia del método de extracción en el análisis del aroma de alimentos.

Dra. Coralia Osorio

PSP09

Study of aromatic plants and essential oils in Colombia: from laboratory to field production

Dra. Elena Stashenko

Plenarias IV C2B2

PCB01

Fungal growth and mycotoxin production in Capsicum pepper and in its derivatives: impact on human health

Dr. Cledir Santos

PCB02

LEGO-based Generalized Set of Fuzzy Geometrical (3D) Protein Descriptors: Theory, Applications and Comparison with other Approaches.

Dr. Cledir Santos

PCB03

Machine Learning Artificial Intelligence and RNA

Dr. Michael Gribskov

PCB04

Transcriptome assembly from short-read RNA-Seq in non-model organisms

Dr. Sergio Marchant



PCB05

Evolución experimental de secuencias aleatorias en E. coli para entender como nacen los genes

Dr. Rafik Neme

PCB06

Proteómica de Fitofarmacos

Dr. Italo Cesari

PCB07

Estrategias de mitigación en la acumulación de cadmio en sistemas productivos de cacao

Dra. Esperanza Torres

PCB08

The role of technology transfer in product development and innovation

Dra. Natasha Skoko

PCB09

The role of technology transfer in product development and innovation

Dra. Natasha Skoko

Comunicaciones Orales XVIII COLACRO

ILRCO-139

Fungal Volatile Organic Compounds of Trichoderma spp.: A novel biocontrol strategy against Trialeurodes vaporariorum and Fusarium oxysporum f. sp. lycopersici in tomato plants.

Sandra Ramírez, Diana Sinuco, Sandra Aragón.

ILRCO-167

Self-nanoemulsifying drug delivery system (snedds) of Passiflora ligularis leaves extract: development and hypoglycemic effect

Sandra Milena Echeverry González, Diana Marcela Aragón Novoa.

ILRCO-514

Development and validation of UHPLC-UV bioanalytical method for plasma determination of rutin and its major metabolites: application to pharmacokinetic study after administration of Physalis peruviana calyces extract in rats

Gina Paola Domínguez Moré, María Isabel Cardona, Paula Michelle Sepúlveda, Sandra Milena Echeverry, Cláudia Maria Oliveira Simões, Diana Marcela Aragón.

ILRCO-705

Open tubular liquid chromatography in 25 um i.d PS-DVB column directly coupled to electron ionization mass spectrometry (OT-LC-EI-MS)

Deyber Arley Vargas Medinaa, Juliana Soares da Silva Buratoa, João Victor Basolli Borsattoa, Fernando Mauro Lançasa.

ILRCO-710

A simple method for simultaneous analysis of cannabinoids, including THC metabolites in human urine by packed in-tube SPME-LC-MS/MS

Douglas Morisue Sartore, Álvaro José dos Santos-Neto.



SLRCO-6

Clasificación de semillas de Cacao (*Theobroma cacao* L.) de un banco de germoplasma ubicado en Campoalegre-Huila (Colombia), usando análisis quimiométrico con enfoque multivariado.

Jennifer Tatiana Cruz Bolívar, Wilson Rodríguez Pérez, Juan Carlos Suárez Salazar, Claudia Mercedes Ordoñez Espinosa.

SLRCO-28

Desarrollo, validación y aplicación de un método analítico para la cuantificación de contaminantes emergentes en bagre rayado *Pseudoplatystoma magdaleniatum*, por QUECHERS UPLC – MS / MS.

Sara E. Gallego-Ríos, Sylvia M. Cacua O., Natalia Zapata G., Gustavo A. Peñuela

SLRCO-78

Implementación de una metodología analítica basada en la Espectroscopia de Infrarrojo por Transformada de Fourier (FTIR) para el análisis de insaturación de ácidos grasos en semillas de cacao comercial.

Cruz J. T., Carvajal J. S. Rodríguez W. Aparez J. Arango R. A.

SLRCO-131

Estudio de nuevas lectinas del veneno del pez león, *Pterois volitans* de la costa de Santa Marta, Colombia

Ángel Pérez Bravo, Edgar Reyes Montaña, Gerardo Corzo Burguete, Nohora Vega Castro.

SLRCO-141

Aplicación de la técnica extracción por dispersión de matriz en fase sólida para la determinación de pesticidas en sedimentos por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas tándem, GC-MS/MS.

Elizabeth González M., Nelson O. Vargas M., Yolanda González H.

SLRCO-142

Validación de la metodología de análisis para la cuantificación del contenido de TFA residual por HPLC-DAD en un lote del péptido polivalente LfcinB (20-25)₄, candidato a fármaco para el tratamiento del cáncer de mama

Kevin Huertas, Diego Insuasty, Karla Rodríguez, Darcy Junca, María Moreno, Ivonne González, Javier García, Zuly Rivera.

SLRCO-174

Clasificación de semillas de Cacao (*Theobroma cacao* L.) de un banco de germoplasma ubicado en Campoalegre-Huila (Colombia), usando análisis quimiométrico con enfoque multivariado.

Jennifer Cruz, Wilson Rodriguez, Juan Carlos Suarez, Claudia Ordoñez.

SLRCO-175

Determinación de trihalometanos y ácidos haloacéticos en agua de piscina por Cromatografía de Gases- μ ECD.

Olga Vallejo-Vargas, William Hernández-Herrera, Carlos Montoya-Navarrete, Leonardo Beltrán-Angarita.



SLRSCO-193

Desarrollo y validación de un método para la cuantificación de ácidos grasos (FAMES) en productos alimenticios por la técnica de Cromatografía de Gases

Vanessa Katterine Fierro Moreno, Diego Ahumada, Laura Morales, Ivonne Gonzáles, Diana Cristina Sinuco.

SLRSCO-206

Desarrollo y validación de una metodología para la determinación de metilmercurio (MeHg) en pescado mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GCMS)

Diego Alexander Garzón Zuluaga, Diego Alejandro Ahumada Forigua, Elianna Castillo Serna.

SLRSCO-208

Determinación de los coeficientes de partición de cannabinoides principales en diferentes sistemas de solventes usados en Cromatografía De Partición Centrifugal (CPC)

Ada Gallo, Luis Buelvas.

SLRSCO-223

Monitoreo de hidrocarburos aromáticos policíclicos en el Parque Nacional Natural los Nevados mediante muestreadores pasivos y líquenes como bioindicadores de la calidad del aire en lugares remotos de gran altitud

Milton Rosero Moreano, Gustavo Sánchez Duque, Beatriz Aristizabal Zuluaga, Daniel Toro Castaño, Marco Tadeu Grassi.

SLRSCO-268

Evaluación del efecto benéfico de Berberis microphylla G.Forst (Calafate) utilizando un modelo murino de dieta alta grasas y una estrategia analítica metabolómica basada en UHPLC-QTOF

Lia Olivares-Caro, Daniela Mennickent, Daniela Nova, Claudia Radojkovic, Luis Bustamante, Claudia Mardones.

SLRSCO-286

Caracterización de una infusión de hoja de calafate (B. microphylla) y estudio sobre su potencial uso como alimento funcional

D. Nova, L. Olivares-Caro, A. Vallejos, C. Radojkovic, L. Bustamante, C. Mardones.

SLRSCO-287

MEPS directly coupled to ESI-QqTOF-MS for the simultaneous analysis of tricyclic antidepressants and benzodiazepines in postmortem blood

Carmina Vejar-Vivar, Luis Bustamante, Christian Ortega, Mariela Valenzuela, Claudia Mardones.

SLRSCO-303

Identificación por GC/MS de metabolitos secundarios volátiles, aislados de la especie Steiractinia aspera Cuatrec, por técnicas destilativas.

L. Gamboa, J. Martínez, L. Espinoza, E. Stashenko.

SLRSCO-334

Análisis del contenido metabólico de los aceites esenciales de Renealmia cernua (Zingiberaceae) colectada en la región quindío, obtenidos con y sin tratamiento previo con ultrasonido.

Eunice Ríos V., Dahiana Peñuela, José Leonardo Cano.



SLRCO-344

Herramienta para la detección de biomarcadores volátiles en muestras biológicas para la detección de estados fisiológicos, patológicos, y de intoxicación.

Gonzalo Taborda Ocampo.

SLRCO-528

IDENTIFICACIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE ‘CANDIDATUS PHYTOPLASMA ASTERIS’ Y ‘CANDIDATUS PHYTOPLASMA FRAXINI’ EN EXITIANUS ATRATUS (HEMIPTERA: CICADELLIDAE) MEDIANTE QPCR Y QPCR MULTIPLEX

Anny Gálvez, Julian Lamilla, Liliana Franco-Lara.

COMUNICACIONES ORALES II SPAE

ILQAE-295

VALORIZING ESSENTIAL OILS AND THEIR BY-PRODUCTS: LIPPIA ORIGANOIDES CASE STUDY

Julián Arias-Velandia, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

ILQAE-334

NEW TRENDS IN THE VALORISATION OF SCHINUS MOLLE FRUIT AS A SOURCE OF FLAVOURS IN FOODS

D. Giuffrida, N. Martínez, Y. Arrieta-Garay, L. Fariña, E. Boido, E. Dellacassa.

SLQAE-103

DISEÑO Y OBTENCIÓN DE ALCALOIDEOS DE AMARYLLIDACEAE CON ACTIVIDAD ANTIVIRAL FRENTE A DENGUE Y ZIKA.

Juan Camilo Aquite Londoño, María Francisca Villegas-Torres, Álvaro Barrera Ocampo, Paola A. Caicedo B, Andrés Gonzales.

SLQAE-105

USO DEL ACEITE ESENCIAL DEL MATARRATÓN (GLINICIDIA SEPIUM) COMO INSECTICIDA EN EL CONTROL BIOLÓGICO DE CACAO (THEOBROMA CACAO L.) FRENTE A BARRENADOR (CARMENTA FORAMINIS).

Laura Sofia Ramirez Wilches, Krislayner Lozano Taboada, Rafael José Tapia Piñeres

SLQAE-302

EFFECTO DE LAS CONDICIONES DE DESTILACIÓN POR ARRASTRE CON VAPOR SOBRE EL RENDIMIENTO Y LA COMPOSICIÓN DEL ACEITE ESENCIAL DE LIPPIA ORIGANOIDES (VERBENACEAE)

Karen J. Ramírez, Arlex Chaves, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-303

ESTUDIO DEL ACEITE ESENCIAL OBTENIDO DE PARTES AÉREAS DE OCIMUM CAMPECHIANUM CULTIVADA EN COLOMBIA.

Josafat Tarazona, Cristian A. Oliveros, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-304

RENDIMIENTO Y COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE PACHULÍ, SEGÚN LA PARTE DE LA PLANTA, HIDRÓLISIS ÁCIDA Y TIEMPO DE DESTILACIÓN

Cristian A. Oliveros, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.



SLQAE-305

EFFECTO DE LAS CONDICIONES DE DESTILACIÓN SOBRE EL RENDIMIENTO Y COMPOSICIÓN QUÍMICA DE ACEITES ESENCIALES PRODUCIDOS EN COLOMBIA.

Diego Camilo Durán García, Sandra Pérez Angulo, Carlos Suárez, Jhonnathan Machado, Jairo René Martíne, Elena E. Stashenko.

SLQAE-306

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA POR GC/MS DE ACEITES ESENCIALES DE *Achyrocline Satureioides* Y *Achyrocline Bogotensis*, RECOLECTADAS EN SANTANDER, COLOMBIA

Sheylla T. Reyes, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko, Robert T. González M.

SLQAE-307

COMPOSICIÓN QUÍMICA Y DESTILACIÓN FRACCIONADA A PRESIÓN REDUCIDA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Cymbopogon Nardus*.

Johanna C. Rosero, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-308

ESTUDIO DE ESTABILIDAD Y PROPIEDADES ANTIOXIDANTES DE UNA MICROEMULSIÓN QUE INCORPORA EXTRACTO DE PSIDIUM SARTURIANUM Y ACEITE ESENCIAL DE *Piper Marginatum*

Juan Camilo Henríquez Sanabria, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-312

ANÁLISIS DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA POR GC/FID Y GC/MS DEL ACEITE ESENCIAL DE *Varronia Curassavica* JACQ. CULTIVADA EN COLOMBIA

Laisha Burgos-Díaz, Jairo René Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-322

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DE ACEITES ESENCIALES Y EXTRACTOS HIDROETANÓLICOS OBTENIDOS A PARTIR DE BIOMASA RESIDUAL POST DESTILACIÓN DE *TURNERA DIFFUSA*, COLECTADA EN SANTANDER, COLOMBIA

Félix C. Muñoz, Sheylla T. Reyes, Karen J. Ramírez, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-324

DESTILACIÓN FRACCIONADA DE ACEITE ESENCIAL DE *CYBOPOGON NARDUS* Y DE SU PRODUCTO DE TRANSFORMACIÓN POR REACCIÓN DE PRINS A ESCALA LABORATORIO

Nelson G. Martínez Avellaneda, Aída L. Villa, Edwin A. Alarcón, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.



SLQAE-334

ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y COMPOSICIÓN QUÍMICA DE ACEITES ESENCIALES DE PLANTAS DEL GÉNERO Piper, RECOLECTADAS EN EL DEPARTAMENTO DE SANTANDER - COLOMBIA.

Rogelio Alejandro Saavedra Barrera, Juan Camilo Henríquez, Sheylla Reyes, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLREX-57

USO DE ACEITES ESENCIALES DE ORIGEN VEGETAL COMO SOLVENTES PARA EXTRACCIÓN DE CANNABIS.

Dario Aguilera, Jesús Acedo, Gustavo García.

COMUNICACIONES ORALES IV C2B2

SALUD HUMANA & ANIMAL

SLMC2-34

Evaluación in vitro de la actividad citotóxica de extractos de Malachra alceifolia, Cordia dentata Poir y Heliotropium indicum Linn sobre la línea celular de osteosarcoma canino OSCA-8

Nelitza Linárez Álvarez, Karen Reyes Álvarez, Erika Lozano Aguilar, Harold Gómez Estrada, Orlando Torres, Ana Muñoz.

SLMC2-49

Efecto de IGF2 sobre el panorama de metilación del DNA y la expresión de mRNA en la línea celular HTR-8/SVneo

David Alejandro López González, Yadi Adriana Umaña Pérez.

SLMC2-63

Biomateriales de fibroína de seda con potencial aplicación en ingeniería de tejidos

Augusto Zuluaga, Carlos Toro, John Jairo Melchor, Iván Alberto Lopera, Lina M. Orozco, Juan Carlos Sepúlveda-Arias.

SLMC2-156

Extractos de Passiflora edulis f. edulis sims inducen neuroprotección, plasticidad neuronal y sinergizan con la quimioterapia en un modelo in vitro

Sonia Luz Albarracín Cordero, Oscar Fernando Sánchez Médina, Jose Maria Velasco España, Andrea Viviana Rodríguez, Laura Rojas Fonseca, Geison M. Costa, Jhon Jairo Sutachan Rubio.

SLMC2-161

Efecto del fibrinógeno gamma prima sobre la estructura de la fibrina formada sobre las células HMEC -1 y la secreción de elementos fibrinolíticos

Miriam Cantero, Héctor Rojas, Eduardo Anglés-Cano, Rita Marchi, Yuri Pardo.

SLMC2-190

Factores asociados a la radio y quimiorresistencia en cáncer de cuello uterino

Nelsy Alexandra Ramírez Beltrán, Ruth Elizabeth Garzón Fernández, Vanezza Paola Loret Velazquez.



SLMC2-194

IGF2 e IGF-1R modulan la expresión de factores de pluripotencia generada como respuesta a la privación de suero en HTR-8/SVneo

Oscar Mauricio Ramírez Ambrosio, Adriana Umaña Pérez.

SLMC2-199

Antimicrobianos al límite máximo de residuos y su efecto sobre proteínas del músculo animal

Erika Rodríguez-Cavallo, Johana Márquez-Lázaro, Darío Méndez-Cuadro.

SLMC2-262

Caseínas carboniladas por residuos de antibióticos y pesticidas incrementan su alergenicidad in vitro e in vivo.

Albeiro Marrugo Padilla, Gastón Rizzo, Paola L. Smaldini, Julián Vaccaro, Darío Méndez Cuadro, Erika Rodríguez Cavallo,Guillermo H. Docena.

SLMC2-392

Ensayo de aptitud para la detección de SARS-CoV-2

Sergio Luis Dávila González, John Emerson Leguizamon Guerrero, Maria Mercedes Arias Cortés, Andres Felipe Leon Torres, Esther Cristina Barros Lina, Sergio Yebrail Gomez Rangel.

SLMC2-589

Interferencia de algunos detergentes en la inmunodetección del marcador exosomal CD81 en el secretoma de células de melanoma A375

S. Susana Novoa-Herrán, Luis Alberto Gómez-Grossoa.

SLMC2-629

Alternativa para la detección de SARS-CoV-2 por RT-qPCR acoplada a SYBR Green

Valentina Guevara, Andrea Carolina Barragán-Cárdenas, David Alejandro López-González, Andrés Correa-Sánchez, Sebastián Arcila-Barrera, Mauricio Urquiza, Adriana Umaña-Perez

SLMC2-698

Ditiocarbamatos Como Antitumorales Basados En Efecto Warburg

Viola-Rhenals M

VEGETAL & AGRICULTURA

ILNC2-129

Hytoalexins-like phenalenones detected in apoplastic stem secretome of carnation (*Dianthus caryophyllus* L) during interaction with *Fusarium oxysporum* f. sp. *dianthi*

Martínez-González Ana Patricia, Coy-Barrera Ericsson David, and Ardila Barrantes Harold Duban.

SLNC2-24

Citotoxicidad en fibroblastos humanos de extractos y compuestos de plantas con potencial uso en cosmética.

Silvia Juliana Flórez González, Elena E. Stashenko, Raquel Elvira Ocazonez, Jorge Luis Fuentes Lorenzo.



SLNC2-43

Actividad antimicrobiana de los extractos totales de *Cecropia mutisiana* Mildbr. sobre microorganismos cariogénicos

Luis G. Sequeda-Castañeda, Laura P. Rocha-Figueroa, Jennifer Blandón-Pardo, Javier A. Matulevich-Peláez, William F. Castrillón-Cardona, Crispín A. Célis-Zambrano.

SLNC2-181

Análisis metabolómico de plantas de aguacate Hass inoculadas con *Phytophthora cinnamomi*

Nathalie Guarnizo, Andree Álvarez, Diego Oliveros, María Bianney Bermúdez-Cardona, Jordi Eras, Walter Murillo Arango.

SLNC2-190

Efecto de la concentración de tiamina en la inducción de resistencia contra el marchitamiento vascular causado por *Fusarium* en clavel

Pérez Mora. W. Melgarejo. L.M. & Ardila, H.

SLNC2-258

Actividad Antimicrobiana de Extractos etanólicos de cuatro plantas nativas de uno de los ambientes extremófilos de Chile: El Desierto de Atacama

Dioni Arrieche Polanco, Lautaro Tabora Morales, Hector Carrasco, Paula Santana, Javier Pardo.

SLNC2-277

Estandarización y establecimiento de la transformación mediada por *Agrobacterium* en cultivos embriogénicos de la especie *Theobroma cacao* L, para estudios de expresión génica.

Laura Michell Carmona Rojas,* Aura Inés Urrea Trujillo, Juan Felipe Tamayo, Maria Isabel Quintero.

SLNC2-342

Efecto de la elicitación en la transcripción de algunos genes de defensa durante la interacción del clavel (*Dianthus caryophyllus* L) con el patógeno *Fusarium oxysporum* f.sp *dianthi*.

Santiago Monroy-Mena, Harold Duban Ardila-Barrantes, Andrés Mauricio Pinzón-Velasco.

CIENCIAS ÓMICAS & BIOINFORMÁTICA

ILEC2-633

Rational design of peptides derived from human ACE2 protein with high binding affinity for SARS-CoV-2 spike protein using computational methods.

Mauricio Urquiza Martinez, Cristian Nicolas Patiño Gomez, Paula Andrea Vargas Pinilla, Valentina Martinez Motta, Diana Sofía Chaves Riascos, Maria Fernanda Peralta Morales, Derly Johana Diaz Ruiz.

ILOC2-188

Proteomic profile of the edible mushroom *Lentinula edodes* cultured by liquid state fermentation in two different broths

Carolina Vega-Oliveros, Carolina Chegwin-Angarita, Harold D. Ardila, Maria Angeles Castillejo, Jesús V. Jorrín-Novo.



SLOC2-191

Anotación de metabolitos y péptidos en cacao mediante metodología automatizada usando fragmentación in silico

Martha Zuluaga, Margareth Santander, Fabrice Vaillant, Sebastian Escobar.

SLOC2-233

Modelamiento y docking molecular de péptidos derivados de toxinas de escorpión Tityus macrochirus (BUTHIDAE), con alta afinidad frente al receptor canal voltaje dependiente de potasio kv10.1

Mauricio Gantiva, Edgar Antonio Reyes Montaña, Nohora Angelica Vega Castro

SLOC2-371

Análisis in silico de derivados de Floretina, Cumato y Vanilato para suprimir expresión génica en Drosophilla melanogaster modificadas genéticamente

Juan Nicolás Fuentes, María Lucía Otero, Luis Carlos Vesga, Stelia Carolina Méndez Sánchez.

SLOC2-385

Estudio in silico de compuestos volátiles de plantas medicinales del pacifico colombiano contra proteínas de SARS-CoV-2.

Neyder Contreras-Puentes, Manuel Salas-Moreno, Lina Mosquera Chavera, Leonomir Córdoba-Tovar, Antistio Alviz-Amador.

MICROORGANISMOS & BIOTECNOLOGÍA

SLPC2-11

Bioenergética mitocondrial en estadíos juveniles y adulto de Aedes aegypti (Diptera: Culicidae)

Ruth Castillo, Diana Urbina, Jonny Edward Duque, Stelia Carolina Méndez-Sánchez.

SLPC2-15

Conceptual design methodology for food with Lentinula edodes mycelia: advances and perspectives

Carolina Vega-Oliveros, Fabian Rico, Harold D. Ardila, Carolina Chegwin-Angarita.

SLPC2-16

Herramientas de la biotecnología blanca aplicadas a la obtención de oleoquímicos como fuente de energía y como nutracéuticos.

César Godoy Vargas, Esteban Toro Alzate, César Carrasco López.

SLPC2-17

Chlamydomonas reinhardtii, un sistema eucariota para la expresión de proteínas recombinantes

Sharon Eliana Villamil-Silva,*María Helena Ramírez-Hernández.

SLPC2-236

Preparación de liposomas enriquecidos con curcumina y aceite esencial de Lippia origanoides y evaluación de su actividad antimicrobiana y citotóxica in vitro.

Juan Pablo Bedoya Agudelo, Edwin Stiven Quiguanás Guarín, Camilo Andrés Agudelo Marín, Leonardo Padilla Sanabria, Néstor Iván Cardona Perez, Jhon Carlos Castaño Osorio.



SLPC2-249

Efecto de la tiamina sobre el crecimiento micelial y los niveles transcripcionales de los genes *sod1* y *sed4* en *Fusarium oxysporum* f. sp. *dianthi*.

Fernanda Castiblanco, Harold Ardila.

SLPC2-320

Actividad microbicida de un nanocompuesto de NPIO@SIO₂/AG sintetizado mediante sonoquímica.

Cristian Camilo Ramirez Fosca, Brayan Stick Betin Bohórquez, José Miguel Montero Vásquez, Daniel Llamosa, Javier Rincón, Angélica Murillo.

SLPC2-322

Identificación de la NMNAT de *Trichomonas vaginalis* – Una enzima esencial en el metabolismo energético

Leidy Constanza Villalobos Gonzalez, Luis Ernesto Contreras, Maria Helena Hernandez Ramirez.

SLPC2-326

Identificación de dos transportadores de NAD⁺ en *Trypanosoma cruzi* (TCNDT1 Y TCNDT2) mediante ensayos de complementación en *Saccharomyces cerevisiae*

Miguel Esteban Chacón Gómez, Maria Helena Ramirez Hernandez.

SLPC2-342

Expresión y purificación de la proteína recombinante de la Nucleocápside (N) perteneciente al coronavirus SARS-CoV-2 para su evaluación e implementación como antígeno en pruebas serológicas de detección del virus SARS-CoV-2

Paula Andrea Pedroza, Isaura Patricia Torres, Óscar Mauricio Gómez, Rubén Manrique, Juan Esteban Gallo.

SLPC2-350

Elicitación de metabolitos secundarios en células de *Thevetia peruviana* libres e inmovilizadas: efecto en la producción de biomasa, glucósidos cardiotónicos y flavonoides

Dary Mendoza, Olmedo Cuaspad, Juan Pablo Arias, Mario Arias.

COMUNICACIONES ORAL PÓSTER IV C2B2

SLPC2-26

Una Variante Enzimática Del Ensayo Cometa Para La Evaluación Genotóxica En Fibroblastos Humanos Sobre Una Plataforma De Microplacas

Silvia Juliana Flórez González, Raquel Elvira Ocazonez, Jorge Luis Fuentes Lorenzo

COMUNICACIONES PÓSTER XVIII COLACRO

ILRCO-435

DETERMINATION AND EVALUATION OF POLYCHLORINATED BIPHENYLS AND AROMATIC POLYCYCLIC HYDROCARBONS IN SOILS FROM VALENCIA (SPAIN)

Rafael Boluda, Miguel Gamón.



ILRCO-589

Separación Multidimensional de Hidrocarburos Saturados, mono, di, tri, tetra, penta-aromáticos y polares por HPLC-Semipreparativo con DAD y colector de fracciones.

Jesús Acedo, Laura Cristina Aguilar Casas, Darwin Edgardo Velandia, Diego Leonardo Blanco Arena, Esperanza Torres Bautista.

ILRCO-707

FATTY ACIDS IN EXTRA VIRGIN OLIVES COMMERCIALIZED IN THE TRIPLE BONDARY (BRAZIL, PARAGUAY AND ARGENTINA)

Leticia M. S. Santos, Martha B. R. Cabrera, Aline T. Toci, Marcelo N. Kapp, Marcela Boroski

ILRCO-709

CAPILLARY LC COLUMN PACKED WITH GRAPHENE OXIDE-C18 FUNCTIONALIZED FOR SEPARATING HORMONES FROM URINE SAMPLES

Edvaldo V. S. Maciel, João V. B. Borsatto, Fernando Mauro Lanças.

ILRCO-710

A simple method for simultaneous analysis of cannabinoids, including THC metabolites in human urine by packed in-tube SPME-LC-MS/MS

Douglas Morisue Sartore, Álvaro José dos Santos-Neto

SLRSCO-50

Isolation of polyphenols from Chilean *Cryptocarya alba* (Peumo) fruits using a combination of Sephadex® LH-20 gel permeation and counter-current chromatography (CCC).

Javier Antileo-Laurie^{1,2}, Felipe Jiménez-Aspee³, Marlene Fischer¹, Daniel Mieres-Castro¹, Guillermo Schmeda-Hirschmann¹.

SLR2-729

APLICACIÓN DE HIDROCHAR EN TRATAMIENTO DE AGUAS ÁCIDAS DE MINA PARA REMOCIÓN DE METALES PESADOS

YEIMY FERNANDA HERNÁNDEZ LASSO, JULIANA MARITZA ZARATE JIMENEZ, LUIS FERNANDO LOZANO GOMEZ, MARÍA DEL PILAR TRIVIÑO RESTREPO.

SLRSCO-112

AVANCES EN LA VALIDACIÓN DE UN MÉTODO PARA DETERMINACIÓN CUANTITATIVA DE TERPENOIDES Y CANNABINOIDES EN MATERIAL VEGETAL DE CANNABIS SP POR CROMATOGRAFÍA DE GASES ACOPLADA A ESPECTROMETRÍA DE MASAS.

Tania Lorena Montaña Sánchez.

SLRSCO-413

Determinación de Compuestos Traza en Ron Mediante Extracción con Solvente y Cromatografía de Gases-Masas

Liliana Moncayo Martínez, Victoria Recalde, Milton Rosero Moreano, Gonzalo Taborda Ocampo.

SLRSCO-422

DETERMINACIÓN DE RESIDUOS DE FÁRMACOS ANTI-INFLAMATORIOS Y SUS METABOLITOS POR LC/MS EN PLANTAS ACUÁTICAS

Andrés F. González, Stefhanny C. Luna, Óscar E. Osorio, Jairo R. Martínez, Elena Stashenko



SLRCO-431

IMPLEMENTACIÓN DE LA TÉCNICA DE EXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA PARA EL ANÁLISIS DE FÁRMACOS ANTIINFLAMATORIOS EN MATRICES ACUOSAS

Stefhanny C. Luna, Andrés F. González, Oscar E. Osorio, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLRCO-475

PERFIL CROMATOGRÁFICO DE ACEITES ESENCIALES DE ESPECIES DE LOS GÉNEROS *Zanthoxylum* Y *Amirys*

Marcial Fuentes Estrada^{1, 4}, Andrea Jimenez-González², Elena Stashenko³, Olimpo García Beltrán⁴.

SLRCO-512

Selección de un método de extracción para obtener ácido abscísico de semillas de *Zea mays*

Juan David Rivera, Diana Marcela Ocampo, Javier Torres, Juan Pablo Penagos, Raúl Andrés Martínez.

SLRCO-582

METODOLOGÍA ANALÍTICA PARA LA DETERMINACIÓN DE GLIFOSATO (GLY) Y ÁCIDO AMINOMETILFOSFÓNICO (AMPA) POR UHPLC-MS-IT EMPLEANDO EL MODO SRM (SELECTED REACTION MONITORING)

María Alejandra Sarasty Pabon, Germán Cuervo Ochoa, Tania Milena Gutiérrez Valencia.

SLRCO-602

DESARROLLO Y VALIDACION DE UN METODO POR HPLC/DAD PARA LA CUANTIFICACION DE CANNABINOIDES EN ACEITE DE CANNABIS SATIVA

Raslan-Jaramillo J., De Diego, M. Avello, M, Ríos, G

SLRCO-664

Optimización de un método para solventes residuales en productos de Cannabis por HS-GC/MSD

Laura Geraldine Benavides Garzón, Jesús Enrique Acedo Albero.

SLRCO-674

Extracción simultánea y determinación cromatográfica de compuestos fenólicos y terpenoides de *M. spicata*: Contribución al uso de una química total de interés

Karina Sierra, Edison Osorio, Luis Carlos Carillo.

SLRCO-680

EFECTO DE CLONES Y ÁREAS DE CULTIVO SOBRE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA POLIFENÓLICA DE GRANOS DE CACAO: UN ENFOQUE QUIMIOMÉTRICO PARA LA SELECCIÓN Y DESARROLLO DE MATRICES ALIMENTARIAS RICAS EN FLAVONOIDES

Susana Muñoz Acevedo, Catalina Agudelo Ramírez, Luis Carlos Carrillo Hormaza, Álvaro José García Ortega, Edison Javier Osorio Durango, Elkin Galeano Jaramillo.

SLRCO-688

REDES MOLECULARES COMO PREDICTORES DE LA DIVERSIDAD QUÍMICA Y RESPUESTA A FITOPATÓGENOS DE ESPECIES ARBÓREAS PRESENTES EN REMANENTES DE BOSQUES ANDINOS

Juan Pablo Naranjo, Tatiana Lobo-Echeverri, Brian E. Sedio.



SLRSCO-708

Caracterización química de alcaloides de Amaryllidaceae aislados de *Crinum jagus*
Arango-Velásquez, N., Trujillo-Chacón, LM., Osorio, E.

SLRSCO-718

Métodos *in vivo* abren nuevas posibilidades para acceder a la quimiodiversidad única que se encuentra en las ranas de la superfamilia Dendrobatoidea
Mabel Gonzalez, Alexander Asenov, Pieter Dorrestein, Chiara Carazzone.

SLRSCO-727

Aislamiento de Mamea B/BA Ciclo D a partir del Extracto Etanólico Bioactivo de las Semillas de *Mamea americana* L.
Jadys Stella Mulett Vidal, Andres Felipe Oliveros Diaz, Fredyc Diaz Castillo, Gina Pajaron Gonzalez, Winston Quiñones, Julian Cabrera.

SLRSCO-730

Identificación de compuestos fenólicos y actividad tripanocida de un extracto etanólico obtenido de las hojas de *Castanedia santamartensis* (Asteraceae)
Quintero H., Veas R., Lapier M., Carrillo I., González-Herrera F., Carbonó-Delahoz, E., Quintero-Pertuz I., Díaz Pongutá B., Olea C., Maya J., Delporte C.

SLRSCO-731

Optimización y validación de un método de derivatización con BF3 / MeONa para el análisis de FAME de *Staphylococcus aureus* por GC-MS
Miguel A. Pinzón-Olarte, Gerson-Dirceu López, Chad Leidy, Chiara Carazzone.

SLRSCO-987

INTERNAL STANDARD FOR HMF MONITORING IN HONEY
Cristian A. Godoy, Marcela Borosk

COMUNICACIONES PÓSTER II SPAE

SLQAE-2

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DE ACEITES ESENCIALES Y EXTRACTOS HIDROETANÓLICOS OBTENIDOS A PARTIR DE BIOMASA RESIDUAL POST DESTILACIÓN DE *Turnera diffusa*, COLECTADA EN SANTANDER, COLOMBIA
Félix C. Muñoz, Sheylla T. Reyes, Karen J. Ramírez, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-5

ANÁLISIS DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA POR GC/MS DE ACEITES ESENCIALES DE *Turnera pumilea* Y *Chromolaena moritziana*, RECOLECTADAS EN SANTANDER, COLOMBIA
Sheylla T. Reyes, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-25

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *PLECTRANTHUS AMBOINICUS*, UN PRODUCTO FORESTAL NO MADERABLE CULTIVADO EN LA SELVA PLUVIAL CENTRAL DEL CHOCÓ, COLOMBIA
Nayive Pino.



SLQAE-32

OBTENCIÓN Y FRACCIONAMIENTO DEL ACEITE ESENCIAL DE *Cymbopogon nardus* (POACEAE) MEDIANTE DESTILACIÓN POR ARRASTRE CON VAPOR

Karen J. Ramírez, Diego C. Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-39

DETERMINACIÓN DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Leonurus japonicus* RECOLECTADA EN SANTANDER, COLOMBIA

Steffhanny Luna, Sheylla Reyes, Cristian Oliveros, Robert González, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-78

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA POR GC/MS DEL ACEITE ESENCIAL DE *Lippia hirsuta* L. F.

Laisha Burgos-Díaz, Cristian Oliveros, Sheylla Reyes, Camilo Durán, Jairo René Martínez, Elena E. Stashenko y Robert González Mina.

SLQAE-79

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA POR GC/MS DEL ACEITE ESENCIAL DE *Ambrosia cumanensis* Kunth, RECOLECTADA EN SANTANDER, COLOMBIA

Félix C. Muñoz, Sheylla T. Reyes, Karen J. Ramírez, Johanna C. Rosero, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-91

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA POR GC/MS DEL ACEITE ESENCIAL DE *Lantana canescens* CULTIVADA EN COLOMBIA.

Julián Arias, Karen Ramírez, Cristian Oliveros, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-92

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL Y DEL EXTRACTO HIDROETANÓLICO DE *Salvia aratocensis* (Fam. Lamiaceae)

Lady J. Sierra, Anderson Paipa-Pérez, Yuri Córdoba-Campo, Jairo R. Martínez-Morales, Elena E. Stashenko.

SLQAE-93

COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LOS ACEITES ESENCIALES DE PLANTAS DE *Wedelia calycina*, QUE CRECEN EN SANTANDER, COLOMBIA

Silvia M. Porras, Cristian Oliveros, Sheylla Reyes, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko, Robert T. Gonzáles.

SLQAE-94

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Ambrosia peruviana*, AISLADO POR HIDRODESTILACIÓN ASISTIDA POR RADIACIÓN MICROONDAS

Angie K. Romero, Lady J. Sierra, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-95

ANÁLISIS POR GC/MS DE ACEITES ESENCIALES DE *Piper eriopodon* Y *Piper dilatatifolium*, COLECTADAS EN SANTANDER, COLOMBIA

Nelson G. Martínez-Avellaneda, Angie K. Romero, Lady J. Sierra, Jairo R. Martínez Morales, Elena E. Stashenko.



SLQAE-96

COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Hyptis colombiana* (LAMIACEAE) POR GC/MS

Sheila B. Beltrán, Angie K. Romero, Lady J. Sierra, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-97

ESTUDIO DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LOS ACEITE ESENCIALES DE ESPECIES DE *Hyptis* spp., RECOLECTADAS EN SANTANDER-COLOMBIA.

Cristian A. Oliveros, Diego C. Durán, Robert T. González, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-98

COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LOS ACEITES ESENCIALES DE *Calea peruviana* (ASTERACEAE) y *Lantana aff. colombiana* López-Pal. (VERBENACEAE).

Johanna C. Rosero, Cristian Oliveros, Karen Ramírez, Camilo Durán, Robert T. Gonzáles, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-101

Biocompatibility In Vivo Studies of Chitosan-Rue Essential Oil Biofilms

Carlos David Grande-Tovar, Carlos Humberto Valencia, José Herminsul Mina Hernandez.

SLQAE-102

ESTUDIO DEL ACEITE ESENCIAL OBTENIDO DE *Elaphandra quinquenervis* RECOLECTADA EN SANTANDER, COLOMBIA.

Josafat Tarazona, Cristian Oliveros, Juan Camilo Henríquez, Camilo Durán, Jairo René Martínez, Robert T. González M, Elena E. Stashenko.

SLQAE-280

Caracterización química y actividad antioxidante de los aceites esenciales de *Tagetes filifolia* y su híbrido natural

Juan C. Henríquez, Rober T. Gonzalez, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-386

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA POR GC/MS DE ACEITES ESENCIALES DE *Heterosperma pinnatum* Y *Hypericum* sp., RECOLECTADAS EN SANTANDER, COLOMBIA

Sebastian Ortiz B., Juan C. Henríquez, Sheylla T. Reyes, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko

SLQAE-389

EXTRACCIÓN Y COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL Y DEL EXTRACTO DE *Satureja viminea* (LAMIACEAE).

Sheila B. Beltrán, Diana L. Manrique, Lady J. Sierra, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-398

ESTUDIO DE LA CALIDAD DE ACEITES ESENCIALES AISLADOS DE PLANTAS DEL GÉNERO *Cymbopogon* EN SANTANDER, COLOMBIA

Angie K. Romero, Diego C. Durán, Sandra Pérez, Karen Ramírez, Lady J. Sierra, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.



SLQAE-402

COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Baccharis trinervis*, DE SANTANDER, COLOMBIA.

Javier F. Rojas, Cristian A. Oliveros, Sheylla Reyes, Diego C. Durán, Jairo R. Martínez, Elena. E Stashenko, Robert T. González M.

SLQAE-419

COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Tagetes filifolia*, RECOLECTADA EN SANTANDER, COLOMBIA

David Vega, Cristian Oliveros, Juan C. Henríquez, Camilo Durán, Robert T. González, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-423

COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Ageratina aff. popayanensis*, RECOLECTADA EN SANTANDER, COLOMBIA

María F. Estupiñán, Cristian Oliveros, Sheylla Reyes, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko, Robert T. González M

SLQAE-430

Actividad antifúngica de aceites esenciales sobre el crecimiento de *Botrytis cinerea* ATCC 36634

Jesús D. Rueda-Villabona, Clara I. Sánchez, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-556

COMPOSICIÓN QUÍMICA Y ACTIVIDAD BIOLÓGICA DE ACEITES ESENCIALES Y TERPENOS

Manuela Loaiza Oliva, Carolina Zapata Zapata, Maria Cecilia Martínez Pabón, Elena Stashenko, Ana Cecilia Mesa Arango.

SLQAE-572

COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Tagetes caracasana* CULTIVADA EN SANTANDER, COLOMBIA

Michael Santos, Sandra Pérez, Luis Zaraza, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

SLQAE-574

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *PLECTRANTHUS AMBOINICUS* (LOUR) SPRENG, UN PRODUCTO FORESTAL NO MADERABLE CULTIVADO EN LA SELVA PLUVIAL CENTRAL DEL CHOCÓ, COLOMBIA

Nayive Pino Benítez, Gloria Prado Pino.

SLQAE-605

ENCAPSULACIÓN DE FITOPLAGUICIDAS A BASE EN ACEITES ESENCIALES DE *SATUREJA MONTANA* Y *RUTA GRAVEOLENS* EN MATRICES BIOPOLIMERICA.

DUVAN FERNANDO CASTILLO GOMEZ, MARTHA PAEZ, RUBEN SANCHEZ, KELLY GOMEZ, BRAYAN HENRIQUEZ.

SLQAE-689

APROVECHAMIENTO DE LA ALBAHACA DULCE (*Ocimum basilicum* L. cv. 'Genovese') TIPO EXPORTACIÓN MEDIANTE OBTENCIÓN DE SU ACEITE ESENCIAL A PARTIR DE LA BIOMASA DE DESECHO POSTCOSECHA

Lina M. Valencia, Cristian A. Oliveros, Diego C. Durán, Karen J. Ramírez, Nelson G. Martínez, Jairo R. Martínez, Jairo Guerrero, Elena E. Stashenko.



COMUNICACIONES PÓSTER IV C2B2

CIENCIAS ÓMICAS Y BIOINFORMÁTICA

ILOC2-490

PAN-GENOME AND PHYLOGENOMIC ANALYSES OF THE PRODUCER OF XANTHAN GUM *XANTHOMONAS CAMPESTRIS*.

Alejandra Betancur Sánchez, Carlos Caicedo-Montoya, Rigoberto Ríos-Esteba.

ILOC2-724

MOLECULAR HUMAN TARGETS OF BIOACTIVE ALKALOID-TYPE COMPOUNDS FROM *TABERNAEMONTANA CYMOSE* JACQ.

Andres Felipe Oliveros Díaz, Yina Pájaro González, Jesús Olivero Verbel, Fredyc Díaz Castillo.

SLCO2-579

IDENTIFICACIÓN DE *CHLAMYDIA TRACHOMATIS* SEROVAR L2 EN LA POBLACIÓN DE HSH Y USO POTENCIAL DE PÉPTIDOS ANTIMICROBIANOS CONTRA ESTE PATÓGENO.

Martha Gómez Jiménez, Laura Rubio, Johan Alcántara, Natalia Castellanos, Daniel Galeano, Ruth Mérida Sánchez Mora, Gabriela Arévalo Pinzón.

SLOC2-260

ESTUDIO METABOLÓMICO DE LA REEXPRESIÓN DE INTERFERÓN KAPPA EN CÉLULAS TUMORALES DE CUELLO UTERINO INFECTADAS CON VIRUS DEL PAPILOMA HUMANO

Leidy Tatiana Sierra Guevara, William Fernando Hidalgo Bucheli, Bladimiro Rincon Orozco, Brigitte Ofelia Peña López

SLOC2-407

Estudio filogenético y funcional de la enzima α 1,6 - manosiltransferasa. Nuevos hallazgos.

Johanna Ramírez Pineda, Luis Eduardo Peña, Alexander Rodríguez-Lopez.

SLOC2-417

VALIDACIÓN CUÁNTICA DE RESIDUOS DE AMINOÁCIDOS NO ESTÁNDARES MODIFICADOS POR PRODUCTOS FINALES DE PEROXIDACIÓN LIPÍDICA.

Camila Cabarcas-Herrera, Rafael Pineda-Alemán, Erika Rodríguez-Cavallo, Darío Méndez-Cuadro.

SLOC2-418

Análisis del efecto de variaciones en la longitud de las cadenas carbonadas de glicerofosfolípidos saturados y monoinsaturados sobre el comportamiento elástico y de fase de bicapas lipídicas mediante Dinámica Molecular.

Maria Clara Quintero, Jorge David, Luis A. Gómez.

SLOC2-476

Identificación de genes relacionados con la producción de proteínas alergénicas en aislamientos de *Aspergillus* spp.

Maria Camila Zuleta, Eder Andrés Vélez, Ángela María Lopez, Oscar Mauricio Gómez, Elizabeth Misas Rivas, Liliana Jiménez Zapata, Álvaro León Rúa, Orville Hernández Ruiz.



SLOC2-510

EN BUSCA DE POLI ADP-RIBOSIL POLIMERASAS (PARP) EN *LEISHMANIA* SSP: UN ACERCAMIENTO *IN-SILICO*.

Luis David Ramírez, Luis Ernesto Contreras, María Helena Ramírez.

SLOC2-653

Evidencia de cambios epigenéticos en variantes morfológicas de *Bacillus tequilensis* EA-CB0015.

Camilo García-Botero, Tatiana Z. Cuellar-Gaviria, Valeska Villegas-Escobar.

MICROORGANISMOS Y BIOTECNOLOGÍA

ILPC2-480

GENETICIN RESISTANCE ACQUIRED IN THE HUMAN PATHOGEN *Paracoccidioides* spp. BY MEANS PLASMID pCas9

Susana Torres, Oscar Mauricio Gómez, Angela María Lopez, Diana Patricia Tamayo, Orville Hernández, Juan Gmo McEwen.

SLPC2-30

AISLAMIENTO Y DISCRIMINACIÓN MOLECULAR DE MICROORGANISMOS QUE INDUCEN LA PRECIPITACIÓN DE CARBONATO DE CADMIO DE UNA REGIÓN CACAOTERA DE COLOMBIA.

Juan Camilo Diez Marulanda, Pedro Filipe de Brito Brandão.

SLPC2-397

Acilación enzimática de almidones de arroz usando aceite de semillas de gulupa como donador acilo.

Alvaro Esteban Aldana Porras, Diego Fernando Montoya Yepes, Ángel Arturo Jiménez Rodríguez, Jonh Jairo Méndez Arteaga, Walter Murillo Arango.

SLPC2-525

OPTIMIZACIÓN DEL MÉTODO DE MICRODILUCIÓN EN PLACA PARA EVALUAR LA ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA *IN VITRO* UTILIZANDO MICROVOLÚMENES.

Juliana Franco-Castrillón, Lily Johana Toro Segovia, Diana Carolina Henao, Germán Alberto Téllez, Jhon Carlos Castaño Osorio.

SLPC2-593

LA PROTEÍNA DEL CUELLO DE LAS ROPTRIAS 4 (RON4) DE *PLASMODIUM FALCIPARUM* CONTIENE REGIONES DE UNIÓN A ERITROCITOS Y HEPATOCITOS HUMANOS.

Fredy Alexander Pulido Quevedo, Gabriela Arévalo Pinzón, Manuel Alfonso Patarroyo.

SLPC2-673

Producción nacional de un kit One Step con las enzimas recombinantes MMLV Retrotranscriptasa y una Tth ADN polimerasa para uso en la técnica RT-PCR.

Paula Andrea Pedroza, Isaura Patricia Torres, Óscar Mauricio Gómez, Rubén Manrique, Juan Esteban Gallo.



SLPC2-674

BIOCOMPATIBILITY-RELATED PROPERTIES OF CHITOSAN/HEPARIN-CROSSLINKED POLYURETHANES FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS

Yomaira Lisnedy Uscategui Maldonado, Luis Eduardo Díaz Barrera, Manuel Fernando Valero Valdivieso, Ericsson Coy-Barrera.

SLPC2-687

Estudio del metabolismo de *Limosilactobacillus reuteri* ATCC 53608 en presencia y en ausencia de reuterina como agente tóxico.

Sandra Janneth Santos Rocha, Rigoberto Rios Estepa, Fernando Orozco Sanchez, Maritza Ocampo, Sebastian Hernandez.

SLPC2-688

Resistencia y elementos genéticos móviles en aislamientos de *Salmonella Typhimurium* de origen clínico colombianos.

Nancy Yaneth Flórez-Delgado, Lucy Angeline Montaña, José Miguel Villarreal, Magdalena Wiesner.

SLPC2-717

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DEL LIGANDO N-BENCILANILINADITIOCARBAMATO (DTC) Y COMPUESTOS DE COORDINACIÓN A PARTIR DE Cu²⁺, Ni²⁺ Y Pd²⁺ CON POSIBLE ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA.

Edwin Florez Lopez, Laura Andrea Rojas Ramirez, Richard Fernando D'vries Arturo, David Morales Morales.

SLPC2-720

EVALUACIÓN DEL USO DE CASCARILLA DE ARROZ, POLIETILENO Y POLIPROPILENO EN LA PRODUCCIÓN DE POSTES PARA USO AGROPECUARIO

Justein Melissa Baller, Alejandro Ríos Castiblanco.

SALUD HUMANA & ANIMAL

ILMC2-693

NANOCARRIERS ENCAPSULATED TRITERPENES TO TREAT OBESITY AND TYPE 2 DIABETES MELLITUS

Elkin Escobar-Chaves, Maritza Fernández, Luis Fernando Echeverri, Diana Lorena Muñoz, Sergio Acin, Jahir Orozco, Norman Balcázar.

SLMC2-100

DISEÑO RACIONAL, SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS INHIBIDORES SELECTIVOS DE ACETILCOLINESTERASAS

Lorena Camargo Ayala, Luis Prent-Peñaloza, Margarita Gutierrez.

SLMC2-406

IDENTIFICACIÓN DE METABOLITOS DE PLANTAS MEDICINALES COMO ADYUVANTES EN LA TERAPIA DEL HEPATOCARCINOMA CELULAR MEDIANTE ANÁLISIS *IN SILICO* EMPLEANDO COMO DIANA TERAPÉUTICALA MITOCONDRIA.

Liseth Paola T. Bohórquez, Luis C. Vesga, Stelia C. Mendez-Sanchez



SLMC2-40

EVALUACIÓN *in vitro* Y ESTUDIO BIOFÍSICO DEL PÉPTIDO Δ M4 COMO POTENCIAL AGENTE ANTITUMORAL CONTRA EL CÁNCER DE SENO

Maria Camila Klaiss-Luna, Gloria A Santa-González, Marcela Manrique-Moreno

SLMC2-411

ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LAS POSIBLES INTERACCIONES DE LOS METABOLITOS CON ACTIVIDAD REPELENTE: A-BISABOLOL, NEROLIDOL Y ACETATO DE GERANILO CON LAS PROTEÍNAS FREQUENINA-2 Y RECEPTOR DE TRIFOSFATO DE INOSITOL (IP₃R).

Laura Marcela Pérez Niño, Stelia Carolina Méndez Sánchez.

SLMC2-414

CARACTERÍSTICAS BIOQUÍMICAS-CLÍNICA DE LA LITIASIS BILIAR EN PACIENTES DE UNA RED HOSPITALARIA DE CARTAGENA

Willfrant Jhonnathan Muñoz Murillo, José Belisario Tinoco, Angélica Guerrero Castilla, Amileth Suárez-Causado.

SLMC2-477

NUEVOS HÍBRIDOS BASADOS EN CURCUMINA Y RESVERATROL: CITOTOXICIDAD, ACTIVIDAD ANTIPROLIFERATIVA E INDUCCIÓN DE MUERTE CELULAR CONTRA CÁNCER COLORRECTAL

Gustavo Moreno, Cristian Hernández, Angie Herrera, Wilson Cardona.

SLMC2-480

Expresión de Reteplasa, una variante del Activador Tisular del Plasminógeno Humano recombinante, en el sistema Gateway[®] a nivel analítico.

Jhoana Carolina Ossa-Tabares, Oscar Mauricio Gómez-Guzmán, Ana María García Cepero.

SLMC2-506

DETERMINACIÓN DE LAS PROPIEDADES ANTIOFÍDICAS DEL EXTRACTO METANÓLICO DE *Petiveria alliacea* FRENTE AL VENENO DE *Bothrops atrox* DEL PIE DE MONTE AMAZÓNICO.

Sebastian Saldarriaga Muñoz, Yudy Lorena Silva Ortiz.

SLMC2-589

INTERFERENCIA DE ALGUNOS DETERGENTES EN LA INMUNODETECCIÓN DEL MARCADOR EXOSOMAL CD81 EN EL SECRETOMA DE CÉLULAS DE MELANOMA A375

S. Susana Novoa-Herrán, Luis Alberto Gómez-Grosso.

SLMC2-617

LA EXPOSICIÓN CRÓNICA AL ETANOL ALTERA LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE GLUTATIÓN PEROXIDASA (GPX) HEPÁTICA DURANTE EL TERCER TRIMESTRE DE DESARROLLO FETAL

Alberto Díaz Castillo; Janne Paola Silgado; Karick Jotty Arroyo.



SLMC2-629

Alternativa para la detección de SARS-CoV-2 por RT-qPCR acoplada a SYBR Green

Valentina Guevara, Andrea Carolina Barragán-Cárdenas, David Alejandro López-González, Andrés Correa-Sánchez, Sebastián Arcila-Barrera, Mauricio Urquiza, Adriana Umaña-Pérez.

SLMC2-632

DESARROLLO DE UNA PRUEBA DIAGNÓSTICA PARA LA DETECCIÓN DE SARS COV-2 BASADA EN LA TÉCNICA LAMP

Steven Alexander, David Jimenez, Paola Andrea Caicedo Burbano, María Francisca, Villegas Torres, Natalia Campillo Pedroza.

SLMC2-646

PRODUCCIÓN E IMPLEMENTACIÓN DE UN SISTEMA DE ENTIDADES PSEUDOVIRALES PARA EL ESTUDIO DE LA INFECCIÓN DEL SARS-COV-2 EN UN ENSAYO IN VITRO DE INVASIÓN A CÉLULAS HUMANAS.

Laura Fernanda Fernández Fonseca, Yadi Adriana Umaña Pérez, Mauricio Urquiza-Martínez

SLMC2-701

CAMBIOS EN LA EXPRESIÓN DE CITOQUINAS POR EFECTO DE PÉPTIDOS DERIVADOS DE LA PROTEÍNA gp85 DEL VIRUS DE EPSTEIN-BARR.

Botero-Buitrago Jenny A., Urquiza-Martínez Mauricio.

SLMC2-701

CAMBIOS EN LA EXPRESIÓN DE CITOQUINAS POR EFECTO DE PÉPTIDOS DERIVADOS DE LA PROTEÍNA gp85 DEL VIRUS DE EPSTEIN-BARR.

Botero-Buitrago Jenny A., Urquiza-Martínez Mauricio.

SLMC2-703

INFLUENCIA DE LOS REQUISITOS DEL MATERIAL VEGETAL DE PARTIDA SOBRE LA ACTIVIDAD BIOLÓGICA DE EXTRACTOS OBTENIDOS A PARTIR DE FRUTOS DE *PHYSALIS PERUVIANA* L.

Anderson Stiven Sedano Ramirez, Jors Steven Vargas Mantilla, Yolima Baena Aristizábal.

SLMC2-704

DETERMINACIÓN DE PERFILES TH₁/TH₂ DE LINFOCITOS DE RATÓN BALB/c ESTIMULADOS CON PEPTIDOMIMÉTICOS DERIVADOS DE ANTÍGENOS DE MSP-1 DE *Plasmodium* spp.

Zully Johana Rodríguez Parra, José Manuel Lozano Moreno.

SLMC2-713

OPTIMIZACIÓN DE SISTEMA DE qPCR PARA DETECCIÓN DE LA RESPUESTA PRO APOPTÓTICA DE PÉPTIDOS ANTICANCERÍGENOS.

Jenny A. Botero-Buitrago, Sebastian Arcila-Barrera, Adriana Umaña-Pérez.

SLMC2-716

Detección del virus del chikungunya por RT-PCR en tiempo real de un solo paso basado en SYBR Green.

Andrés Felipe Cuéllar Quimbaya, Ana Luisa Muñoz, Nidya Alexandra Segura, Anny Karely Rodríguez, Felio Bello, Mónica Losada-Barragán.



SLMC2-728

ACTIVIDAD *IN VITRO* E *IN SILICO* DE ALCALOIDES INDÓLICOS DE *TABERNAEMONTANA CYMOSEA* JACQ (APOCYNACEAE), FRENTE A *STAPHYLOCOCCUS AUREUS* SENSIBLE Y RESISTENTE A ANTIBIÓTICOS.

Julián Andrés Cabrera Barraza, Geraldine Martelo Martínez, Yina Pájaro González, Andrés Oliveros Díaz, Juan Urrego Álvarez, Winston Quiñonez Fletcher, Fredyc Díaz Castillo.

SLMC2-735

IDENTIFICACIÓN DE METABOLITOS PRESENTES EN PLANTAS MEDICINALES COMO ADYUVANTES EN EL TRATAMIENTO CONTRA EL ADENOCARCINOMA DE CÉRVIX MEDIANTE ESTUDIOS *IN SILICO* EMPLEANDO COMO DIANA FARMACOLÓGICA LA MITOCONDRIA.

Andrea Otero Mojica, Luis Carlos Vesga Gamboa, Stelia Carolina Mendez Sanchez.

VEGETAL & AGRICULTURA

SLNC2-719

EXPLORACIÓN DE LOS MECANISMOS DE RESISTENCIA A CADMIO A TRAVÉS DEL ANÁLISIS GENÓMICO DE DOS HONGOS NATIVOS (*Annulohyphoxylon stygium* y *Aaosphaeria arxii*) PRESENTES EN SUELOS CACAOTEROS DEL MUNICIPIO DE YACOPÍ-CUNDINAMARCA.

González B. Diego A., Cordoba-Novoa Henry, Roa P. Yesica D, Gómez V. Yolanda, Torres R. Esperanza, Gribskov Michael

SLNC2-434

EXPLORACIÓN DE LOS MECANISMOS DE RESISTENCIA A CADMIO A TRAVÉS DEL ANÁLISIS GENÓMICO DE DOS HONGOS NATIVOS (*Annulohyphoxylon stygium* y *Aaosphaeria arxii*) PRESENTES EN SUELOS CACAOTEROS DEL MUNICIPIO DE YACOPÍ-CUNDINAMARCA.

Gloria Magally Paladines, Leicy Restrepo Cuellar, Anderson Anacona

SLPC2-711

OPTIMIZACIÓN DE LA EXTRACCIÓN DE ADN MICROBIANO EPÍFITO PARA SECUENCIACIÓN ASOCIADO A LA FILÓSFERA Y HOJARASCA DE SISTEMAS PRODUCTIVOS DE CACAO CON ALTAS CONCENTRACIONES DE CADMIO EN EL SUELO.

Roa P. Yesica. D., Torres-Rojas. Esperanza.



SPAEE
II SIMPOSIO PANAMERICANO DE
ACEITES ESENCIALES



PLENARIAS



PLENARIAS XVIII COLACRO

PCC01

Modern strategies of analysis of the volatile fraction and sensory evaluation: a successful complementary combination for food characterization and control.

Dr Carlo Bicchi

Laboratory of Pharmaceutical Biology and Food Chemistry
Dipartimento di Scienza e Tecnologia del Farmaco - Università di Torino
Via Pietro Giuria 9 - I-10125 Torino (Italy)

The volatile fraction of a food and in particular its aroma is an essential "signature" that not only plays a key role in the choice of food but also in its characterization, and in the assessment of quality and authenticity. Sensory analysis is still the reference approach for defining food quality; however, its routine use is still critical due to a) the rather limited number of experienced tasters, b) the number of samples that can be processed every day is not unlimited but constantly increasing, and c) it is time consuming and requires repeated experiments.

The introduction of omics sciences, and in particular of Molecular Sensory Science or Sensomics, by Schieberle and Hofmann in 2011 [1] and, above all, the strategies and methods derived from it have substantially influenced the analytical approach to flavour (i.e. aroma, taste and texture) analysis. In analytical terms, omics disciplines imply a comprehensive and quantitative analysis of the widest possible range of low molecular weight components (<1,000 Da) in the samples studied [2].

The application of metabolomics strategies to everyday food analysis has also led to the adoption of dedicated approaches, the best known of which are fingerprinting and profiling, and their practical application has resulted in several methods commonly known as untargeted and targeted, and to a remarkable increase of the role of data processing and chemometrics. Analytical instrumentation has evolved in parallel to meet ever increasing needs. The general thrust has therefore been to develop inclusive instrumentation in which the sequence sample preparation-analysis-data processing are on-line merged into a single step, i.e. the so-called Total Analysis Systems (TAS) introduced by Manz et al. in 1990 [3]. This lecture is an overview with examples from the author's long experience with the analysis of volatile fractions of food (including coffee, tea, cocoa, hazelnuts, olive oil and peppermint essential oil) to show how modern approaches and technologies can be applied to monitor food quality and characteristics also in industrial quality control.

References

- [1] P. Schieberle, T. Hofmann, (2011), Food Flavors, CRC Press: 413-438
- [2] J.L. Wolfender et al. Current Medicinal Chemistry, 2013, 1056-1090
- [3] A. Manz, N. Graber, H. M. Widmer, Sensors and Actuators: B. Chemical, 1990, 1(1-6), 244-248



PCC02

Recent advances in nano liquid chromatography coupled to mass spectrometry.

Fernando M. Lanças
Universidade de São Paulo
Instituto de Química de São Carlos
13560-970 São Carlos, SP – Brasil

flancas@iqsc.usp.br

Since its introduction in the 1950's gas chromatography (GC) became the first chromatographic technique to be instrumentalized. In the same decade, sooner after its formal proposal by Martin and co-workers, Golay demonstrated the miniaturization of the GC technique by developing the open tubular (OT) columns. A few years later, it was shown that OT-GC could be easily coupled to mass spectrometry by just connecting the OT column to the GC injector and directly to the MS ion source, without any "interface." Unfortunately, LC did not pursue the same successful path, and its open tubular version did not consolidate up to this moment. In addition, due to its intrinsic characteristics (high pressure, high flow rate, and so on), the coupling of LC to MS was not as easy as GC-MS. After several limiting interfaces were developed (moving belt, particle beam, thermospray, and others), a more general and friendly LC-MS (Electrospray-ESI) was finally developed. Despite being the most successful LC-MS "interface" to now, ESI suffers from several practical limitations. One of them is the absence of an adequate fragmentation pattern to allow reliable libraries to be constructed.

In this presentation, we will show some recent results from our laboratory involving the preparation of miniaturized LC columns (both packed and OT) and their coupling to mass spectrometry. Results on nanoLC-ESI-MS/MS employing synthesized graphene-based stationary phases will be discussed. Finally, applications on the direct coupling of OT columns to MS via ESI and electron ionization (EI) will be demonstrated.



PCC03

Biorefinery of food by-products with health properties: moving towards SDGs.

J.D. Sánchez-Martínez ¹, D. Ballesteros-Vivas ^{1,2}, B. Socas Rodríguez ¹, J.A. Mendiola ¹, A. Cifuentes ¹, E. Ibáñez ^{1*}

¹Laboratory of Foodomics, Institute of Food Science Research, CIAL, CSIC, Nicolás Cabrera 9, Madrid, 28049, Spain; ² Food Chemistry Research Group, High Pressure Laboratory, Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Carrera 30 No. 45-03, 111321, Bogotá D.C., Colombia.

[*elena.ibanez@csic.es](mailto:elena.ibanez@csic.es)

At present, one of the great challenges facing humanity is the eradication of hunger, one of the top commitments on The Sustainable Development Goals (SDGs) [1]. New approaches on agricultural development for food security and nutrition are challenging our research since they will allow an easier access to safe and nutritious food for sustaining life and promoting good health. In our laboratory, we are continuously trying to provide need answers towards sustainability through the application of Green Chemistry and Green Analytical Chemistry (GAC) principles in our everyday life. This is the main focus of Green Foodomics [2], that integrates those principles in each of the -omics platforms during method development to determine food constituents and nutrients at the molecular level. Moreover, Green

Foodomics also deal with food safety and quality assessment and with the bioprospecting of compounds with nutritional or functional value using, among others, green solvents and environmentally friendly extraction techniques.

Two different aspects will be included in the present talk: the safety of agricultural by- products that are subjected to extraction of valuable compounds; and the development of new and sustainable procedures for isolating bioactives from these by-products targeting health promoting activities [3]. An example will be given considering citrus by-products and terpenes with neuroprotective activity.

References

- [1] Bizikova L, Jungcurt S, McDougal K, Tyler S: How can agricultural interventions enhance contribution to food security and SDG 2.1? *Glob Food Sec* 2020, 26:100450.
- [2] Gilbert-López B, Mendiola JA, Ibáñez E: Green foodomics. Towards a cleaner scientific discipline *TrAC Trends Anal Chem* 2017, 96:31–41.
- [3] Ballesteros-Vivas D, Socas-Rodríguez B, Mendiola JA, Ibáñez E, Cifuentes A, Green food analysis: Current trends and perspectives *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry* 2021, 31:100522.

Acknowledgments

The authors would like to thank project AGL2017-89417-R (Spanish Ministry of Science and Innovation, Spain). B.S.-R. would like to acknowledge the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities for their “Juan de la Cierva” postdoctoral grant.



PCC04

Neuroprotective activity of bioactive compounds from food by-products, plants and microalgae: A comprehensive study.

J.D. Sánchez-Martínez, Z. Suárez-Montenegro, R. Gallego, G. Alvarez-Rivera, B. Socas-Rodríguez, M. Herrero, E. Ibáñez, A. Valdés, A. Cifuentes*

Laboratory of Foodomics, Institute of Food Science Research, CIAL, CSIC, Madrid, Spain.

E-mail: a.cifuentes@csic.es

Resumen

El principal objetivo de esta presentación es dar a conocer los últimos resultados obtenidos en nuestro grupo de investigación (Foodomics Lab) en cuanto a la actividad neuroprotectora de compuestos bioactivos obtenidos de diferentes fuentes naturales (incluidas algas, plantas, subproductos de la industria del aceite de oliva y del zumo de naranja, etc.) combinando la procesos verdes de extracción, un estudio sistemático de la composición química utilizando técnicas analíticas avanzadas (GC-QTOF-MS/MS y LC-QTOF-MS/MS), con modelos in vitro y modelos celulares de la enfermedad de Alzheimer. También se mostrarán resultados de las técnicas de metabolómica que estamos aplicando para identificar en las células modelo, biomarcadores relacionados con la actividad neuroprotectora de los compuestos naturales más activos encontrados.



PCC05

Novel implementations of GCxGC The Power and the Passion.

Philip J. Marriott

Australia Centre for Research on Separation Science, School of Chemistry, Monash

University, Clayton, Australia

philip.marriott@monash.edu

Comprehensive two-dimensional GC (GC×GC) applies a two-column separation method in a unique manner such that a 2D separation space results. ‘Comprehensive’ is intended to mean analysis of all components, and even though even a single column comprehensive GC method also achieves this, many components may be unresolved, and so this compromises the ability to measure such components. The POWER of GC×GC is that the very high resolution of most of the components significantly improves the ability to observe, and measure most of the composition of samples. Thus GC×GC should solve much of the resolution problem arising with single column analysis, even if some especially complex samples challenge this, e.g. branched and cyclic alkanes in petrochemicals, and naphthenic acids in process water.

Comprehensive multidimensional GC is differentiated from GC×GC by applying classical heart cut MDGC in a repetitive sense – i.e. with repeat injections – with contiguous heart cuts sampled in each successive sequential analysis. This eventually covers the whole sample. This presentation examines different implementation procedures that accomplish this task. Applications include improved resolution of petrochemical samples, and oxidation products in thermally stressed biofuels. Of interest is the scope for increased resolution of compounds compared with GC×GC, although it is a more time-consuming analytical separation method.

We continue to be PASSIONATE about the search for improved chemical analysis of complex samples, that ultimately translates into better knowledge of sample composition.



PCC06

Advances in Ionic Liquid-Based Stationary Phases and Sorbent Materials for Chromatography and Sample Preparation

Dr. Jared Anderson

Department of Chemistry, Iowa State University, IA USA

Abstract

Ionic liquids (ILs) can be designed to exhibit unique properties for their use in a number of applications in analytical and bioanalytical chemistry. This talk will focus on the design and synthesis of ILs, magnetic ionic liquids (MILs), and polymeric ionic liquids (PILs) as well as the use of these materials in a number of applications within multidimensional chromatography and sample preparation. A series of monocationic/dicationic ionic liquid-based and silver-containing stationary phases were evaluated as secondary columns in comprehensive two-dimensional gas chromatography (GC×GC) for the separation of aliphatic hydrocarbons from kerosene as well as the separation of olefins from paraffins. Finally, nucleic acids are biopolymers that constitute important diagnostic molecules for a broad range of applications from clinical testing to forensic analysis. A major challenge faced by DNA and RNA analysis techniques is the selective extraction of particular nucleic acid sequences using rapid and sensitive methodologies. It will be shown that ion-tagged oligonucleotides (ITOs) can be used in conjunction with MILs to efficiently capture DNA sequences from complex samples. The ITOs can be created through thio-lene “click” chemistry and the nature of the ion tag can influence the partitioning of the ITO to the hydrophobic MIL. This novel liquid-phase approach towards sequence-selective DNA capture provides superior extraction efficiencies to conventional magnetic bead technology as well as a platform for using external fields to manipulate the liquid droplets.



PCC07

Social problems and chromatographic science: separation that unites.
Dra. Elena Stashenko



PCC08

Comprehensive two-dimensional liquid chromatography coupled to mass spectrometry for unravelling of complex natural products.

Paola Dugo ^{1,2}, , Katia Arena ¹, Francesco Cacciola ³, Luigi Mondello ^{1,2,4,5}

¹Department of Chemical, Biological, Pharmaceutical and Environmental Sciences, University of Messina, Messina, Italy;

²Chromaleont s.r.l., c/o Department of Chemical, Biological, Pharmaceutical and Environmental Sciences, University of Messina, Messina, Italy

³ Department of Biomedical, Dental, Morphological and Functional Imaging Sciences, University of Messina, Messina, Italy

⁴Unit of Food Science and Nutrition, Department of Medicine, University Campus Bio- Medico of Rome, Rome, Italy

⁵BeSep s.r.l., c/o Department of Chemical, Biological, Pharmaceutical and Environmental Sciences, University of Messina, Messina, Italy

[*pdugo@unime.it](mailto:pdugo@unime.it)

Natural products have been extensively investigated so far because of their biological and physiological significances, as well as their promising clinical uses. Many studies have been focused with the characterization of such samples by LC and MS. However taking into consideration the complicated pattern occurring in natural products, in the last two decades comprehensive two dimensional liquid chromatography (LC×LC) raised as a powerful analytical tool for their determination.

The present contribution aims to highlight the feasibility of the LC×LC technique for the identification and quantification of the bioactive compounds (phenolic acids, flavonoids, etc) in complex natural matrices. Combination of RP×RP and HILIC×RP modes have been successfully investigated. Furthermore, the employment of a micro LC pump in the first dimension of the LC×LC systems, allowed greater repeatability with stable retention times.



PLENARIAS II SPAE

PSP01

Valor agregado y mercado de aceites esenciales.

Dr. Arnaldo Bandoni

La producción primaria de aceites esenciales proviene mayoritariamente de países con clima tropical o subtropical, y son una alternativa muy difundida en regiones de minifundios, como complemento para el sustento económico de sus habitantes. Por otro lado, el conocimiento etnobotánico de estos pueblos aporta una profusa experiencia sobre nuevos materiales aromáticos y su manejo sustentable.

Con suficiente materia prima disponible y con la estructura social necesaria para su procesamiento, resulta imprescindible la colaboración de grupos idóneos para contribuir al desarrollo de nuevos emprendimientos que aprovechen estas fortalezas y oportunidades, en beneficio de esas poblaciones. El mercado de aceites esenciales es fuertemente competitivo, exigente, hermético y variable. Pero es un fuerte demandante de nuevos materiales. No es fácil ingresar como nuevo proveedor para los grandes integrantes de este mercado, y solo se puede acceder con una escala de oferta significativa y bajo estrictas normas de calidad y continuidad. Sin embargo, hay alternativas que permiten avanzar desde una escala mínima de oferta, muchas veces suficiente para economías regionales o familiares, y donde el valor agregado está dado por muy distintos factores, muchas veces intangibles: identificación cultural, calidad de natural, denominación de origen, singularidad en la presentación, formulación novedosa, etc. Seguramente serán muchas las dudas y problemas que puedan surgir en estos emprendimientos. Pero si fuera sencillo, todos los harían y ya no sería ni un negocio ni una solución. Son imprescindibles para lograr el éxito la resiliencia, la colaboración profesional multidisciplinaria y una actitud innovadora. Se describirán las principales características del mercado de aceites esenciales y algunas pautas básicas que permitan evaluar la factibilidad de un nuevo desarrollo en este rubro.

Value added and essential oil market.

Arnaldo L. Bandoni

The primary production of essential oils comes mostly from countries with a tropical or subtropical climate, and are a widespread alternative in smallholder regions, as a complement to the economic livelihood of its inhabitants. On the other hand, the ethnobotanical knowledge of these peoples provides a wealth of experience about new aromatic materials and their sustainable management.

With enough raw material available and the social structure for its processing, it is essential the collaboration of suitable groups to contribute to the development of new ventures that take advantage of these strengths and opportunities, for the benefit of these populations. The essential oils market is strongly competitive, demanding, airtight and variable. But it is a strong demander for new materials. It is not easy to enter as a new supplier for the large players in this market, and it can only be accessed with a significant scale of resources and under strict standards of quality and continuity. However, some alternatives allow moving forward from a minimum scale of supply, often sufficient for regional or family economies, and where the added value is given by very different factors, often intangible: cultural identification, attribute of natural, denomination of origin, singularity in the presentation, novel formulation, etc. Surely there will be many doubts and problems that may arise in these ventures. But if it were simple, everyone would do it and it would no longer be a business or a solution. Resilience, multidisciplinary collaboration and an innovative attitude are essential for success. The



main characteristics of the essential oil market and some basic guidelines for assessing the feasibility of a new development in this market will be described.

PSP02

The chemistry of the Brazilian pitch (breu) resins: Chemistry in the light of ethnopharmacology.

¹Suzana Guimarães Leitão, ¹Rayane C. Albino, ²Humberto R. Bizzo, ¹Danilo R. Oliveira

¹Departamento de Produtos Naturais e Alimentos, Faculdade e Farmácia, Universidade Federal do Rio de Janeiro, CCS, 21.941-902, Rio de Janeiro, Brazil

²Embrapa Agroindústria de Alimentos - Av. das Américas, 29501, Rio de Janeiro, Brazil

Plant exudates have fascinated man since ancient times. In Brazil, Burseraceae and Fabaceae terpenoid resins, known as *breu* (pitches), are cherished as important elements of northern and northeastern ethnopharmacopoeias. In an ethnobotanical survey conducted by our group in quilombola (maroon) communities of the municipality of Oriximiná, Pará State, Brazil, black *breu* (*Protium* spp., Burseraceae), white *breu* (*Protium* spp., Burseraceae), canauaru *breu* (debatable origin, but is at least partially Burseraceae-derived) and jutaicica *breu* (*Hymenaea* spp., Fabaceae) showed high Principal Use Agreement (85 %) for headache treatment amongst the interviewees, used under the form of medicinal incenses. Therefore, since 2008 our group has been working on the subject, studying the volatile and fixed composition of several resins in the Amazon, and developed an inhalation chamber for biological tests seeking to analyze the medicinal properties of their volatiles. In this lecture, the ethnobotanical, chemical and biological aspects of these resins will be presented. We'll go through some of our latest findings, from the volatile's components of the *breus* to their smokes (volatiles produced upon burning) and discuss how their chemistry can relate to their traditional medicinal uses.



PSP03

The genus *Baccharis*: a diversified factory of volatile compounds.

Dr. Eduardo Dellacassa

Universidad Técnica Particular de Loja, Departamento de Química, Calle Marcelino Champagnat s/n, Loja, Ecuador.

Although Ecuador is considered a “megadiverse country”, its great biodiversity has been investigated only partially from the phytochemical point of view. Furthermore, many studies dealt on the structure elucidation of non-volatile metabolites, rather than the analysis and characterization of essential oils (EOs). Nevertheless, the description of volatile fractions also constitutes an important contribution to the chemical knowledge of botanical species, leading to the identification of new EOs, with a potential healthy and commercial significance. However, until recent years, these studies in Ecuador never included the enantiomeric composition of chiral components and/or the chemical investigation of the aromatic profile. For these reasons, since 2017, the description of new EOs has been approaching also considering these aspects. So far, about 20 EOs have been described, most of them by our research group, focusing on their enantiomeric and aromatic profiles. In the present lecture, the EOs from the following species are discussed: *Clinopodium taxifolium* (Kunth) Govaerts, *Clinopodium tomentosum* (Kunth) Govaerts, *Coreopsis triloba* S.F. Blake, *Lepechinia heteromorpha* (Briq.) Epling, *Lepechinia mutica* Benth, *Niphogeton dissecta* (Benth.) J.F. Macbr and *Piper coruscans* Kunth. The enantioselective analyses were carried out by GC-MS, through β -cyclodextrin-based capillary columns. The enantiomers were identified by MS and direct or indirect use of enantiomerically pure standards. For what concerns GC-O analyses, a GC-FID instrument, equipped with a sniffing port, was used and the AEDA approach was applied. In one case, the major sesquiterpene component was preparatively purified and its structure confirmed by NMR spectroscopy. Once purified, the same chiral sesquiterpene was submitted to polarimetry, determining its optical purity. Sometimes, the investigation was completed by determining the *in vitro* inhibition activity against acetylcholinesterase (AChE) and butyrylcholinesterase (BuChE).



PSP04

The genus Baccharis: a diversified factory of volatile compounds Plant Volatiles: From Emission to Perception.

Dra. Natalia Dudareva

Plants synthesize an amazing diversity of volatile organic compounds (VOCs) that facilitate interactions with their environment, ranging from attracting pollinators and seed dispersers to protecting themselves from pathogens, parasites, and herbivores. Plants are also targets of released compounds as a part of plant-plant communication, as well as plant-insect and plant-microbe interactions. Plants are constantly exposed to atmospheric VOCs and can differentiate and respond to specific cues. Due to the plethora of biological processes dependent on VOCs, significant progress has been made over the last couple of decades towards understanding the biosynthesis of these compounds and their regulation. Much less is known about how volatiles are transported from cells into the atmosphere. To be released from cells, VOCs have to move from the site of synthesis through the cytosol, then cross the plasma membrane, hydrophilic cell wall, and finally the waxy cuticle. Until recently, it was assumed that VOCs simply diffuse through each barrier. However, due to their lipophilic nature VOCs will preferentially partition into membranes and accumulate to the toxic levels in the absence of biologically mediated processes. The presentation will cover different aspects of VOC emission and perception: from function of transporters in VOC trafficking across the plasma membrane to a role of the cuticle as an integral member of the overall VOC biosynthetic network as well as an inter-organ aerial transport of VOCs via natural fumigation and hormone-like function for terpenoid compounds.

How plants produce volatile compounds and what molecular mechanisms control their accumulation and release pose significant questions in plant biology that remain largely unanswered. Presented results will show how the integration of metabolic profiling, functional genomic approach, targeted metabolic engineering with metabolic flux analysis and modeling can provide a comprehensive understanding of the regulation of flux through metabolic networks. These results reveal that the cuticle is not simply a passive diffusion barrier for VOCs to cross, but plays a more complex role in the emission process than previously anticipated as an integral member of the overall VOC biosynthetic network.



PSP05

Exploring the potential of ionic liquids as gas chromatographic stationary phases for the analysis of essential oils.

Dra. Cecilia Cagliero Laboratory of Pharmaceutical Biology and Food Chemistry
Dipartimento di Scienza e Tecnologia del Farmaco - Università di Torino
Via Pietro Giuria 9 - I-10125 Torino (Italy)

Analyses of essential oils and volatiles from natural products cover a wide range of topics, from quality control to marker identification and quantitation, thus requiring a combination of efficiency and selectivity of the chromatographic system suitable to produce a baseline separation of all markers in a single run. Samples in these fields are, in general, complex mixtures often consisting of isomeric and analogous components with similar structural and physical characteristics (e.g., mono- and sesquiterpenoids) that are sometimes difficult to identify because of their similar mass spectra thus making chromatographic data indispensable for their correct identification, and, in some cases, challenging to separate with conventional stationary phases (SPs). A continual search for new SPs with different selectivity and good chromatographic properties is therefore necessary to obtain separation patterns complementary to those obtained with the classical SPs.

The introduction of ionic liquids (ILs) as SPs for GC have opened new perspectives as their unique solvation properties result in uncommon selectivity, completely different from that of conventional columns [1]. This communication will explore the potential of IL-based SPs when applied to the analysis of Eos and volatiles from natural products. In particular, it will report some examples on how the peculiar selectivity of the IL commercial columns can be exploited in challenging separations and component identification(s) [2, 3]. Furthermore, it will discuss the possibility to tune the selectivity and the chromatographic performance of IL-based SPs by selecting derivatives and operative conditions compatible to analyses of EOs [4, 5].

- [1] C. Cagliero, C. Bicchi, *Anal Bioanal Chem*, 2020, 412, 17-25.
- [2] C. Cagliero et al. *J Chromatogr A*, 2017, 1495, 64-75.
- [3] C. Cagliero et al. *J Chromatogr A*, 2012, 1268, 130-138.
- [4] C. Cagliero et al. *J Chromatogr A*, 2020, 1619, 460969.
- [5] M. Mazzucotelli et al., *J Chromatogr A*, 2019, 1583, 124-135.



PSP06

Olfato con sentido – Un enfoque bioquímico de la percepción de olores.

Dr. Rodrigo Torres

Nuestro ambiente natural tiene miles de olores diferentes. Los humanos y la mayoría de las especies animales poseen un sistema sofisticado para detectar, discriminar e interpretar olores. Este proceso se denomina olfato o “mecanismo del sentido del olor”.

Los humanos usan este mecanismo olfatorio para comunicarse con el ambiente y otros animales, localizar fuentes de alimento, identificar parejas, y proveer tanto sentido de placer sensual como de alertas de peligro a predadores. De esta manera, el entendimiento de los mecanismos moleculares de este sentido, facilita el entendimiento del comportamiento animal. Desde los años 1940s, se ha especulado sobre las bases fundamentales de la captación de olores. Se ha asumido que las moléculas odorantes son reconocidas por receptores proteicos selectivos. El descubrimiento de estos receptores en los 1990s permitió un gran progreso en el entendimiento de los principios fisiológicos y bioquímicos del olfato. Sin embargo, desde el descubrimiento de las proteínas de unión a olores (OBP), aún no son totalmente comprendidos detalles de interacción receptor-olor a nivel molecular y los mecanismos de activación de receptores. En esta presentación, se revisarán los diferentes mecanismos involucrados en la codificación de olores, enfocándose en las bases bioquímicas del reconocimiento de olores, así como en las claves evolutivas del sistema olfatorio producto del análisis de genomas de diversas especies animales. Finalmente, se expondrá sobre diferentes enfoques genómicos y proteómicos que actualmente están en curso para obtener información sobre la función de OBPs, todo lo cual permitirá mejores aplicaciones industriales y terapéuticas para los compuestos odorantes.



PSP07

Sample Preparation: the excluded essential in Green Analytical Chemistry.

Professor Elia Psillakis

Laboratory of Aquatic Chemistry, School of Chemical and Environmental Engineering, Technical University of Crete, GR-73100, Chania, Crete, Greece

Analytical Chemistry has two distinct and contradictory roles in Green Chemistry: it is essential for evaluating the environmental impact of chemical activities, but at the same time can contribute to further environmental problems due largely to the consumption of energy and the use/generation of hazardous substances during all stages of analysis. To address the negative side of Analytical Chemistry, the concept of Green Analytical Chemistry (GAC) was established soon after the introduction Green Chemistry. It was subsequently formulated in the form of 12 main principles that expressed the willingness to care for the environment and human safety as part of the development and application of analytical procedures.

Among the different steps involved in chemical analysis, sample preparation is considered critical in achieving “green analysis”. This is because early sample preparation methodologies consisted of tedious and more importantly, solvent-consuming procedures. Over the past two decades, research in the area of green and sustainable sample preparation has been outstandingly successful, but the discipline has not been effective enough at projecting its advances in external platforms. The lack of a coherent strategy and articulated voices to promote the criticality of green and sustainable sample preparation methods resulted in the majority of official analytical methods still relying on old-fashioned and hazardous analytical procedures. Private and industrial laboratories see sustainable or more eco- friendly analytical chemistry as an extra burden rather than a new opportunity for efficient, cost- effective and socially responsible practice.

In this contribution, I will pinpoint missed opportunities and faux pas, discuss their impacts and suggest means to address them. Advances in sample preparation technologies for natural products will be presented and their greenness will be discussed. Sample Preparation is an important tier of environmental protection and a powerful tool to unfold major and complex ongoing issues in natural product analysis. Positioning sample preparation in the context of ‘sustainability science’ means that it needs to adopt a system’s thinking approach and requires that this ambition be projected to a wide audience through engaging with academia, policy makers, routine laboratories and the industrial sector. Restoring the truth about the greenness of the sample preparation step is critical, and everyone within and outside the research community needs to acknowledge our great social responsibility and align with pollution abatement and sustainable development.



PSP08

Influencia del método de extracción en el análisis del aroma de alimentos.

Dra. Coralia Osorio

Profesora Titular, Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia-Sede Bogotá

Los compuestos volátiles responsables del aroma de frutas y vegetales son los productos secundarios de las diferentes rutas metabólicas. Mientras en las frutas estos compuestos se liberan o incrementan su concentración durante el proceso de maduración, en los vegetales se liberan durante la disrupción celular, usualmente a partir de precursores no volátiles. Cuando se trabaja con aceites esenciales el método de extracción por excelencia es destilación por arrastre con vapor; sin embargo, para estudiar el aroma de productos alimenticios, se debe escoger cuidadosamente el método de extracción ya que de este depende la composición del extracto final. En esta conferencia se presentará como ejemplo el análisis del aroma de dos frutas de la familia Sapotaceae, lúcuma (*Pouteria lucuma*)¹ y zapote costeño (*Pouteria sapota*)², en comparación con el análisis del aroma de agua de panela³. Resaltando que el método SAFE (Solvent Assisted Flavor Evaporation) permite obtener un extracto de aroma cercano al natural porque no se calienta la muestra; en tanto que el método DES (Destilación por arrastre con vapor-extracción simultánea con solvente orgánico) es útil cuando el aroma se produce por tratamiento térmico.

¹ M. Inga, J. M. García, A. Aguilar-Galvez, D. Campos, C. Osorio. Chemical characterization of dour-active volatile compounds during lucuma (*Pouteria lucuma*) fruit ripening. *Cyta-J. Food Sci.* 2019, 17, 494-500. ISSN 1947-6337. Doi: 10.1080/19476337.2019.1593248

² D. A. Martín, C. Osorio. Identification of aroma-active volatile compounds in *Pouteria sapota* fruit by aroma extraction dilution analyses (AEDA). *Quimica Nova.* 2019, 42 (6), 607-610. Doi: 10.21577/0100-4042.20170369

³ J. M. García, P. C. Narváez, F. J. Heredia, A. Orjuela, C. Osorio. Physicochemical and sensory (aroma and colour) characterisation of a non-centrifugal cane sugar (“panela”) beverage. *Food Chem.* 2017, 228 (1), 7-13.



PSP09

Study of aromatic plants and essential oils in Colombia: from laboratory to field production
Dra. Elena Stashenko



PLENARIAS IV C2B2

PCB01

Fungal growth and mycotoxin production in Capsicum pepper and in its derivatives: impact on human healthJéssica Costa ¹, Nelson Lima ², Cledir Santos ^{3*}¹ Doctoral Programme in Science of Natural Resources, Universidad de La Frontera, 4811-230 Temuco, Chile² CEB-Centre of Biological Engineering, Micoteca da Universidade do Minho (MUM), University of Minho, Campus de Gualtar, 4710-057 Braga, Portugal³ Department of Chemical Science and Natural Resources, Universidad de La Frontera, Temuco 4811-230, Chile*Correspondence: cledir.santos@ufrontera.cl

Mycotoxins are low-molecular-weight secondary metabolites produced by filamentous fungi (Costa et al., 2019a). Mycotoxigenic fungi grow in a wide range of agriculture crops (e.g., cereals, soybeans, grapes, tree nuts, groundnuts, coffee, cocoa and spices) and can produce one or more mycotoxins. Capsicum peppers are condiments widely used in cookery. Capsicum peppers and its derivatives can be contaminated at different points in their production chain with mycotoxins, which may act synergistically, triggering different acute and chronic diseases in animals and humans (Costa et al., 2019b). In Chile, *C. annum* L. cv. "Cacho de Cabra" pods are consumed fresh, dried and as a smoky flavour pepper powder known as Merkén. The average frequency of Merkén consumption in Chile is c.a. 5 g/day/person (Universidad de Chile, 2011). Aflatoxin B1 (AFB1) and Ochratoxin A (OTA) are important mycotoxins that have been found in Capsicum pepper and in its derivatives (e.g. Merkén) (Costa et al., 2019a; 2019b; 2020; Foerster et al., 2019). AFB1 is recognised as human carcinogen, and is in addition suggested to be involved with Gallbladder cancer (GBC) development (Nogueira et al., 2015; Costa et al., 2021). OTA is related with immunotoxic action, and presenting nephrotoxic and carcinogenic potential (Costa et al., 2019a). In the present work, the experimental results regarding the mycobiota present in *Capsicum annum* L. production chain, and the mycotoxins' contamination in pepper and Merkén production chains will be presented and discussed. In addition, the impact of the mycotoxin contamination in the human health by consumption of Capsicum pepper and its derivative, in Chile, will be addressed. Funding J.C. thanks to CONICYT/Chile for her Ph.D. grant no 21181445. This study was partially funded by the Universidad de La Frontera (Temuco, Chile), and by the Portuguese Foundation for Science and Technology (FCT) under the scope of the strategic funding of UID/BIO/04469/2019 unit and BioTecNorte operation (NORTE-01-0145-FEDER-000004) funded by the European Regional Development Fund under the scope of Norte2020 - Programa Operacional Regional do Norte.

References

- Costa J, Rodriguez R, Garcia-Cela E, Medina A, Magan N, Lima N, Battilani P, Santos C. (2019a). *Toxins*, 11:27-43.
- Costa J, Lima N, Santos C. (2021b). *Mycotoxin Research*, 1-10.
- Costa J, Rodriguez R, Santos C, Soares C, Lima N, Santos C. (2020). *International Journal of Food Microbiology*, 334:108833.
- Foerster C, Muñoz K, Delgado-Rivera L, Rivera A, Cortés S, Müller A, Arriagada G, Ferreccio C, Rios G. (2019). *Mycotoxin Research*, 1867-1632.
- Nogueira L, Foerster C, Groopman J, Egner P, Koshiol J, Ferreccio C. (2015). *Journal of the American Medical Association*, 313:2075-2077.
- Universidad de Chile (2011). Encuesta Nacional de Consumo Alimentario. In: Departamento de Nutrición (Ed.), Escuela de Salud Pública, Facultad de Medicina.



LEGO-based Generalized Set of Fuzzy Geometrical (3D) Protein Descriptors: Theory, Applications and Comparison with other Approaches.

Dr. Yovani Marrero

Universidad San Francisco de Quito (USFQ), Grupo de Medicina Molecular y Translacional (MeM&T), Colegio de Ciencias de la Salud (COCSA), Escuela de Medicina, Edificio de Especialidades Médicas, Quito, 170157, Pichincha, Ecuador. Email: ymarrero@usfq.edu.ec or ymarrero77@yahoo.es; Tel.: +593-2-297-1700 (ext. 4021). <http://www.uv.es/yoma/> or <http://ymponce.googlepages.com/home>; ORCID ID: <http://www.orcid.org/0000-0003-2721-1142>

Keywords: 3D biomacromolecular descriptors, 3D-protein descriptor, multi-linear algebraic forms, metrics, multi-metrics, N-Tuple Tensor, Topological and Geometric Cutoffs; amino acid interaction, matrix normalization procedure, aggregation operators, probabilistic transformations, fuzzy membership functions, fuzzy membership degree, spherical truncation, Machine learning, folding rate, SCOP protein structural classes, free and open-source software, MuLiMs- MCoMPAs.

Novel tridimensional (3D) biomacro-molecular descriptors based on N-linear algebra maps in for proteins are proposed. The bilinear forms ($N = 2$, namely bilinear, quadratic and linear algebraic maps) employs the k th 2-tuple (dis)-similarity matrix to codify information related to covalent and non-covalent interactions in these biopolymers. The calculation of the inter-amino acid distances is generalized by using several dis-similarity coefficients, where normalization procedures based on the simple stochastic and mutual probability schemes are applied (which serve to achieve matrix normalization). However, a generalization to N-way is also propose, these descriptors make use of multi-linear algebra concepts based on the application of 3-linear forms ($N = 3$, i.e., Canonical Trilinear (Tr), Trilinear Cubic (TrC), Trilinear-Quadratic-Bilinear (TrQB) and so on) as a specific case of the N-linear algebraic forms. The definition of the k th 3- tuple similarity-dissimilarity spatial matrices (Tensor's Form) are used for the transformation and for the representation of the existing chemical information available in the relationships between three amino acids of a protein. Several metrics (Minkowski-type, wave-edge, etc) and multi-metrics (Triangle area, Bond-angle, etc) are proposed for the interaction information extraction. A new local-fragment approach based on amino acid-types and amino acid-groups is proposed to characterize regions of interest in proteins. Topological and geometric macromolecular cutoffs are defined using local and total indices to highlight non-covalent interactions existing between the side-chains of each amino acid. Moreover, local and total indices calculations are generalized considering a LEGO approach, by using several fuzzy and non-fuzzy aggregation operators. Collinearity and variability analyses are performed to evaluate every generalizing component applied to the definition of these novel indices. These experiments are oriented to reduce the number of MDs obtained for performing prediction models. In fact, the relevance of this novel approach is demonstrated through two analyses that considered Shannon's entropy-based variability and a Principal Component Analysis. These studies showed that the N-linear descriptor family contains higher informational entropy than several other descriptors generated with available computation tools. Moreover, these 3D algebraic indices capture additional orthogonal information to the one codified by the available calculation approaches. As a result, two sets of suggested theoretical configurations that contain 13 648 two-linear indices and 20 263 three-linear indices are available for download at tomocomd.com. This study also introduces a set of fuzzy spherically truncated three-dimensional (3D) multi- linear descriptors for proteins. These indices codify geometric structural information from k th spherically truncated spatial-(dis)similarity two-tuple and three-tuple tensors. The coefficients of these truncated tensors are calculated by applying a smoothing value to the 3D structural encoding based on the relationships between two and three



amino acids of a protein embedded into a sphere. As, the geometrical center of the protein matches with center of the sphere, the distance between each amino acid involved in any specific interaction and the geometrical center of the protein can be computed. Then, the fuzzy membership degree of each amino acid with respect to a spherical region of interest is computed from fuzzy membership functions (FMFs). The truncation value is finally calculated by the combination (by using arithmetic mean as the fusion rule) of the membership degrees of the interacting amino acids. Several fuzzy membership functions having diverse biases on the calculation of amino acids memberships (e.g., Z-shaped (close to the center), PI-shaped (middle region), and A-Gaussian (far from the center)) were considered as well as traditional truncation functions (e.g., Switching). The truncation functions (i.e., FMFs) were compared by exploring: i) the frequency of membership degrees, ii) by the variability and orthogonality analyses among them based on the Shannon Entropy's and Principal Component's methods, respectively, and iii) by the alignment-free prediction of protein folding rates and structural classes. Such extensive evaluation unraveled the singularity of the proposed fuzzy spherically truncated MDs with respect to the classical (non-truncated) MDs and the MDs truncated with traditional functions. The best model developed for folding rate showed an external correlation coefficient equal to 95.82%; whereas the best model created for structural class discrimination attained 100% of accuracy on the corresponding test. These results are better than the ones attained by existing approaches, justifying the theoretical contribution of this 3D protein structure codification method.

All tensor-based 3D-protein descriptors (fuzzy and non-fuzzy, by applying two- and three- linear algebraic forms) have been implementing in the MuLiMs-MCoMPAs software (acronym for Multi-Linear Maps based on N-Metric & Contact Matrices of 3D-Protein and Amino-Acids Weightings). The MuLiMs-MCoMPAs software, which belongs to the ToMoCoMD-CAMPS suite, was developed in Java (version 1.8) using the Chemistry Development Kit (CDK) (version 1.4.19) and the Jmol libraries. This software implemented a divide and conquer-based strategy to parallelize the computation of the indices as well as modules for data preprocessing and batch computing functionalities. Furthermore, it consists of two components: i) a desktop-graphical interface (GUI) and ii) an API library. Furthermore, as a demonstration of the applicability and easy integration of the MuLiMs library into a QSAR-based expert system, a software application (ProStAF) was generated to predict SCOP protein structural classes and folding rate. It can thus be anticipated that the MuLiMs-MCoMPAs framework will turn into a valuable contribution to the bio-informatics research fields. The obtained results demonstrated that the new proposed 3D biomacro-molecular indices perform better than other approaches in the SCOP-based discrimination and the prediction offolding rate of proteins by using simple linear parametrical models. It can be concluded that the proposed method allows the definition of 3D biomacro- molecular descriptors that contain orthogonal information capable of providing better models for applications in protein science. Thus, the fuzzy spherically truncated-based & non-fuzzy counterpart MDs from MuLiMs-MCoMPAs (<http://tomocomd.com/mulims-mcompas>) are promising alignment-free predictors for modeling protein functions and properties.

Acknowledgments: Yovani Marrero-Ponce (M-P, Y) thanks to the program Profesor invitado for a post-doctoral fellowship to work at Valencia University in 2020. M-P, Y acknowledges the support from USFQ “Chancellor Grant 2020 (Project ID16885)”".



PCB03

Machine Learning Artificial Intelligence and RNA

Dr. Michael Gribskov

The advantages and disadvantages of machine learning and artificial intelligence are currently the topic of wide debate in both scientific and social contexts. In addition to well known successes in speech and handwriting recognition, language translation, facial recognition and automatic driving, machine learning has recently achieved stunning success in protein structure prediction. Nevertheless, applications of machine learning in molecular biology suffer from serious limitations, and we often cannot apply methods similar to the highly sophisticated approaches mentioned above.

Indeed, for many problems, the very complicated models that have attracted so much attention may be less appropriate than simpler machine learning approaches. I will specifically discuss two of our recent projects in which we apply machine learning approaches to the study of internal ribosome entry sites (IRES), and to the identification of translated short open reading frames (sORFs). Both of these methods are very successful suggesting that great progress can be made in spite of the difficulties we face in molecular biology.



PCB04

Transcriptome assembly from short-read RNA-Seq in non-model organisms

Dr. Sergio Marchant¹

¹ Laboratorio de Fisiología, Genómica y Transcriptómica, Grupo CINBIN, Escuela de Biología, Universidad Industrial de Santander, Carrera 27 – Calle 9, Ciudad Universitaria, Bucaramanga.

After a decade since the development of high throughput RNA-sequencing (RNA-seq), this method has become part of the toolkit utilized by the life sciences research community. Despite the high implementation of the method, there is still no optimal bioinformatic pipeline available to overcome biases introduced by experimental design and data analyses algorithms. Therefore, this conference aims to offer an updated overview of RNA-seq library construction, transcript reconstruction methods, transcriptome quality assessment, expression quantification, differential expression analysis, and functional annotation strategies and serve as a potentially helpful guideline for future RNA-seq projects. To showcase the applications and opportunities of RNA-seq in non-model species, the results associated with the transcriptome assembly from the marine gooseneck barnacle (*Pollicipes elegans*) from the Tropical Eastern Pacific, and a velvet worm (*Onychophora*, *Peripatidae*) from the mountains of Santander, Colombia, will be presented as case studies.



PCB05

Evolución experimental de secuencias aleatorias en E. coli para entender como nacen los genes
Dr. Rafik Neme

El nacimiento de genes es un proceso evolutivo que implica adquirir una nueva función en la célula a partir de una secuencia que anteriormente no existía. Por mucho tiempo se asumió que este proceso no existía, particularmente por la enorme cantidad de ejemplos de innovación a partir de genes duplicados o recombinados. Sin embargo, las últimas dos décadas de trabajo en genómica comparativa han dado paso a ideas más amplias sobre la innovación desde secuencias no génicas. Sin embargo, muchas de esas ideas vienen de la observación y comparación de casos que existen en la naturaleza hace millones de años, por lo cual aproximaciones experimentales son necesarias para entender mejor este proceso.

Hemos diseñado un sistema de evolución experimental en el que, usando técnicas básicas de microbiología y ADN recombinante, podemos rastrear en una población de Escherichia coli, el destino y efecto de secuencias de ADN sintetizado aleatoriamente. Al determinar si el efecto es beneficioso, neutro o deletéreo sobre las células, nos aproximamos a un espectro de efectos esperados que dan idea acerca de cuáles son los retos y ventajas que un nuevo gen tiene en un ambiente celular.



PCB06

Proteómica de Fitofarmacos
Dr. Italo Cesari



Estrategias de mitigación en la acumulación de cadmio en sistemas productivos de cacao

Dra. Esperanza Torres

El cadmio es un metal pesado que se puede encontrar en suelos agrícolas debido a causas geogénicas y antropogénicas. Debido a la toxicidad de este metal sobre las comunidades microbianas, las plantas y los seres humanos es importante generar estrategias de mitigación que disminuyan la acumulación de cadmio por parte del cultivo de cacao.

Con base en el diagnóstico de la presencia de cadmio en suelos cacaoteros del municipio de Yacopí-Cundinamarca se identificaron lotes productivos con alta y baja concentración de Cd, se caracterizó la diversidad estructural y funcional de las comunidades microbianas asociadas al cultivo y se determinó el efecto que pueden tener la inoculación de micorrizas arbusculares en la fisiología y disminución de la toma de cadmio por parte de la planta de cacao bajo condiciones de invernadero.

Resultados y conclusiones

Se encontró que hay una gran variabilidad espacial de la presencia de cadmio en los suelos cacaoteros estudiados y su presencia afecta la diversidad microbiana presente asociada al cultivo. Concentraciones altas de cadmio favorece el crecimiento de morfotipos de bacterias y hongos con capacidad para tolerar cadmio y degradar celulosa, solubilizar fosfatos o fijar nitrógeno libre (bacterias). En total se aislaron y caracterizaron 30 bacterias con capacidad de tolerar cadmio, en donde los géneros *Burkholderia* y *Pseudomonas* presentaron una mayor tolerancia. Se evidenció, a partir de los 43 hongos aislados, que el cadmio también afecta la morfología y crecimiento fúngico, dependiendo el genotipo. En cuanto a su alta capacidad de biocumulación y remoción Cd, sobresalieron los morfotipos *P. igniaria*, *Metarhizium* sp., and *Annulohyphoxylon* sp. La abundancia, riqueza y diversidad de micorrizas arbusculares nativas también disminuyó y al utilizarse como inóculo en plantas de cacao bajo condiciones de invernadero, se incrementó el crecimiento y se redujo la acumulación de Cd en hojas dependiendo del genotipo del patrón utilizado.

Referencias:

Meter, A., Atkinson, R.J., Laliberte, B., 2019. Cadmium in Cacao from Latin America and the Caribbean: A Review of Research and Potential Mitigation Solutions. Rome (Italy): Bioersivity International 73 p. <https://hdl.handle.net/10568/102353>

Rodríguez Albarrcín HS, Darghan Contreras AE, Henao MC. Spatial regression modeling of soils with high cadmium content in a cocoa producing area of Central Colombia. *Geoderma Reg.* 2019;15:e00214. <https://doi.org/10.1016/j.geodrs.2019.e00214>.

Sandoval-pineda, J.F., Pérez-moncada, U.A., Rodriguez, A., Torres-rojas, E., 2020. High cadmium concentration resulted in low arbuscular mycorrhizal fungi community diversity associated to cocoa (*Theobroma cacao* L.). *Acta Biol. Colomb.* 25(3), 333–344. <https://doi.org/10.15446/abc.v25n3.78746>

Instituciones financiadoras

Esta investigación fue financiada por la gobernación de Cundinamarca (Contracto No. 2) en el marco del proyecto del acuerdo del corredor Agroindustrial tecnológico (No. 395 - 2012), Colciencias (Jóvenes investigadores) y la División de Investigación de la Sede Bogotá de la Universidad Nacional



de Colombia (Proyectos 42156,); y cuenta con el permiso de colección (MAVDT 0255, Marzo 14, 2014)

PCB08

The role of technology transfer in product development and innovation
NATAŠA SKOKO, PHD

ICGEB, Biotechnology Development Unit, TRIESTE, ITALY

Technology Transfer (TT) has been identified as a mean of enabling local pharmaceutical production, promoting innovation, building capacity, and improving medicines access (WHA resolution). TT can accelerate acquisition of knowledge and experience of pharmaceutical product and process necessary to build a strong local pharma sector. Therefore it may decrease reliance on imports, raise quality, raise competence of local workforce and to accelerate the product availability at more affordable price. Biopharmaceuticals are one of the fastest growing segments of the pharmaceutical industry. However, the cost of them has often been prohibitive, thereby limiting their use, particularly in developing countries. The expiration of the patents for many biologics has ushered in an era of products that are designed to be ‘similar’ to an originator product. Worldwide, the development of biosimilars has contributed to reduce the cost of biologics compared to the originators by up to 50%. Our vision at ICGEB is that biologics, with sustainable technologies and local productions, should be available and affordable to each person that needs treatment. The ICGEB team established technology transfer packages for the production of a dozen of biologics, such as filgrastim, erythropoietin, growth hormone and insulins, covering the most comprehensive breadth of activities in bioprocessing such as upstream, downstream operations and QC analysis. Our team is engaged in multiple trainings and transfer of know-how to industry. Availability of this kind of scientific support in the ICGEB represents a significant incentive for the development of biosimilars locally and internationally. Our TT model ensures that technological developments are accessible to a wider range of users who can then further develop and exploit the technology into new products, processes and applications.



PCB09

Neosporosis protozoario y zoonosis
Dra. Nelitza Marelys Linárez Álvarez



XVIII COLACRO



X COCOCRO

SPAE
II SIMPOSIO PANAMERICANO DE
ACEITES ESENCIALES



COMUNICACIONES ORALES



COMUNICACIONES ORALES XVIII COLACRO

ILRCO-139

Fungal Volatile Organic Compounds of *Trichoderma* spp.: A novel biocontrol strategy against *Trialeurodes vaporariorum* and *Fusarium oxysporum* f. sp. *lycopersici* in tomato plants.

Sandra Ramírez,^{1,2} Diana Sinuco,² Sandra Aragón.^{1*}

¹ Colombian Corporation for Agricultural Research - Agrosavia, Mosquera, Colombia.

² Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá., Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Carrera 30 # 45-03, Bogotá D.C., 111321, Colombia.

*dcsinucol@unal.edu.co

key-words: VOCs, Biocontrol activity, Tomato

Abstract

New formulations of biopesticides that solve two or more plant health problems is increasing [1,2]. Therefore, the potential of fungal metabolites with the ability to manage diverse crop pests is getting more scientific interest. Nevertheless, the effect of the Volatile Organic Compounds (VOCs) emitted by *Trichoderma* spp. on the simultaneous management of plant pathogens and insect pests has been only rarely addressed. In this research, we have studied the biocontrol activity of the VOCs emitted by fifteen isolates of *Trichoderma* spp. against two major pests of tomato crops in Colombia: the plant pathogen *Fusarium oxysporum* f. sp. *lycopersici* (Fo159) and the greenhouse whitefly *Trialeurodes vaporariorum*. The VOCs profile of selected strains was tentatively identified by GC-MS.

Method

The *in vitro* radial growth of FoL59 was measured by a double plate technique [3] where two Petri plates, one with *Trichoderma* spp. and other with the pathogen were placed one over the other and after ten days of interaction at 25°C, the inhibition rate was registered. Selected strains were assessed *in planta* by exposing the roots of tomato seedling to the VOCs emitted by *Trichoderma* spp. in a sealed environment for 21 days. The progress and severity of the disease was registered. Finally, the same seven strains were evaluated for insect oviposition management, by allowing a 48 hours interaction between the plant roots and the fungal VOCs, after that, 20 couples of *T. vaporariorum* were confined in a clipcage and let to lay eggs during 48 hours. The number of eggs per treatment was registered and the oviposition preference index calculated.

Results and conclusions

Antifungal activity was suggested for those assays with a growth inhibition higher than 35%. Thus, seven strains showed above 35% inhibition rates of the pathogen on *in vitro* conditions: Th004 (46,1%), M44 (45,8%), Th035(40,5%), Th019(39,8%), Th007 (39,4%), 3T(39,0%) and M45 (37,1%). While, for *in planta* experiments, the strain Th035 showed a significant difference compared to control plants, reducing by 31,0% the severity of Fo159. The VOCs from those strains were identified by chromatographic criteria (linear retention index) and mass spectrum comparison with those obtained from literature or reference compounds. Twenty-six VOCs were identified and quantified as relative percentage. 1-octanol was produced only by M45 and Th007 strains. 6-pentyl-2H-pyran-2-one was identified as the major compounds for 3T, Th035 and Th019. 2-methylbutyl acetate was only emitted by M44 strain. 5-ethyl-2,4-dimethyl-4-hept-3-one was only detected in VOCs from Th004 while 1-methylbutanol was quantified as the major compound. 3-octanone was the major VOC for M45 and Th007.

References

- [1] Sinuco León, D., Coconubo Guio, L.C., Castellanos, L. (2020). Fungicidal activity of volatile organic compounds from *Paenibacillus* bacteria against *Colletotrichum gloeosporioides*. *Revista Colombiana de Química*, 49(1), 20-25.
- [2] Sinuco León, D., Pérez Cortés, A., Moreno Sarmiento, N. (2017). Evaluación de la actividad fungicida e identificación de compuestos orgánicos volátiles liberados por *Trichoderma viride*. *Revista Colombiana de Biotecnología*, 19(1), 63-70.
- [3] Chen, J.-L., Sun, S.-Z., Miao, C.-P., et al (2016). Endophytic *Trichoderma gamsii* YIM PH30019: a promising biocontrol agent with hyperosmolar, mycoparasitism, and antagonistic activities of induced volatile organic compounds on root-rot pathogenic fungi of *Panax notoginseng*. *Journal of Ginseng Research*, 40(4), 315-324.



ILRCO-167

Self-nanoemulsifying drug delivery system (snedds) of *Passiflora ligularis* leaves extract: development and hypoglycemic effect

Sandra Milena Echeverry González, Diana Marcela Aragón Novoa.*

Universidad Nacional de Colombia

*dmaragonn@unal.edu.co

Key-Words: SNEDDS *Passiflora ligularis* hypoglycemic

Introduction

SNEDDS are homogeneous, isotropic and thermodynamically stable nano-emulsion (o/w) 1. Recently, SNEDDS natural products-loaded have been developed. The hypoglycemic effect of extracts from *P. ligularis* leaves has been proved in vitro and in vivo models. The flavonoids present in this species are considered the responsible compounds of this pharmacological activity 2,3.

Methods

The extract optimized in the content of flavonoids was obtained by ultrasound-assisted extraction. The solubility of extract was determined in different vehicles to select the excipients of the formulation. Box Behnken design was employed to develop of SNEEDS. Finally, the hypoglycemic effect was evaluated through glucose tolerance test in mice.

Results and conclusions

According to experimental design, 27 treatment were analyzed using Minitab® software. Response surface methodology was employed to determine the composition SNEDDS with minimum droplet size possible used a surfactant percentage of less than 45%. The parameters PDI and zeta potential were also characterized. Analysis of variance indicated that the linear model was highly significant ($p < 0.001$). Oil, surfactant and, co-solvent content and its interactions were statistically significant. Also, different percentages of extract loaded were evaluated on the characteristics of the self-nanoemulsifying system. Droplet size was increased by the incorporation of extract in the SNEDDS, while zeta potential and PDI were not modified significantly. So, 30% of the extract was incorporated in the SEDDS. In the final formulation was measured a 63.21 ± 2.65 nm droplet size, PDI 0.401 ± 0.0 and zeta potential -12.00 ± 0.29 . Finally, the glucose tolerance test showed that SEDDS prevented the increase of blood glucose levels after oral glucose overload.

References

- [1] Chavda, V. P.; Shah, D. Self-Emulsifying delivery systems: One step ahead in improving solubility of poorly soluble drugs. Ed.; Elsevier, 2017. p. 653-718.
- [2] Monzón Daza, J. G. Estudio metabólico de hojas de *Passiflora ligularis* Juss y su relación con la actividad inhibitoria sobre α -amilasa y α -glucosidasa. Tesis de Maestría. Universidad Nacional de Colombia, 2019.
- [3] Sepúlveda, P.; Echeverry, S. M.; Costa, G. M.; Aragón, D. M. *Passiflora ligularis* leaves ultrasound-assisted extraction in the optimization of flavonoid content and enhancement of hypoglycemic activity. J. Appl. Pharm. Sci.



ILRCO-514

Development and validation of UHPLC-UV bioanalytical method for plasma determination of rutin and its major metabolites: application to pharmacokinetic study after administration of *Physalis peruviana* calyces extract in rats

Gina Paola Domínguez Moré,^{1,2} María Isabel Cardona,¹ Paula Michelle Sepúlveda,¹ Sandra Milena Echeverry,¹ Cláudia Maria Oliveira Simões,³ Diana Marcela Aragón.^{1*}

¹Departamento de Farmacia, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia;

²Centro de Servicios Farmacéuticos y Monitoreo de Fármacos, Facultad de Química y Farmacia, Universidad del Atlántico, Puerto Colombia, Colombia;

³Programa de Pós-Graduação em Farmácia, Universidade Federal de Santa Catarina—UFSC, Florianópolis, Brazil.

*ginadominguez@mail.uniatlantico.edu.co.

key-words: bioanalytical-method validation rutin pharmacokinetics

Introduction

Rutin, the marker of a hydroalcoholic extract of calyces from *Physalis peruviana* L. (HEE), could be deglycosylated and conjugated with glucuronic acid or sulfate in the gut. We have developed and validated a bioanalytical method for quantification of rutin and its metabolites for pharmacokinetic study of the extract in rats.

Methods

Plasma containing rutin and quercetin conjugates were added with chrysin, treated with glucuronidase/arylsulfatase, and proteins were precipitated with methanol. Rutin and quercetin were quantified by UHPLC-UV and validation parameters from FDA guidance were determined. Method was applied to a pharmacokinetic study after oral and intravenous administration of HEE in rats.

Results and conclusions

The final conditions for UHPLC-UV method were: column C18 (2.6 µm, 100 x 2.1 mm), oven at 30 °C, detector at 260 nm, mobile phase with 0.1% formic acid in water and in acetonitrile, using gradient from 75% to 65% of aqueous phase during 9.3 min at 0.5 mL/min. The method was selective and specific for rutin, quercetin and the internal standard chrysin. Accuracy, precision, dilution (factor 20) and chemical stability of the analytes, met the FDA criteria (recovery ≥ 85.6%, variation coefficient ≤ 7.2%), at the concentration range of 100- 10,000 ng/mL. The area under the curve of rutin after intravenous administration of HEE in rats (n=5) at doses range of 250-1000 mg/kg was proportional to the doses and there was not differences in volume of distribution and clearance among doses. From oral experiments, only quercetin was detected and its parameters at 1000 mg/kg did not correspond to linear pharmacokinetic.

References

- [1] Toro, R. M.; Aragón, D. M.; Ospina, L. F.; Ramos, F. A.; Castellanos, L. Phytochemical Analysis, Antioxidant and Anti-Inflammatory Activity of Calyces from *Physalis Peruviana*. Nat. Prod. Commun. 2014, 9 (11), 1–3.
- [2] FDA/CDER. Guidance for Industry Bioanalytical Method Validation Guidance for Industry Bioanalytical Method Validation; 2018.
- [3] Domínguez-Moré, G. P.; Cardona, M.I.; Sepúlveda, P. M.; Echeverry, S. M.; Oliveira-Simoes, C. M.; Aragón, D. M. Matrix Effects of the hydroethanolic extract of calyces of *Physalis peruviana* L. on rutin pharmacokinetics in Wistar rats using population modeling. Pharmaceutics 2021, 13 (535). <https://doi.org/10.3390/pharmaceutics13040535>.



ILRCO-705

Open tubular liquid chromatography in 25 μm i.d PS-DVB column directly coupled to electron ionization mass spectrometry (OT-LC-EI-MS)

Deyber Arley Vargas Medinaa, Juliana Soares da Silva Buratoa, João Victor Basolli Borsattoa, Fernando Mauro Lançasa.*

University of São Paulo, São Carlos institute of Chemistry 13560-970 São Carlos, SP, Brazil

*flancas@iqsc.usp.br

key-words: nanoLC, OT-LC, MS, EI

Introduction

A 25 μm i.d PS-DVB porous layer open tubular column was prepared and assessed in the configuration of an OT-LC-EI-MS system by direct insertion of the column end into the ionization source. The operational parameters of the developed system were comprehensively studied.

Methods

A nanoLC and GC-MS instruments were integrated connecting a 25 μm i.d PS-DVB OT-LC column, from the injection valve to the EI source, through the GC-MS interface. For column-switching configuration, a Dionex Acclaim® PrepMap extraction/pre-concentration column was coupled using a 6-way switching valve and a micro loading pump.

Results and conclusions

The operational parameters of the OTLC-EI-MS system were comprehensively studied, employing both unidimensional and bi-dimensional LC configurations. The OTLC-EI-MS system demonstrated competitive applicability in the analysis of non-amendable ESI compounds, such as polyaromatic hydrocarbons (PAHs) and non-amendable GC compounds, such as thermolabile pesticides. The direct insertion of the OT column into the EI-MS source avoided the use of additional interfacing technologies and provided a system with zero dead volume of detection. The OT column offered alternative chemistry and differentiated separation mechanisms, enabling the use of more favorable EI conditions (such as the use of water-free mobile phase). Finally, the integration of the nanoLC and GC-EI-MS instruments allowed the exploration of temperature programming in nanoLC.

References

- [1] Famiglioni, G. et al. The History of Electron Ionization in LC-MS, from the Early Days to Modern Technologies: A Review. *Anal. Chim. Acta* 2021, 1167. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2021.338350>.
- [2] Vargas Medina, D. A. et al. An Overview of Open Tubular Liquid Chromatography with a Focus on the Coupling with Mass Spectrometry for the Analysis of Small Molecules. *J. Chromatogr. A* 2021, 1641, 461989. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2021.461989>.
- [3] Termopoli, V. et al. Evaluation of a Liquid Electron Ionization Liquid Chromatography–Mass Spectrometry Interface. *J. Chromatogr. A* 2019, 1591, 120–130. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2019.01.034>.



ILRCO-710

A simple method for simultaneous analysis of cannabinoids, including THC metabolites in human urine by packed in-tube SPME-LC-MS/MS

Douglas Morisue Sartore,* Álvaro José dos Santos-Neto.

São Carlos Institute of Chemistry, University of São Paulo

*douglas.sartore@usp.br

key-words: Cannabinoids; packed in-tube SPME

Introduction

Cannabinoids are pharmacologically active compounds, present in the cannabis plants, which have become important research topics in the modern toxicological and medical research fields. Not only cannabis is the most used drug in the world [1], but also, the cannabinoids have an on growing use for the treatment of a series of diseases.

Methods

A new packed in-tube SPME method for the automated extraction/preconcentration of Δ^9 - tetrahydrocannabinol, 11-hydroxy- Δ^9 -tetrahydrocannabinol, 11-nor- Δ^9 -tetrahydrocannabinol-9-carboxylic acid, 11-nor- Δ^9 -tetrahydrocannabinol-9-carboxylic acid glucuronide conjugate, cannabidiol, cannabinol and tetrahydrocannabivarin from human urine was developed. In-tube SPME used 508 μm i.d. x 50 mm stainless- steel hardware and analytes' simultaneous detection and quantification was performed via LC-MS/MS.

Results and conclusions

Packed in-tube SPME spent only 12 mg of C18 commercial phase (15-25 μm particle diameter). Different sorbents were evaluated, a fractional factorial design was used for variables screening and the selection of the best conditions was performed by a central composite design of significant variables. The developed method demonstrated to be a simple, fast and cheap approach. Sample consumption was inferior to 250 μL of urine, no hydrolysis was required, sample pre-treatment included dilution and centrifugation (8 min). The on-line extraction/preconcentration and chromatographic run (including sample loading and clean-up, analytes elution, chromatographic separation, detection, columns cleaning and reconditioning), took another 12 minutes, with a total analysis time of 20 minutes per sample. At this moment, a partial validation is being conducted; moreover, the method will be applied for the analysis of 20 unknown urine samples. Further details of validation and unknown samples analysis, will be discussed in the poster presentation.

References

[1] United Nations Office on Drugs and Crime. Drug Market Trends: Cannabis and Opioids; 2021.



SLRCO-6

Clasificación de semillas de Cacao (*Theobroma cacao* L.) de un banco de germoplasma ubicado en Campoalegre-Huila (Colombia), usando análisis quimiométrico con enfoque multivariado.

Jennifer Tatiana Cruz Bolívar,^{1*} Wilson Rodríguez Pérez,¹ Juan Carlos Suárez Salazar,² Claudia Mercedes Ordoñez Espinosa.³

¹Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química. Sede Principal Cll 17 Diag 17 Cra 3F Barrio Porvenir. Florencia – Caquetá, Colombia.

²Universidad de la Amazonia, Facultad de Ingeniería, Programa Ingeniería Agroecológica. Sede Principal Cll 17 Diag 17 Cra 3F Barrio Porvenir. Florencia - Caquetá. Colombia.

³Líder de Investigación, Tecnoparque Agroindustrial Angostura, Campo Alegre, Huila.

tati_cruz_26@hotmail.com

Palabras Claves: CG-EM, grasa, conglomerados

Introducción

Estudios recientes han demostrado que entre las variables físicas y químicas, los ácidos grasos como el palmítico, el oleico y esteárico permiten una mejor correlación de agrupación quimiométrica (1). El objetivo fue establecer agrupaciones de semillas de cacao de un banco de germoplasma de Campoalegre Huila (Colombia).

Métodos

Cromatografía de gases de alta resolución acoplado a espectrometría de masas, análisis multivariado (componentes principales-análisis discriminante-análisis de conglomerados); usando infostat.

Resultados y Conclusiones

El perfil cromatográfico de ésteres metílicos de ácidos grasos de lípidos totales de semillas de cacao estuvo comprendido por una mezcla de 15 compuestos. Todos los ácidos grasos fueron analizados mediante análisis multivariado (componentes principales-análisis discriminante-análisis de conglomerados). Los ácidos grasos que contribuyeron a explicar la variación total fueron: el ácido palmítico, oleico, estérico, gondoico y erucico. El mejor grupo de accesiones de Cacao lo compone el Grupo A; caracterizado por presentar los mayores contenidos de Oleico y Estearico, Nuestros análisis revelan que los clones que reposan en el banco de germoplasma del municipio de Campoalegre (Huila), permiten la identificación de al menos cuatro grupos diversos de árboles, con características químicas (contenido de ácidos grasos) diferenciadas, lo que se convierte en una oportunidad para la mejora y sustitución de cultivos en la zona de acuerdo con las necesidades de la industria.

Referencias

- [1] de Almeida, C. M. V. C., Facundo, V. A., Brazil, H. O. B., dos Santos Dias, L. A., Medeiros, J. R. P., & Costa, J. L. A. (2008). Diversity of cacao fat in germplasm from Rondônia, Brazil. *Crop Breeding and Applied Biotechnology*, 8(2).
- [2] Vázquez-Ovando, A., Molina-Freaner, F., Nuñez-Farfán, J., Betancur-Ancona, D., & Salvador-Figueroa, M. (2015). Classification of cacao beans (*Theobroma cacao* L.) of southern Mexico based on chemometric analysis with multivariate approach. *European Food Research and Technology*, 240(6), 1117-1128.



SLRCO-28

Desarrollo, validación y aplicación de un método analítico para la cuantificación de contaminantes emergentes en bagre rayado *Pseudoplatystoma magdaleniatum*, por QUECHERS UPLC – MS / MS.

Sara E. Gallego-Ríos,* Sylvia M. Cacua O., Natalia Zapata G., Gustavo A. Peñuela

Universidad de Antioquia

*sara.gallego@udea.edu.co

Palabras Claves: UPLC-MS/MS Pez QuEChERS PPCPs

Introducción

El bagre rayado *P. magdaleniatum* es una especie endémica de Colombia, actualmente en peligro crítico de extinción, debido a la sobrepesca y la contaminación de su hábitat. Los ríos donde habita el bagre rayado son sumideros de productos farmacéuticos y de cuidado personal (PPCPs), para los cuales no hay actualmente regulación.

Métodos

Se desarrolló un método simple, sensible y selectivo para la detección múltiples residuos en tejidos en bagre rayado *Pseudoplatystoma magdaleniatum*, utilizando QuEChERS UPLC – MS / MS, obteniendo límites de cuantificación desde 20 µg/kg, aplicado en muestras reales para el monitoreo de contaminantes emergentes en peces.

Resultados y Conclusiones

Las muestras reales fueron recolectadas del río Cauca y Magdalena en tres temporadas climáticas durante dos años, las cuales se encontró que en metilparabeno en diferentes épocas climáticas y sitios de muestreo, en algunos peces tenían una concentración promedio fue 28.35 µg/kg, así mismo en triclosán con 43.57 µg/kg y para carbamazepina únicamente en el Cauca una temporada climática con un promedio de 67.89 µg/kg, para ibuprofeno y diclofenaco estaban por debajo del límite de cuantificación 20 µg/kg para en todas las temporadas y sitios. El presente método permitió alcanzar límites de cuantificación bajos, demostrando ser un método simple, rápido y preciso basado en QuEChERS -UPLC-MS / MS para la determinación simultánea de la presencia de PPCPs en bagre rayado. El método desarrollado se utilizó con éxito para analizar muestras reales de bagre rayado recolectadas en los ríos Cauca y Magdalena ubicados en Colombia.

References

- [1] Tiedeken, E. J.; Tahar, A.; McHugh, B.; Rowan, N. J. Monitoring, Sources, Receptors, and Control Measures for Three European Union Watch List Substances of Emerging Concern in Receiving Waters – A 20 Year Systematic Review. *Sci. Total Environ.* 2017, 574, 1140–1163.
- [2] Petrović, M.; Škrbić, B.; Živančev, J.; Ferrando-Climent, L.; Barcelo, D. Determination of 81 Pharmaceutical Drugs by High Performance Liquid Chromatography Coupled to Mass Spectrometry with Hybrid Triple Quadrupole-Linear Ion Trap in Different Types of Water in Serbia. *Sci. Total Environ.* 2014, 468–469, 415– 428.



Implementación de una metodología analítica basada en la Espectroscopia de Infrarrojo por Transformada de Fourier (FTIR) para el análisis de insaturación de ácidos grasos en semillas de cacao comercial.

Cruz J. T.,^{1*} Carvajal J. S.,² Rodríguez W.,¹ Aparez J.,³ Arango R. A.⁴

¹Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química. Sede Principal Cll 17 Diag 17 Cra 3F Barrio Porvenir. Florencia – Caquetá, Colombia.

²Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Biología. Sede Principal Cll 17 Diag 17 Cra 3F Barrio Porvenir. Florencia - Caquetá. Colombia.

³ Universidad de Nariño, Facultad de Ciencias Agrícolas, Programa de Ingeniería Agroforestal. Ciudadela Universitaria Torbajo.

⁴Sena Centro Agroindustrial Regional Quindío. Avenida centenario 44 Norte 02.

*cruzjennifertatiana@gmail.com

Palabras Claves: ATR, doble enlace, metileno.

Introducción

En términos de calidad industrial, los principales indicadores en cacao se determinan tradicionalmente por vía húmeda usando métodos costosos, laboriosos, pretatamiento de muestras, entre otros. Para resolver el problema se propone implementar técnicas no destructivas como el FTIR ATR y contribuir con el desarrollo de la química analítica verde.

Métodos

1. Extracción de manteca: soxhleth, solvente (n-hexano)
2. Transesterificación de lípidos totales: oC, 360 rpm, KOH ,M/MeOH, h y proporción grasa:metanol 1:4
3. CG-EM: columna DB 5% de fenilmetilsiloxano.
4. FTIR-ATR: En un rango de -cm-, detector: DTGS KBr, divisor de haz: KBr. 5. Relación CG y FTIR.

Resultados y Conclusiones

Se realizó el análisis de insaturaciones presentes en ácidos grasos de manteca de semillas de cacao comercial mediante CG-EM y FTIR-ATR, los resultados obtenidos demuestran que es posible realizar análisis de insaturaciones usando la relación (doble enlace/grupos metileno), ya que estos están relacionados con el peso molecular promedio de los ácidos grasos presentes en la grasa. Se concluye que tanto el análisis por CG como el espectro IR indicó que el ácido graso insaturado principal en manteca de cacao comercial es el ácido oleico. Además, fue posible identificar un ácido graso inusual como el ácido ,-epoxiestearico, común para plantas oleaginosas de diferentes especies, pero reportado por primera vez para semillas de cacao. Finalmente podemos concluir con un nivel de confianza del 95%, que no existe diferencia estadísticamente significativa para el análisis de insaturaciones usando la técnica ART-FTIR con relación al método tradicional (CG) en manteca de cacao comercial.

Referencias

- [1] Derawi, D., & Salimon, J. Optimization on epoxidation of palm olein by using performic acid. Journal of Chemistry, 2010, 7(4), 1440-1448.
- [2] Hu, X., Toyoda, K., Yamanoue, M., Ihara, I., & Nakai, K. Evaluation of fatty acid profile of Wagyu beef by ATR-FTIR spectroscopy. Food and bioprocess technology. 2010, 3(6), 883-891.
- [3] Hernández-Martínez, M., Gallardo-Velázquez, T., & Osorio-Revilla, G. Rapid characterization and identification of fatty acids in margarines using horizontal attenuate total reectance Fourier transform infrared spectroscopy (HATR-FTIR). European Food Research and Technology. 2010, 231(2), 321-329.



SLRCO-131

Estudio de nuevas lectinas del veneno del pez león, *Pterois volitans* de la costa de Santa Marta, Colombia

Ángel Pérez Bravo,^{1*} Edgar Reyes Montaña,¹ Gerardo Corzo Burguete,² Nohora Vega Castro.^{1*}

¹Universidad Nacional de Colombia, [Departamento de Química], Carrera 45 # 26-85, Bogotá D.C., Colombia

²Universidad Nacional Autónoma de México, [Departamento de Medicina Molecular y Bioprocesos], Instituto de Biotecnología, Cuernavaca, Morelos, México.

*anaperezbr@unal.edu.co, navegac@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Lectina, veneno, *Pterois volitans*

Introducción

El estudio de las lectinas a partir de organismos marinos es muy escaso, en el veneno de peces, se han caracterizado; Nattectina de *Thalassophryne nattereri*, Karatoxina de *Hypodytes rubripinnis* y Plumieribectina de *Scorpaena plumieri* específicas por manosa. Estas proteínas tienen efectos mitogénicos, citotóxicos, insecticidas y antimicrobianos entre otros.

Métodos

Mediante diferentes métodos, que incluyeron cromatografía hidrofóbica y de afinidad, se obtuvo fracciones de lectina pura a partir del extracto activo. En cada uno de los pasos de aislamiento, se cuantificó y detectó la actividad aglutinante. Se llevaron a cabo ensayos de inhibición, título, citotoxicidad y determinaron sus propiedades moleculares.

Resultados y conclusiones

En el extracto activo del veneno se detectó por primera vez la presencia de lectinas empleando eritrocitos de conejo. Por medio de métodos cromatográficos principalmente de afinidad sobre manosa, se obtuvo fracciones de lectina que interactuaron con eritrocitos de conejo y caballo, en una concentración de 8 ng/μL. La actividad aglutinante fue inhibida por α-D-metil-manopiranosido, y es glicosilada al ser retenida por afinidad con Concanavalina A-Sepharose 4B, lo que indica que el oligosacárido es rico en manosa y similar al encontrado en lectinas de plantas. Por SDS PAGE la lectina presentó una banda mayoritaria alrededor de 36 kDa, y dos minoritarias de bajo peso molecular. Los resultados obtenidos hasta el momento muestran una cercanía evolutiva con lectinas de plantas, las cuales tienen actividad antiproliferativa. Por primera vez, se encontró la presencia de estas proteínas en el veneno del pez león, *Pterois volitans*.

Referencias

- [1] Nakagawa, H.; Nagasaka, K.; Sakai, H.; Edo, K.; Shinohara, M.; Ohura, K. Isolation of a novel lectin from the dorsal spines of the devil stinger, *Inimicus japonicus*. *Int. Aquat. Res.* 2015, 7 (2), 143–150. <https://doi.org/10.1007/s40071-015-0101-2>.
- [2] Kato, K.; Nakagawa, H.; Shinohara, M.; Ohura, K. Purification of a novel lectin from the dorsal spines of the stonefish, *Synanceia verrucosa*. *J. Osaka Dent. Univ.* 2016, 50 (2), 55–61.



SLRCO-141

Aplicación de la técnica extracción por dispersión de matriz en fase sólida para la determinación de pesticidas en sedimentos por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas tándem, GC-MS/MS.

Elizabeth González M.,* Nelson O. Vargas M.,* Yolanda González H.

Instituto de Hidrología, Meteorología y Estudios Ambientales – IDEAM, Bogotá D.C. Colombia

*egonzalezm@ideam.gov.co, nvargas@ideam.gov.co

Palabras Claves: MSPD, Cromatografía, Espectrometría, sedimentos

Introducción

Un método ambientalmente amigable para la determinación de pesticidas en sedimentos fue desarrollado y validado mediante el uso de extracción y dispersión de matriz en fase sólida (MSPD) con Florisil como agente dispersante, y el análisis por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas tándem (GC-QqQ).

Métodos

Dispersión de matriz en fase sólida (MSPD)

Cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas tándem (GC-QqQ)

Resultados y Conclusiones

El método demostró ser selectivo, preciso y exacto para la mayoría de compuestos, el rango de porcentaje de recuperación fue de 71 a 106 %, el coeficiente de variación fue menor a 20 % para la mayoría de compuestos y las curvas de calibración mostraron un coeficiente de correlación por encima de 0,966. La metodología de análisis fue aplicada para determinar pesticidas en muestras de sedimento provenientes del río Subachoque, Cundinamarca (Colombia), los resultados muestran que la extracción por MSPD y análisis por GC-QqQ son una alternativa de análisis válida y eficaz para determinar pesticidas en sedimentos.

Referencias

- [1] Łozowicka, B.; Jankowska, M.; Rutkowska, E.; Kaczyński, P.; Hrynko, I. Pol. J. Environ. Stud. V. 21(4), p. 973 – 992, 2012.
[2] Cela, R., Pena, M., Casais, M. And Mejuto, M. Anal. Chim. Acta, V. 626, p. 155- 165, 2008.



Validación de la metodología de análisis para la cuantificación del contenido de TFA residual por HPLC-DAD en un lote del péptido polivalente LfcinB (20-25), candidato a fármaco para el tratamiento del cáncer de mama

Kevin Huertas,^{1*} Diego Insuasty,¹ Karla Rodríguez,² Darcy Junca,² María Moreno,¹ Ivonne González,³ Javier García,² Zuly Rivera.¹

¹Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

²Departamento de Farmacia, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia

³Instituto Nacional de Metrología de Colombia, Bogotá, Colombia

*kahuertaso@unal.edu.co

Palabras clave: Lactoferricina bovina, TFA residual, HPLC-DAD, Validación.

Introducción

Según la OMS, el cáncer de mama es el más incidente en mujeres (685.000 muertes reportadas en 2020). En la búsqueda de nuevas alternativas terapéuticas, péptidos derivados de la LfcinB han tenido resultados promisorios. Dentro de la caracterización fisicoquímica de este tipo de moléculas, la guía FDA-CDER, resalta que se requiere analizar el TFA residual (contraíón) para un péptido candidato a fármaco.

Métodos

La evaluación del contenido de TFA residual en péptidos se realizó mediante HPLC, usando una columna C18 con end capping polar (Phenomenex Synergi Hydro-RP, 80 Å, 4 µm, 4.6 x 150 mm) y un equipo Hitachi Primaide con detector DAD. La detección fue a 190 nm como fase móvil se empleó un Buffer de pH 2.5 (KH₂PO₄-H₂PO₄) y Acetonitrilo (solvente B), inyección 20 µL, flujo 1,0 mL/min.

Resultados y conclusiones

En este estudio, se validó una metodología de análisis por HPLC para el análisis de TFA residual en un lote del péptido tetramérico LfcinB (20-25), siguiendo la guía de la USP capítulo <1225>. Se encontró que el péptido contiene 16% de TFA en peso. El resultado se comparó con otros péptidos con y sin residuos de Arg, Lys o His y se encontró que aquellos péptidos que tienen residuos básicos tienen mayor contenido de TFA. A concentraciones cercanas a 10 mg de TFA/mL se evidenció una fuerte asimetría del pico (tailing, por esta razón se recomienda usar bajas concentraciones de TFA para tener una mejor integración. La metodología cumplió con los requerimientos de validación de la USP, haciendo la técnica robusta, selectiva, exacta y precisa.

Referencias

- [1] Information, C. Guidance for Industry for the Submission of Chemistry, Manufacturing, and Controls Information for Synthetic Peptide Substances. 1994, No. November.
- [2] The United States Pharmacopeia. USP 43; 2021; Chapter <503.1>, <1225>.
- [3] Johnson, M.; Liu, M.; Struble, E.; Hettiarachchi, K. Characterization of Cyclic Peptides Containing Disulfide Bonds. J. Pharm. Biomed. Anal. 2015, 109, 112–120. <https://doi.org/10.1016/j.jpba.2015.01.009>.



SLRSCO-174

Clasificación de semillas de Cacao (*Theobroma cacao L.*) de un banco de germoplasma ubicado en Campoalegre-Huila (Colombia), usando análisis quimiométrico con enfoque multivariado.

Jennifer Cruz,¹ Wilson Rodríguez,¹ Juan Carlos Suarez,¹ Claudia Ordoñez.²

¹Universidad de la Amazonia

²Tecnoparque Agroindustrial Angostura

*j.cruz@udla.edu.co

Palabras Claves: ácidos grasos, quimiometría, germoplasma.

Introducción

La composición de ácidos grasos se analiza comúnmente utilizando CG-EM (Seppänen-Laakso et al., 2002). Se ha demostrado que las variables físicas y químicas, aportan poca información discriminante para el estudio de clasificación de semillas, mientras que los ácidos grasos permiten una mejor correlación de agrupación quimiométrica (Vázquez-Ovando, et al. 2015).

Métodos

63 semillas pertenecientes a accesiones de cacao del banco de germoplasma de Campoalegre (Huila), fueron analizadas por CGAR-EM, la identificación de AG se llevó a cabo teniendo en cuenta valores ECL y el estándar de EMAG, el análisis quimiométrico se realizó con softwares InfoStat y R (R Core Team, 2017).

Resultados y Conclusiones

Los ácidos grasos mayoritarios en las semillas de cacao analizadas fueron: ácido Palmítico (20,23%), oleico (30,16%) y esteárico (33,19%). Se detectó un alto contenido de ácido linoleico (4,79%) comparado con otras latitudes y además se registró un ácido graso poco común: el ácido 9,10-epoxioestearico (1,83%). Se obtuvo cuatro agrupaciones de semillas de Cacao, y se determinó que los ácidos grasos que más contribuyeron a la clasificación fueron el ácido palmítico, oleico, linoleico, erúxico y gondoico, y que el mejor grupo de accesiones de Cacao lo compone el Grupo A; caracterizado por presentar los mayores contenidos de Oleico y esteárico. El análisis presentado permite identificar una gran diversidad de clones de Cacao que reposan en el banco de germoplasma del municipio de Campoalegre Huila, conformando cuatro grupos homogéneos mediante el análisis quimiométrico y multivariado.

Referencias

- [1] Dabbou, S., Chaieb, I., Rjiba, I., Issaoui, M., Echbili, A., Nakbi, A., ... & Hammami, M. (2012). Multivariate data analysis of fatty acid content in the classification of olive oils developed through controlled crossbreeding. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 89(4), 667-674.
- [2] Vázquez-Ovando, A., Molina-Freaner, F., Nuñez-Farfán, J., Betancur-Ancona, D., & Salvador-Figueroa, M. (2015). Classification of cacao beans (*Theobroma cacao L.*) of southern Mexico based on chemometric analysis with multivariate approach. *European Food Research and Technology*, 240(6), 1117-1128.



SLRSCO-175

Determinación de trihalometanos y ácidos haloacéticos en agua de piscina por Cromatografía de Gases- μ ECD.

Olga Vallejo-Vargas,^{1,2,3} William Hernández-Herrera,^{1,2} Carlos Montoya-Navarrete,^{1,3} Leonardo Beltrán-Angarita.^{1,4,5,*}

¹Grupo de Estudio del Recurso Hídrico, Escuela de Química, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.

²Maestría en Ciencias Químicas, Escuela de Química, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.

³Laboratorio de Análisis de Aguas y Alimentos, Escuela de Química, Universidad Tecnológica de Pereira, Colombia.

⁴Facultad Ciencias de la Salud, Unidad Central del Valle del Cauca, Colombia

⁵Facultad de Medicina, Fundación Universitaria de las Américas, Colombia

*lbltran@utp.edu.co

Palabras Claves: Trihalometanos; Ácidos Haloacéticos; Cromatografía de Gases; Piscinas; subproducto desinfección.

Introducción

Límites máximos de THM's entre 20-100 μ g/L han sido establecidos, Colombia no cuenta con regulación al respecto [1,2]. Nos propusimos estandarizar un método para la determinación de THM's y HAA's en aguas de piscinas utilizando HS-SPME-GC- μ ECD y establecer los niveles base de THM's y HAA's en aguas de piscinas.

Métodos

Parámetros como tiempo de adsorción, temperatura de adsorción-desorción, agitación y adición de NaCl, fueron estudiados. Curvas de calibración en el rango de 5-200 μ g/L, precisión intermedia y límites de detección-cuantificación fueron evaluadas. Se analizaron 25 muestras de agua de piscinas (n=3) durante los meses de agosto-noviembre de 2020,

Resultados y Conclusiones

Las condiciones optimizadas fueron 20 min de extracción a 37 °C con 25% de NaCl y agitación de 200 rpm, con tiempo de desorción de 4 min a 250 °C. El rango lineal determinado fue de 5-200 mg/L con una %RSD en el rango 3,4-9,1 %. El promedio de la concentración de THM's y HAA's encontrada fue de 41,61 \pm 21,5 μ g/L y 12675 \pm 7320 μ g/L; respectivamente. Los compuestos con mayores niveles fueron cloroformo (21,5 \pm 5 μ g/L), ácido tricloroacético (7188 \pm 2670 μ g/L) y ácido bromocloroacético (5296 \pm 3661 μ g/L). Las concentraciones encontradas en las muestras evaluadas indican la necesidad de realizar más estudios para prevenir su formación y la posible incorporación de un límite máximo permitido en la normatividad nacional, se encontró un alto nivel de ácidos haloacéticos a pesar del no ingreso de los nadadores a las piscinas, lo cual ha sido reportado previamente en piscinas de la ciudad de Medellín.

Referencias

- [1] World Health Organization, "Guidelines for safe recreational water environments: Volume2. Swimming pools and similar environments," WHO Libr., vol. 2, p. 146, 2006.
- [2] Carter, R.A.A.; Joll, C.A. Occurrence and formation of disinfection by-products in the swimming pool environment: A critical review. J. Environ. Sci. 2017, 58, 19–50H.
- [3] Lara, P.; Ramírez, V.; Castrillón, F.; Peñuela, G.A. Presence of Disinfection Byproducts in Public Swimming Pools in Medellín, Colombia. Int. J. Environ. Res. Public Health 2020, 17, 4659. <https://doi.org/10.3390/ijerph17134659>.



Desarrollo y validación de un método para la cuantificación de ácidos grasos (FAMES) en productos alimenticios por la técnica de Cromatografía de Gases

Vanessa Katterine Fierro Moreno,¹ Diego Ahumada,² Laura Morales,² Ivonne Gonzáles,² Diana Cristina Sinuco.¹

¹Universidad Nacional de Colombia

²Instituto Nacional de Metrología

*vkfierrom@unal.edu.co

Palabras Claves: Cromatografía de gases, FAMES.

Introducción

Los ácidos grasos son el principal componente de los lípidos y desempeñan un papel crucial en los sistemas biológicos. Por lo tanto, es de vital importancia contar con métodos analíticos cualitativos y cuantitativos para analizar estos compuestos en diferentes matrices alimentarias.

Métodos

Se implementará y seleccionará el método para la determinación del contenido de ácidos grasos por cromatografía de gases, por medio de la evaluación de la resolución de las señales cromatográficas y asimetría. Los parámetros de desempeño del método de medición que se evaluarán serán selectividad, linealidad, precisión y sesgo.

Resultados y Conclusiones

Método analítico validado para la cuantificación de ácidos grasos por cromatografía de gases GC-FID y GC-MSD en productos alimenticios con su declaración de la validez de aptitud para el uso previsto.

Referencias

- [1] Jacobs, M.B. 1965. The Chemical Analysis of Foods and Food Products. Second edition. New York, USA. Editorial D. Van Nostrand Co. Inc., pp. 2.
- [2] Gonzales, J. D. M. (2020). Determinación del contenido de ácidos grasos cis, trans, saturados, monoinsaturados y poliinsaturados en snacks mediante cromatografía de gases.
- [3] Currie, L.A. 1995. Nomenclature in evaluation of analytical methods including detection and quantification capabilities. IUPAC Recommendations. Pure and Applied Chemistry, 67,1699-1723.
- [4] EMEA – European Medicines Agency. 1995. ICH Topic Q 2 (R1) Validation of Analytical Procedures: Text and Methodology.



SLRICO-206

Desarrollo y validación de una metodología para la determinación de metilmercurio (MeHg) en pescado mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GCMS)

Diego Alexander Garzón Zuluaga,^{1,2*} Diego Alejandro Ahumada Forigua,¹ Elianna Castillo Serna.²

¹Grupo de Investigación en Metrología Química y Bioanálisis, Subdirección de Metrología Química y Biología. Instituto Nacional de Metrología de Colombia (INM), Bogotá D.C. Colombia

²Grupo de estudios para la remediación y mitigación de impactos negativos al ambiente (GERMINA), Departamento de Química. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C. Colombia

*dagarzon@inm.gov.co

Palabras claves: Cromatografía de gases, metilmercurio (MeHg), espectrometría de masas, validación

Introducción

El mercurio es un contaminante tóxico, presente en la biota y es considerado un problema ambiental. En la actualidad, no sólo se requiere medir el mercurio total, sino determinar las diferentes especies en las que se encuentra, donde el MeHg es la de mayor interés.

Métodos

Esta medición implica retos en etapas de preparación y medición por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas, la cual es posiblemente la técnica más empleada. En este contexto, se desarrolló y validó un método para la cuantificación de MeHg mediante extracción alcalina, derivatización y posterior cuantificación por GC-MS.

Resultados y Conclusiones

El método desarrollado fue validado evaluando parámetros de desempeño como veracidad, precisión, selectividad y linealidad. Los iones monitoreados fueron 246 m/z, 245 m/z y 260 m/z. Durante el desarrollo del método se identificó que la influencia del pH y la solución tampón son críticas y que pueden favorecer la interconversión de especies. La concentración del agente derivatizante influye en la recuperación, con desempeños óptimos a concentraciones superiores al 1.5% de NaB(Et)₃. En la validación del método se encontró que éste es selectivo, se obtuvieron porcentajes de recuperación entre 95% y el 105% con coeficientes de variación inferiores al 10%; se cuenta con un intervalo lineal entre 30 a 450 µgkg⁻¹, concluyendo que el método es apto para su uso previsto. Finalmente, se implementó el método de dilución isotópica con microextracción en fase sólida en el método desarrollado determinando qué puede ser potencialmente primario y usado para caracterizar materiales de referencia.

Referencias

- [1] Donard, O. F. X.; Caruso, J. A. Trace Metal and Metalloid Species Determination: Evolution and Trends. Spectrochim. Acta Part B At. Spectrosc. 1998, 53 (2), 157–163.
- [2] Feldmann, J.; Elgazali, A.; Ezzeldin, M. F.; Gajdosechova, Z.; Krupp, E.; Aborode, F.; Lawan, M. M.; Raab, A.; Petersdottir, A. H.; Amayo, K. Microwave-Assisted Sample Preparation for Element Speciation. In Microwave-Assisted Sample Preparation for Trace Element Analysis; Elsevier, 2014; pp 281–312.
- [3] Yang, L.; Et.al. Application of Isotope Dilution to the Determination of Methylmercury in Fish Tissue by Solid-Phase Microextraction Gas Chromatography–Mass Spectrometry. J. Chromatogr. A 2003, 1011 (1–2), 135–142.



SLRCO-208

Determinación de los coeficientes de partición de cannabinoides principales en diferentes sistemas de solventes usados en Cromatografía De Partición Centrifugal (CPC)

Ada Gallo,* Luis Buelvas.

Clever Leaves

*ada.gallo@cleverleaves.com**Palabras Claves:** Cannabinoides remediación THC, CBD

Introducción

La cromatografía de partición centrifugal es una técnica de separación que tiene un alto consumo de solventes pero una muy baja pérdida de muestra en el proceso. La CPC se ha venido usando con éxito en la industria de Cannabis medicinal para reducir los contenidos de THC de ciertos productos.

Métodos

1. Selección con base en la teoría del sistema bifásico apropiado.
2. Pruebas de tubo para evidenciar la partición de los biocompuestos en las dos fases.
3. Cálculo de la constante de partición del THC y el CBD
4. Prueba del mejor sistema de solventes, cálculo de rendimiento y resolución.

Resultados y Conclusiones

El sistema de solventes usado fue Heptano/Etanol y Agua, se probaron 6 proporciones diferentes que suponen composiciones específicas de las fases móvil y fase estacionaria. Con la proporción 1 se obtuvieron buenas resoluciones entre la fracción 2 y 8 con rendimientos entre el 70 y 75% , con contenidos de CBD de entre el 75 y 79% y de THC entre 0,11 y 0,19%. Al usar Heptano rectificado el contenido de THC se vio menos remediado, llegó a estar entre 0,2 y 0,23 % con un contenido de CBD entre el 70 y 75% y un rendimiento global del 65% para la fracción rica en CBD. Al evaluar el modo ascendente se obtuvieron fracciones libres de THC con tan solo un 62-67% de CBD y un THC entre 0,25 y 0,3% de THC.

Referencias

- [1] Z. Yang, P. Guo, R. Han, D. Wu, J. M. Gao, and S. Wu, "Methanol linear gradient counter-current chromatography for the separation of natural products: *Sinopodophyllum hexandrum* as samples," *J. Chromatogr. A*, vol. 1603, 251–261, 2019
- [2] J. R. Popp et al., "Rapid isolation of acidic cannabinoids from *Cannabis sativa* L. using pH-zone-refining centrifugal partition chromatography," *J. Chromatogr. A*, vol. 1599, pp. 196–202, 2019
- [3] A. Hazekamp, R. Simons, A. Peltenburg-Looman, M. Sengers, R. Van Zweden, and R. Verpoorte, "Preparative isolation of cannabinoids from *Cannabis sativa* by centrifugal partition chromatography," *J. Liq. Chromatogr. Relat. Technol.*, vol. 27, no. 15, pp. 2421–2439, 2004



Monitoreo de hidrocarburos aromáticos policíclicos en el Parque Nacional Natural los Nevados mediante muestreadores pasivos y líquenes como bioindicadores de la calidad del aire en lugares remotos de gran altitud

Milton Rosero Moreano,¹ Gustavo Sánchez Duque,² Beatriz Aristizabal Zuluaga,² Daniel Toro Castaño,¹ Marco Tadeu Grassi.³

¹Universidad de Caldas

²Universidad Nacional sede Manizales

³Universidad Federal de Paraná - Brasil

Palabra clave: SPME; HAPs; GC-MS; líquenes

Introducción

El análisis químico de sustancias orgánicas tóxicas en el ambiente es una tarea de alta complejidad, debido a que se requiere el uso de equipos de muestreo y análisis químicos de altos costos. Una técnica útil y complementaria en estos casos suele ser el uso de bioindicadores de contaminación.

Metodología

El método desarrollado para el análisis de HAPs a partir de líquenes recolectados en el PNNN fue la tecnología híbrida RDSE-SPME (microextracción por sorción con disco rotatorio acoplado a microextracción en fase sólida), es un método analítico verde de extracción, luego se procede a su separación e identificación mediante GC-MS

Resultados y Conclusiones

Se determinaron exitosamente los niveles de 16 HAPs en PUF y líquenes en el Parque Natural Nacional los Nevados, entre abril de 2019 y marzo de 2020 en diferentes sectores y en una zona periurbana de Manizales con un importante impacto industrial.

Las concentraciones de $\Sigma 16$ PAHs en muestras de aire oscilaron entre 0.200 y 3.3 $\mu\text{g m}^{-3}$, siendo el fluoranteno y el fenantreno los hidrocarburos predominantes. La mayor concentración de HAPs se encontró en la estación de monitoreo Potosí (cerca de la carretera y con dedicación a cultivos de papa). Las concentraciones de HAPs en líquenes variaron entre 0.23 y 5.4 $\mu\text{g g}^{-1}$.

Cuando se compararon ambos métodos de seguimiento, se encontró una correlación lineal positiva para compuestos de 3 y 5 anillos. Estos resultados sugieren que los líquenes pueden usarse para monitorear los HAPs en fase gaseosa, proporcionando datos que pueden ser cuantitativamente traducidos a equivalentes de aire.

Referencias

- [1] C. Domeño, M. Blasco, C. Sánchez, and C. Nerín, "A fast extraction technique for extracting polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) from lichens samples used as biomonitors of air pollution: Dynamic sonication versus other methods," *Anal. Chim. Acta*, vol. 569, no. 1–2, pp. 103–112, 2006.
- [2] E. Sanderson, "Comparison of particulate polycyclic aromatic hydrocarbon profiles in different regions of Canada," *Atmos. Environ.*, vol. 38, no. 21, pp. 3417–3429, Jul. 2004.
- [3] J. Namieśnik, B. Zabiegała, A. Kot-Wasik, M. Partyka, and A. Wasik, "Passive sampling and/or extraction techniques in environmental analysis: a review," *Anal. Bioanal. Chem.*, vol. 381, no. 2, pp. 279–301, Jan. 2005.



SLRSCO-268

Evaluación del efecto benéfico de *Berberis microphylla* G.Forst (Calafate) utilizando un modelo murino de dieta alta grasas y una estrategia analítica metabolómica basada en UHPLC-QTOF

Lia Olivares-Caro,^{1,2} Daniela Mennickent,¹ Daniela Nova,¹ Claudia Radojkovic,² Luis Bustamante,¹ Claudia

Mardones.^{1*}

¹Departamento de Análisis instrumental, Facultad de Farmacia, Universidad de Concepción, Concepción, Chile;

²Departamento de Bioquímica Clínica e inmunología, Facultad de Farmacia, Universidad de Concepción, Concepción, Chile

*liaolivares@udec.cl

Palabras clave: *Berberis microphylla*, enfermedad-cardiovascular, metabolómica

Introducción

Los polifenoles son sustancias bioactivas que participarían en la prevención de enfermedades crónicas, un alto contenido de ellos se ha descrito en *Berberis microphylla* [1]. El objetivo del presente estudio fue evaluar el efecto benéfico de este fruto mediante el cambio en el metaboloma plasmático de ratones, posterior a su consumo.

Métodos

Se obtuvo un extracto etanólico de calafate mediante extracción sólido-líquido, caracterizado por HPLC-DAD-QTOF, el cual fue administrado en agua a ratones C57BL/67 con dieta normal o dieta alta en grasas.

Extractos metanólicos del plasma murino fueron analizados por UHPLC-DAD-QTOF, la data fue procesada por los softwares MetaboScape y MetaboAnalyst.

Resultados y conclusiones

Los resultados mostraron una separación de los distintos grupos utilizando métodos exploratorios (PCA). El ANOVA realizado entregó 26 features significativos (metabolitos biomarcadores) para las muestras analizadas. Ya se han identificado gran parte de estos biomarcadores, utilizando databases como HMDB, METFRAG y METLIN (Identificación nivel 2). Dentro de los compuestos identificados se encontraron LysoPC y LysoPE, tromboxano B2, y Cortisona los cuales permiten validar el modelo de estudio, ya que son metabolitos que se han relacionado con enfermedad coronaria, hipertensión y obesidad. Por otra parte, también se han identificado ácido quenodesoxicólico, ácido succínico y carnitinas, los cuales nos han permitido demostrar el efecto protector del calafate frente a la enfermedad cardiovascular. El ácido quenodesoxicólico es un metabolito que se ha relacionado con aterosclerosis [2], y nosotros hemos observado que el consumo de calafate causa una disminución de este metabolito en plasma, relacionándose inversamente con la aterosclerosis clave en la enfermedad cardiovascular.

Referencias

[1] Olivares-Caro, L.; Radojkovic, C.; Chau, S. Y.; Nova, D.; Bustamante, L.; Neira, J. Y.; Perez, A. J.; Mardones, C. *Berberis Microphylla* G. Forst (Calafate) Berry Extract Reduces Oxidative Stress and Lipid Peroxidation of Human LDL. *Antioxidants* 2020, 9 (12), 1–20. <https://doi.org/10.3390/antiox9121171>.

[2] Oh, H. A.; Lee, H.; Park, S. yeon; Lim, Y.; Kwon, O.; Kim, J. Y.; Kim, D.; Jung, B. H. Analysis of Plasma Metabolic Profiling and Evaluation of the Effect of the Intake of *Angelica Keiskei* Using Metabolomics and Lipidomics. *J. Ethnopharmacol.* 2019, 243 (March), 112058. <https://doi.org/10.1016/j.jep.2019.112058>.



Caracterización de una infusión de hoja de calafate (*B. microphylla*) y estudio sobre su potencial uso como alimento funcional

D. Nova,^{1*} L. Olivares-Caro,¹ A. Vallejos,¹ C. Radojkovic,² L. Bustamante,¹ C. Mardones,¹

¹Departamento de Análisis instrumental, Facultad de Farmacia Universidad de Concepción, Concepción, Chile

²Departamento de Bioquímica Clínica, Facultad de Farmacia, Universidad de Concepción, Concepción, Chile

*daninova@udec.cl

Palabras clave: *Berberis microphylla*, (poli)fenoles, enzimas

Introducción

Berberis microphylla es una planta perenne endémica de la Patagonia. Diversos estudios en el fruto muestran altas concentraciones de compuestos bioactivos, especialmente (poli)fenoles [1,2]. En sus hojas solo se ha estudiado la presencia de alcaloides. En este trabajo caracterizamos y evaluamos la hoja para determinar su potencial como bebida funcional.

Metodología

La Caracterización y concentración de (poli)fenoles y alcaloides en hojas e infusión de calafate se realizó mediante HPLC-DAD-ESI-MS/MS. En la infusión se midió: contenido total de polifenoles (PT) por Folin-cicalteau; capacidad antioxidante, mediante CUPRAC, ABTS y ORAC FL; ensayos de actividad enzimática “*in vitro*” y toxicidad “*in vivo*” en células HUVECs.

Resultados y conclusiones

La infusión de hojas de calafate presentó un perfil similar al extracto metanólico en el análisis HPLC-DAD-ESI/MS. Una alta capacidad antioxidante de la infusión medido a través de ensayos CUPRAC, ORAC-FL y ABTS se correlacionaron con el contenido de polifenoles totales ($153,7 \pm 23,3 \mu\text{mol g/PS}$). La actividad de α -glucosidasa, α -amilasa y lipasa fueron inhibidas por la infusión de hojas de calafate en $64.80 \pm 24.13 \%$, $52.24 \pm 8.77 \%$ y un $76.14 \pm 8.39 \%$ respectivamente. Finalmente, las pruebas de toxicidad de la infusión en células HUVECs dan cuenta que concentraciones bajo $0.83 \mu\text{g PS}/\mu\text{L}$ son seguras para las células. Con estos antecedentes se concluye que las hojas de calafate, consumidas en forma de infusión son bioactivas y su infusión puede ser considerada como un potencial alimento funcional.

Referencias

[1] Ruiz, A.; Mardones, C.; Vergara, C.; Hermosín-Gutiérrez, I.; von Baer, D.; Hinrichsen, P.; Rodríguez, R.; Arribillaga, D.; Domínguez, E. Analysis of Hydroxycinnamic Acids Derivatives in Calafate (*Berberis Microphylla* G. Forst) Berries by Liquid Chromatography with Photodiode Array and Mass Spectrometry Detection. *J. Chromatogr. A* 2013, 1281, 38–45. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2013.01.059>.

[2] Olivares-Caro, L.; Radojkovic, C.; Chau, S. Y.; Nova, D.; Bustamante, L.; Neira, J. Y.; Perez, A. J.; Mardones, C. *Berberis Microphylla* G. Forst (Calafate) Berry Extract Reduces Oxidative Stress and Lipid Peroxidation of Human LDL. *Antioxidants* 2020, 9 (12), 1–20. <https://doi.org/10.3390/antiox9121171>.



MEPS directly coupled to ESI-QqTOF-MS for the simultaneous analysis of tricyclic antidepressants and benzodiazepines in postmortem blood

Carmina Vejar-Vivar,^{1*} Luis Bustamante,¹ Christian Ortega,² Mariela Valenzuela,² Claudia Mardones.¹

¹Department of Instrumental Analysis, Faculty of Pharmacy, University of Concepción, PO Box 160- 6 C, Concepción, Chile.

²Laboratory of the Forensic Medical Service of Chile Servicio Médico Legal, Camino a Penco 4018, 8 Concepción, Chile.

*carminavejar@udec.cl

Key-words: MEPS, postmortem-blood, direct-mass-spectrometry

Introduction

Non-separative methods of analysis are currently of great concern, mainly owing to their speed, efficiency, and suitability for sustainable analysis [1]. The aim of this study is to present a method for the analysis of antidepressants and benzodiazepines in blood using MEPS and its direct elution into an ESI-QqTOF-MS instrument.

Methods

Postmortem blood was protein depleted and extracted by MEPS (C8). The designed system consisted in the direct coupling of the MEPS to the ESI-QqTOF using an infusion pump for elution with 100 μ L of ACN with 0.1% HCOOH. MEPS variables sorbent type and sample pH were studied for optimization.

Results

The developed method was validated using matrix matched calibration for the simultaneous analysis of benzodiazepines and tricyclic antidepressants in postmortem blood samples. LOQs were between 25 and 50 ng/mL for all compounds. Accuracy and precision were evaluated at three concentration levels and expressed in terms of relative error (%RE) and relative standard deviation (%RSD), respectively. Results for both parameters were better than 20% for the lower concentration evaluated and better than 15% for the other two concentration levels. The developed method was used for the analysis of authentic postmortem blood samples to test its applicability in forensic toxicological analysis. This study describes the potential of direct MEPS-ESI-QqTOF in forensic toxicology. The method presented appropriate results for linearity, accuracy, and repeatability [2]. Five real samples were analyzed using the method, which allowed the fast identification and quantification of 4 analytes using 200 μ L of sample and without chromatography, reducing solvent consumption.

References

[1] Casas Ferreira AM, Moreno Cordero B, Pérez Pavón JL. Use of microextraction by packed sorbent directly coupled to an electron ionization single quadrupole mass spectrometer as an alternative for non-separative determinations. *J Chromatogr B*. 2017; 1043:74–80.

[2] O. González, M. E. Blanco, G. Iriarte, L. Bartolomé, M. I. Maguregui, and R. M. Alonso, “Bioanalytical chromatographic method validation according to current regulations, with a special focus on the non-well defined parameters limit of quantification, robustness and matrix effect,” *J. Chromatogr. A*. 2014; 1353: 10–27



Identificación por GC/MS de metabolitos secundarios volátiles, aislados de la especie *Steiractinia aspera* Cuatrec, por técnicas destilativas.

L. Gamboa,^{1*} J. Martínez,² L. Espinoza,¹ E. Stashenko.^{2*}

¹Avenida España 1680, Laboratorio de Productos Naturales y Síntesis, Departamento de Química, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, Chile – 2 Carrera 27 calle 9 edificio C-45,

²Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas, Escuela de Química, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

*laura.gamboa@sansano.usm.cl, – elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: metabolitos secundarios, *Steiractinia aspera*.

Introducción

Los metabolitos secundarios de las plantas pertenecen a tres grupos según sus orígenes biosintéticos: terpenos, compuestos fenólicos y compuestos nitrogenados, los cuales cumplen funciones de defensa contra predadores y patógenos [1].

Métodos

Los metabolitos secundarios volátiles, presentes en la especie *Steiractinia aspera* Cuatrec, se aislaron mediante hidrodestilación asistida por microondas (MWHd) y mediante destilación-extracción simultánea con solvente (SDE) [2]. La identificación de los compuestos se realizó por GC/MS, usando columnas capilares de sílice fundida, con fases estacionarias apolar (DB-5MS) y polar (DB-WAX).

Resultados y conclusiones

Los resultados se analizaron con base en los espectros de masas, bases de datos e índices de retención lineales, los cuales se calcularon teniendo en cuenta los tiempos de retención de patrones de n-parafinas C8-C25 analizados bajo las mismas condiciones operacionales [3]. La técnica SDE, es un método de extracción a escala pequeña, donde se empleó material vegetal (MV) fresco de hojas, flores y partes aéreas de la especie en estudio. En la MWHd, se empleó MV fresco de hojas y partes aéreas. Los rendimientos de extracción, estuvieron entre 0,027% a 0,052% para la SDE y de 0,017% a 0,040% para la MWHd. La tabla de composición obtenida por GC/MS, fue semejante para ambas técnicas de extractivas. Mediante la técnica SDE, las flores aportaron mayor cantidad de sabineno (25%) y β -pineno (15%) mientras que, con la técnica MWHd, las hojas aportaron mayor cantidad de germacreno D (32%) y (E)-cariofileno (27%).

Referencias

- [1] Ávalos, A. y Pérez, E. Metabolismo secundario de plantas. *Reduca (Biología)* 2009, 2 (3), 119–145.
- [2] Can Başer, K. H.; Buchbauer, G. *Handbook of essential oils: Science, technology, and applications*, second edition; 2015. <https://doi.org/10.1201/b19393>.
- [3] Stashenko, E. E.; Martínez, J. R. Algunos aspectos prácticos para la identificación de analitos por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. *Sci. Chromatogr.* 2010, 2, 29–47.



Análisis del contenido metabólico de los aceites esenciales de *Renealmia cernua* (Zingiberaceae) colectada en la región quindío, obtenidos con y sin tratamiento previo con ultrasonido.

Eunice Ríos V. ¹, Dahiana Peñuela, ² José Leonardo Cano. ³

¹Docente - Grupo Químico de Investigación y Desarrollo ambiental – QIDEA- Universidad del Quindío

²Estudiante - Programa de Química - Universidad Del Quindío

*erios@uniquindio.edu.co

Palabra Claves: Aceite esencial, *Renealmia cernua*, ultrasonido, Zingiberaceae

Introducción

Renealmia (Zingiberaceae) se distribuye en Sur América y cuenta con 85 especies. En el estudio se obtuvieron los aceites esenciales de *Renealmia cernua* por hidrodestilación acoplada a Clevenger asistida por microondas (HDCM) con y sin tratamiento con ultrasonido. Se compararon ambos métodos y el contenido metabólico de los aceites obtenidos.

Metodología

Renealmia cernua fue colectada en Circasia- Quindío (HUQ-037740). Para la HDCM se utilizaron hojas (H), tallos (T) y espigas (E). La sonicación se realizó en un baño ultrasónico Branson a 40 KHz, 145W, por 30 minutos. El análisis de CG-EM se realizó en un equipo SHIMADZU serie QP2010 ultra.

Resultados Y Conclusiones

Los AE de H, T y E de *R. cernua*, se obtuvieron en mayor porcentaje cuando se trataron con US. Las fuerzas mecánicas generadas por la cavitación conducen a un daño en la membrana de la célula, liberando así, mayor cantidad de AE. Los compuestos mayoritarios se detectaron en el AE de T y E utilizando HDCM+US, mientras que en el AE-H se evidenciaron por HDCM. Los monoterpenos oxigenados fueron los mayoritarios en el AE de H, T y E y los sesquiterpenos en H y T, utilizando HDCM+US. Los sesquiterpenos oxigenados se presentaron mayoritariamente por HDCM. En el AE de H y E se identificó al óxido de cariofileno, como compuesto mayoritario, utilizando ambos métodos; en el AE de T, fue el viridiflorol. Este estudio permitió la diferenciación de la composición química del aceite esencial de *Renealmia cernua*, como aporte original a la investigación en este género.

Referencias

[1] Mass PJM. *Renealmia* (Zingiberaceae - Zingiberoideae) Costoideae (Additions) (Zingiberaceae). *Flora Neotropica*, 1997, 18, 1-218.

[2] Vilkuh, K.; Mawson, R.; Simons, L.; & Bates, D. Applications and opportunities for ultrasound-assisted extraction in the food industry - a review. *Innov. Food Sci. Emerg. Technol.* 2008, 9, 161–169.



Herramienta para la detección de biomarcadores volátiles en muestras biológicas para la detección de estados fisiológicos, patológicos, y de intoxicación.

Gonzalo Taborda Ocampo.*

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Departamento de Química, Grupo de investigación de Cromatografía y técnicas afines, Universidad de Caldas.

*gtaborda@ucaldas.edu.co

Palabras clave: Volatilómica, VOCs, Biomarcadores, Metabolitos LA VOLATILÓMICA: UNA PODEROSA H

Introducción

La emisión de sustancias químicas a través del aire, por plantas, animales y seres humanos, denota mecanismos de comunicación química, como la polinización, la defensa a depredadores, la atracción sexual, o manifestaciones de estados fisiológicos o patológicos que se expresan en el aliento o fluidos biológicos como metabolitos respuesta.

Métodos

La volatilómica es en sí una metodología que emplea los avances de varias disciplinas como la Química analítica instrumental, específicamente la Cromatografía de Gases /Masas, la quimiometría y bio-informática, para el análisis y validación de los datos, y la bioquímica y sus plataformas para establecer flujos metabólicos.

Resultados y Conclusiones

Esta área de investigación se perfila, por un lado, como una poderosa herramienta para la detección de biomarcadores de deterioro, de senescencia, de maduración, o indicadores de ataques de patógenos en plantas, por otro lado, para encontrar marcadores o metabolitos respuesta, que indiquen la presencia de fármacos, tóxicos o plaguicidas en fluidos biológicos y la posibilidad de detectar sustancias volátiles presentes en aliento de personas, que indiquen de manera temprana el desarrollo de una enfermedad o un estado fisiológico en progreso.

La volatilómica busca encontrar el vínculo entre las rutas metabólicas que explican procesos metabólicos relacionados con la presencia de agentes externos, como, fármacos, plaguicidas, venenos, o la presencia de patógenos que desencadenan una cascada de reacciones bioquímicas llamado flujómica.

Referencias

- [1] Baena-Pedroza A.M., Londoño-Giraldo L.M., Corpas-Iguaran E.J., & Taborda-Ocampo, G. (2021). Bibliometric study of volatile compounds in commercial fruits of the Solanaceae family. *Brazilian Journal of Food Technology*, 24, e2020132. Epub April 26, 2021.
- [2] Baena-Pedroza A. Londoño-Giraldo L.M., Taborda-Ocampo G. (2020) Volatilome study of the feijoa fruit [Acca sellowiana (O. Berg) Burret.] with headspace solid phase microextraction and gas chromatography coupled with mass spectrometry. *Food Chemistry*, Volume 328, 30 October 2020, 127109.
- [3] Zuluaga M., Melchor J.J., Tabares-Villa F.A., Taborda G., & Sepúlveda-Arias J.C .Metabolite Profiling to Monitor Organochlorine Pesticide Exposure in HepG2 Cell Culture. *Chromatographia* (2016): 79 (17 - 18), 1061–1068.



Identificación y cuantificación de '*Candidatus phytoplasma asteris*' y '*Candidatus phytoplasma fraxini*' en *Exitianus atratus* (Hemiptera: cicadellidae) mediante QPCR Y QPCR multiplex

Aenny Gálvez, Julian Lamilla, Liliana Franco-Lara.*

Facultad de Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Militar Nueva Granada, Km 2 via Cajicá – Zipaquirá, Colombia

*liliana.franco@unimilitar.edu.co

Palabras clave: fitoplasmas, cuantificación-absoluta, cuantificación-relativa

Introducción

Los fitoplasmas son bacterias sin pared celular, transmitidos por insectos, que causan enfermedades en plantas. En la sabana de Bogotá, '*Candidatus Phytoplasma asteris*' y '*Candidatus Phytoplasma fraxini*' son las especies más abundantes, y afectan al menos 11 especies de árboles urbanos, y cultivos de papa y fresa.

Métodos

Se diseñaron iniciadores que amplifican el gen 16SrRNA de '*Ca. P. asteris*' y '*Ca. P. fraxini*', y sondas específicas para cada especie: Cy5.5-asteris-BHQ2 y TEXred-fraxini-BHQ2. Para la estimación relativa se usó el gen 18S (TET-18S-BHQ1) y para la absoluta se usaron como referencia diluciones de concentraciones estándar para cada especie de fitoplasmas.

Resultados y conclusiones

Una vez estandarizada, las dos técnicas se validaron sobre individuos de *Exitianus atratus* adultos, insectos vectores de las dos especies de fitoplasmas, colectados en campo. La concentración de cada especie de fitoplasmas se evaluó por cuantificación absoluta en 8 individuos, 7 infectados con '*Ca. P. asteris*' y uno a '*Ca. P. fraxini*'; el promedio de la concentración mínima fue de 3.58×1003 y máxima de 1.79×1007 copias de ADN. Por cuantificación relativa se evaluaron 14 individuos, 3 infectados con '*Ca. P. fraxini*' y el resto no estaban infectados. Las mediciones arrojaron valores máximos de 11,49 y mínimos de 3,11 ΔCt . En conclusión, los métodos estandarizados permiten diferenciar las dos especies de fitoplasmas en ensayos independientes y multiplex, y estimar su concentración empleando ADN control como o sobre insectos colectados en campo. Estas técnicas permitirán estudiar las interacciones interespecíficas de fitoplasmas de las dos especies en infecciones mixtas. Proyecto IMP-CIAS-3114.

Referencias

- [1] Ikten, C., Ustun, R., Catal, M., Yol, E., & Uzun, B. (2016). Multiplex real-time qPCR assay for simultaneous and sensitive detection of phytoplasmas in sesame plants and insect vectors. *PLoS one*, 11(5), e0155891.
- [2] Perilla-Henao L, Wilson MR, Franco-Lara L, 2016. Leafhoppers *Exitianus atratus* and *Amplicephalus funzaensis* transmit phytoplasmas of groups 16SrI and 16SrVII in Colombia. *Plant Pathology* 65, 1200–1209.
- [3] Perilla-Henao LM, Franco-Lara L, 2014a. Phytoplasma diseases in trees of Bogotá, Colombia: a serious risk for urban in Different Crop Systems Phytoplasmas and phytoplasma disease management: how to reduce their economic impact Edited by Assunta Bertaccini.



COMUNICACIONES ORALES II SPAE

ILQAE-295

Valorizing essential oils and their by-products: *lippia organoides* case study

Julián Arias-Velandia, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko*

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-
MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

*E-mail: elena@tucan.uis.edu.co

key-words: valorization, fractionation, polyphenol-extraction, integral-use.

Introduction

Lippia organoides is a plant whose essential oil (EO) value can be enhanced by increasing phenylpropanoid content, and whose distillation residue still retains flavonoids of biological interest¹. In this work, we modelled the EO fractionation and the extraction of flavonoids from experimental data, to evaluate the benefit of these processes to increase profits.

Methods: We solved and experimentally validated a batch distillation model, which described the separation of EO major constituents. Among the unit operations to extract the residue, we focused on the EtOH-modified supercritical (scCO₂) extraction due to the process capability to control the solvation power and selectivity.

Results and conclusions

The comparison of predicted and experimental data showed that the fractional distillation model could accurately predict the composition of distillation cuts². The potential recovery of post-distillation residues in the joint production of EOs and flavonoids using EtOH-modified scCO₂ extraction was determined. The limits imposed by the phase equilibria of the solute, matrix, and sc-solvent interaction, and the sc-extraction kinetics of flavonoids and oleoresin are topics drawn from the data and discussed in this work³. The work sought to contribute to increasing the competitiveness of the EOs industry by providing relevant decision elements on the technical feasibility of including EO fractionation and sc-extraction as unit operations that complement the secondary metabolite recovery from *L. organoides*.

Referencias

- [1] Optimization of Flavonoids Extraction from *Lippia graveolens* and *Lippia organoides* Chemotypes with Ethanol-Modified Supercritical CO₂ after Steam Distillation. *Ind. Crops Prod.* 2020, 146, 112170.
- [2] Arias, J.; Casas-Orozco, D.; Cáceres-León, A.; Martínez, J.; Stashenko, E.; Villa, A. L. Dynamic Modeling and Experimental Validation of Essential Oils Fractionation: Application for the Production of Phenylpropanoids. *Comput. Chem. Eng.* 2020, 135, 106738.
- [3] Arias, J. Study of the Supercritical Extraction of Flavonoids from Distillation Residues of Phenylpropanoid-Producing Plants, Universidad Industrial de Santander, 2021.



New trends in the valorisation of *Schinus molle* fruit as a source of flavours in foods

D. Giuffrida¹, N. Martínez², Y. Arrieta-Garay³, L. Fariña³, E. Boido³, E. Dellacassa*

¹Dip. B.I.O.M.O.R.F. Sezione SASTAS Polo Annunziata, Messina (ME), Italia

²Laboratorio de Biotecnología de Aromas, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química- UdelaR, Montevideo, Uruguay.

³Area Enología y Biotecnología de Fermentaciones, Departamento de Ciencia y Tecnología de los Alimentos, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química-UdelaR, Montevideo, Uruguay

*edellac@fq.edu.uy

key-words: *Schinus molle*, fruit, flavor, glycosides

Introduction

Schinus molle L. (Anacardiaceae) is an evergreen tree native to South America, introduced into North and South Africa and the Mediterranean region. The chemical composition of the leaves and fruits essential oils have been investigated [1], but the release of glycosylated volatile compounds is presented here for the first time.

Methods

Carotenoids from mature berries during two tears were extracted and analysed according to Giuffrida et al. (2012)[2]. Volatiles and precursors, the latter usually evaluated as aglycons among the bound forms were studied following the experimental conditions reported by Dellacassa et al. (2017) [3].

Results and conclusions

The *S. molle* mature berries are known as an alternative to pepper by their pungency and collected for essential oil production to substitute black pepper in perfumery. The detection of many glycosidically bound volatile compounds in berries should be considered to have a sensory contribution, which might differentiate the volatile profile. For comparison purposes, the essential oil from mature berries obtained by hydrodistillation was also studied. Our results could explain, through the flavour complexity found in both the “free” and glycosylated fractions, the reported traditional use of molle berries as a pepper substitute. The carotenoid content of mature berries was also studied by their nutritional relevance, but also by their role as norisoprenoids precursors [4]. Ten carotenoids were identified by HPLC-MS/MS: lutein, phytoene, β -cryptoxanthin, phytofluene, β -carotene, 9-Z- β -carotene, β -cryptoxanthin-C12:0, β -cryptoxanthin-C14:0, β -cryptoxanthin-C16:0 and lycopene.

Referencias

[1] Giuffrida D., et al Determination of carotenoids and their esters in fruits of sea buckthorn (*Hippophae rhamnoides* L.) by HPLC-DAD-APCI-MS. *Phytochemical Analysis*, 23, 267-273

[2] Giuffrida D. et al. (2020). *Food Res. Int.* 2012, 133, 109103.

[3] Dellacassa E. et al. (Pineapple (*Ananas comosus* L. Merr.) wine production in Angola: characterisation of volatile aroma compounds and yeast native flora. *International Journal of Food Microbiology* 2017, 241, 161- 167.



Diseño y obtención de alcaloides de *amaryllidaceae* con actividad antiviral frente a dengue y zika.

Juan Camilo Aquite Londoño,^{1*} María Francisca Villegas-Torres,¹ Álvaro Barrera Ocampo,¹ Paola A. Caicedo B,¹ Andrés Gonzales.²

¹ Universidad Icesi, Cl. 18 #122-135, Cali, Colombia.

² Universidad de los andes, Cra. 1 #18a-12, Bogotá, Cundinamarca.

*Juan.aquite@correounivalle.edu.co

Palabras clave: *Amaryllidaceae*, alcaloides, licorina, antivirales.

Resumen

La búsqueda de sustancias químicas con potencial antiviral contra virus como Dengue, Zika y SARS- CoV-2 ha tenido un crecimiento vertiginoso en los últimos años, debido principalmente a la aparición de nuevas cepas y a la limitación que tienen las vacunas para generar inmunidad frente a nuevas variantes. Hasta el momento, se han identificado diversos compuestos de origen natural, alcaloides derivados de las plantas de la familia Amaryllidaceae, los cuales son de gran interés porque cuentan con actividad farmacológica; sin embargo, se producen en cantidades reducidas y su rendimiento es bajo. En este trabajo se aislaron los alcaloides de los bulbos y las hojas de la planta *Hymenocallis littoralis*, siendo los más representativos la licorina, anhidrolicorina, 11,12-dehidrolicorina, vittatina y demetilmartidina. Adicionalmente, con la ayuda de estudios de docking molecular se realizaron modificaciones sintéticas sobre el alcaloide mayoritario licorina; esto con el fin de disminuir su citotoxicidad y mantener el efecto antiviral del compuesto base. A partir de esto se obtuvieron 15 derivados, los cuales han sido sometidos a evaluación de la citotoxicidad y actividad frente al virus dengue y zika empleando ensayos *in vitro* con células vero. Asimismo, se diseñó una ruta sintética de siete pasos que simula la biosintética producida por dicha familia de plantas, en la cual se realiza una reacción conocida como *ring-switch* para generar un giro de 180° en uno de los anillos del alcaloide licorina con el fin de obtener una nueva familia de compuestos llamados homolicorina. En este caso se obtuvo el alcaloide hippeastrina, que permite dar paso a una nueva línea de estudio sobre este tipo de alcaloides de baja producción en la naturaleza y que presentan potencial biológico. En este sentido, se espera continuar modificando la licorina con las estrategias planteadas anteriormente para así obtener un mayor número de compuestos que puedan ser evaluados *in vitro* y trasladados a estudios *in vivo*.

Referencias

- [1] Long-Ze Lin, Shu-Fang Hu, Hee-Byung Chai, Thitima Pengsuparp, John M. Pezzuto, Geoffrey A. Cordell, Nijisiri Ruangrunsi. (1995). Lycorine alkaloids from *Hymenocallis littoralis*, *Phytochemistry*, 40 (4), 1295- 1298.
- [2] Chen, D., Cai, J., Cheng, J., Jing, C., Yin, J., Jiang, J., Peng, Z., & Hao, X. (2015). Design, Synthesis and Structure-Activity Relationship Optimization of Lycorine Derivatives for HCV Inhibition. *Scientific Reports*, 5 (September), 1–9
- [3] Giró Mañas C, Paddock VL, Bochet CG, Spivey AC, White AJ, Mann I, Oppolzer W. (2010). Total synthesis of the lycorenine-type amaryllidaceae alkaloid (+/-)-clivonine via a biomimetic ring-switch from a lycorine-type progenitor. *J Am Chem Soc*, 132 (14), 5176-5178.



SLQAE-105

Uso del aceite esencial del matarratón (*glinicidia sepium*) como insecticida en el control biológico de cacao (*theobroma cacao l.*) frente a barrenador (*carmenta foraminis*).

Laura Sofia Ramirez Wilches,* Krislayner Lozano Taboada, Rafael José Tapia Piñeres

Universidad de San Buenaventura

*laura.ramirez@usbctg.edu.co

Palabras Claves: Aceites esenciales extracción destilación

Introducción

En esta investigación se obtuvo aceite esencial de matarratón con el objeto de evaluar su comportamiento como insecticida frente a un insecto que ataca los cultivos de cacao: el barrenador *Carmenta Foraminis*, obteniendo resultados satisfactorios que exhortan a la extracción a gran escala de este aceite.

Métodos

Extracción de aceite por arrastre de vapor

Extracción por destilación con disolventes

Cromatografía líquida

Resultados y Conclusiones

En ese estudio se realizó una caracterización del extracto acuoso del matarratón (*Glinicidia sepium*) mediante técnicas analíticas fisicoquímicas (pH, volatilidad, temperatura, solubilidad en agua, aire y suelo) y realización de análisis cromatográfico, en el cual se identificaron compuestos de alta importancia y efectividad para efectos insecticidas como la cumarina, hexadecanoico, fitol en cantidades representativas. Al exponer muestras de barrenadores (*carmenta Foraminis*) de 2,5 cm a concentraciones de 55,6 ppm hasta 192 ppm, obteniendo tiempos de deceso de los insectos de 20 minutos hasta 38 minutos. Teniendo en cuenta la importancia de la *Glinicidia sepium* en el ciclaje de nutrientes; se concluye que puede ser una estrategia de manejo ambiental el establecimiento incluyendo el Matarratón, lo cual garantizaría una efectiva erradicación de la plaga y también la recuperación ambiental del suelo a un costo muy bajo.

Referencias

- [1] A. D. I. G. Martin, «Obtención de un extracto plaguicida de *Glinicidia sepium* (Jaq.) Steud bajo la irradiación con microondas,» *Revista Cubana de Plantas Medicinales*, vol. 8, no 3, 2003.
- [2] A. Cacao, «Manejo Integrado del Barrenador del Cacao (*Theobroma cacao*),» Salvador, 2017. J. Mujica, «medidas para prevenir y disminuir el daño de barrenadores del mazorqueo de cacao,» *Norte de santander*, 2012.
- [3] O. P. Y. Sanchez, «planta metabolitos secundarios como alternativa en el manejo de plagas,» *Revista de Protección Vegetal*, vol. 8, no 2, 2013.



SLQAE-302

Efecto de las condiciones de destilación por arrastre con vapor sobre el rendimiento y la composición del aceite esencial de *Lippia origanoides* (verbenaceae)

Karen J. Ramírez¹, Arlex Chaves², Jairo R. Martínez¹, Elena E. Stashenko^{1*}

¹Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander (UIS).

²Laboratorio de Reología y Magnetorreología, UIS.

*elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Lippia origanoides*, aceite esencial, destilación, GC/MS.

Introducción

Lippia origanoides es una planta de la familia Verbenaceae, de hojas lanceadas y grandes, flores blancas, tallos redondos y altamente ramificados, distribuida en Centro y Sur América. En la industria avícola, su aceite esencial (AE) se utiliza como alternativa a los antibióticos convencionales, por su alto contenido de timol y carvacrol (1).

Métodos

El material vegetal cultivado en las parcelas experimentales de CENIVAM y su producto derivado, AE, fueron proveídos por el Estado Colombiano, a través del Ministerio del Medio Ambiente y Desarrollo Sostenible: Contrato de acceso a recursos energéticos y productos derivados con fines de bioprospección N°270-UIS. AE se obtuvo del material seco por destilación por arrastre con vapor.

Resultados y conclusiones

Los efectos del tamaño de partícula, la densidad de carga y el flujo de vapor sobre la respuesta combinada, rendimiento y composición del AE, se evaluaron mediante el análisis de varianza (ANOVA). La composición del AE se representó por la relación carvacrol: timol. Solo el tamaño de partícula tuvo un efecto significativo sobre la respuesta combinada y el rendimiento más alto fue 0,97%, pero menor que el reportado por otros autores sobre la misma especie (2). El AE se analizó por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC/MS) y cromatografía de gases con detector de ionización por llama (GC/FID). La composición del AE fue similar a la reportada por Stashenko *et al.* (3). Carvacrol (23-31%), timol (18- 25%), *trans*- β -cariofileno (6-12%) y *p*-cimeno (3-6%) fueron los compuestos mayoritarios.

Referencias

- [1] Azevedo, I.; Martins, E.; Almeida, A.; Nogueira, D.; Faria Filho, D.; Fonseca, D. Essential oils as growth promoters in broiler chicken. In Essential oils; Peters, M. Eds.; Nova: New York, 2016, 153-166.
- [2] Arango, O.; Bolaños, F.; Villota, O.; Hurtado, A.; Toro, I. Optimization of yield and thymol content of wild oregano essential oil obtained by steam distillation process. *Biotechnol. Sector Agropecuario Agroind.* 2012, 10(2), 217-226.
- [3] Stashenko, E.; Martínez, J.; Ruíz, C.; Arias, G.; Durán, C.; Salgar, W.; Cala, M. *Lippia origanoides* chemotype differentiation based on essential oil GC-MS and principal component analysis. *J. Sep. Sci.* 2010, 33,93-103.



SLQAE-303

Estudio del aceite esencial obtenido de partes aéreas de *Ocimum campechianum* cultivada en Colombia.

Josafat Tarazona,¹ Cristian A. Oliveros,¹ Jairo R. Martínez,¹ Elena E. Stashenko.*²

¹Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

*elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Ocimum campechianum*, capacidad antioxidante, aceite esencial, GC/MS.

Introducción

O. campechianum, conocida como albahaca de clavo, es una hierba aromática de la familia Lamiaceae. De esta especie, se han reportado cuatro quimiotipos, según su componente mayoritario: eugenol, metileugenol, linalol y 1,8-cineol. El aceite esencial (AE) se utiliza en cosmética y contra afecciones relacionadas con la oxidación celular, con base en su potencial antioxidante (1-3).

Métodos

Los AE de *O. campechianum* fueron aislados de material vegetal fresco y seco por la técnica de hidrodestilación asistida por microondas (MWH), se obtuvieron rendimientos de 0,37% y 0,38% respectivamente; de igual forma, se aisló por separado el AE de partes aéreas como flores (rendimiento 0,25%) y hojas (rendimiento 0,63%).

Resultados y conclusiones

Los AE se caracterizaron mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. Se identificaron 31 compuestos (área relativa de GC > 0,1%), de los cuales eugenol (38±2,1%), 1,8-cineol (18±1,2%), (*E*)-β-cariofileno (6,4±0,1%), β-selineno (8,8±0,6%) y germacreno D (4,3±0,2%), fueron los compuestos mayoritarios. La cuantificación por GC/FID mostró los siguientes contenidos de eugenol en diferentes partes de la planta: flores (430±30 mg/g AE) y hojas (400±20 mg/g AE). El contenido de 1,8-cineol fue mayor en hojas (143±7 mg/g AE) que en flores (111±9 mg/g AE). Adefegha *et al.*, demostraron que la capacidad antioxidante del AE de *O. campechianum* mayor que la del BHA (1,68 μmol TEAC / g), y está relacionada con el contenido alto de eugenol (2,58 μmol TEAC/g) (2-3).

Referencias

- [1] Ruiz, J.; Morales, D.; Ramírez, G.; Acevedo, J.; Peña, L. α-Glucosidase inhibitory activity and in vivo antihyperglycemic effect of secondary metabolites from the leaf infusion of *Ocimum campechianum* Mill. *J. Ethnopharmacol.*, 2019, 243, 1-7.
- [2] Adefegha, S.; Okeke, B.; Oboh, G. Antioxidant properties of eugenol, butylated hydroxyanisole, and butylated hydroxyl toluene with key biomolecules relevant to Alzheimer's diseases-In vitro. *J. Food Biochem.*, 2021, 45, 1-7.
- [3] Caamal, I.; Muñoz, D., Madera, T.; Azamar, J. Identification of volatile compounds in essential oil and extracts of *Ocimum micranthum* wild leaves using GC/MS. *Int. J. Appl. Res. Nat. Prod.*, 2016, 9, 31-40.



SLQAE-304

Rendimiento y composición química del aceite esencial de pachulí, según la parte de la planta, hidrólisis ácida y tiempo de destilación

Cristian A. Oliveros,¹ Jairo R. Martínez,¹ Elena E. Stashenko.^{1*}

¹Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

*elena@tucan.uis.edu.co

Palabras Claves: Pachulí, aceite esencial, GC/MS.

Introducción

Pachulí (*Pogostemon cablin*) es una planta introducida y promisoría para el fortalecimiento de la bioeconomía de Colombia. Su aceite esencial (AE) tiene una alta demanda para las industrias de aromas y sabores, alimentos y farmacéutica (1, 2). La calidad del AE está regulada por la norma ISO3757 de 2002 (3).

Métodos

Las plantas de pachulí se cultivaron y secaron a la sombra, en el Centro de Investigación CENIVAM, en Bucaramanga-Colombia. Los AE se obtuvieron por MWHD y AV, de diferentes partes de la planta, después de un tratamiento ácido, y se tomaron fracciones del AE durante la destilación.

Resultados y Conclusiones

La composición química se determinó mediante GC/MS, usando como criterios de identificación los índices de retención lineales y la comparación de los espectros de masas obtenidos experimentalmente con los reportados en las bases de datos (Adams y NIST) y literatura. Los rendimientos y las composiciones químicas de los AE presentaron variaciones, según los parámetros estudiados. En todos los AE, pachulol fue el componente principal (34,0-42,0%). El AE obtenido únicamente de los tallos fue rico en pogostona (31,0%). El rendimiento del AE aumentó con el tiempo de la destilación en MWHD (45-150 min). Las fracciones del aceite de pachulí obtenidas por AV cada 30 min, permitieron monitorear el proceso de extracción de metabolitos secundarios volátiles con el tiempo. El alto contenido de pachulol (> 35%) en el AE obtenido de plantas cultivadas en Santander, lo posiciona como un AE de alta calidad, en la franja superior de precios de este mercado.

Referencias

- [1] van Beek, T.; Joulain, D. The essential oil of patchouli, *Pogostemon cablin*: A review. *Flavour and Fragrance Journal*. 2018, 33, 6-51.
- [2] Ramya, H.; Palanimuthu, V.; Singla, R. An introduction to patchouli (*Pogostemon cablin* Benth.) – A medicinal and aromatic plant: It's importance to mankind. *Agri. Eng. Int: CIGR Journal*. 2013, 15 (2) 243-250.
- [3] International Standards Organization, "Oil of Patchouli [*Pogostemon cablin* (Blanco) Benth.]" . 2002, 1-6.



Efecto de las condiciones de destilación sobre el rendimiento y composición química de aceites esenciales producidos en Colombia.

Diego Camilo Durán García,¹ Sandra Pérez Angulo,¹ Carlos Suárez,¹ Jhonnathan Machado,¹ Jairo René Martínez,¹ Elena E. Stashenko.^{1*}

¹Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

*elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: aceite esencial, arrastre con vapor, optimización, calidad.

Introducción

Los aceites esenciales (AE) son materias primas industriales que se emplean en alimentos, cosméticos, productos de aseo y agropecuarios, entre otros. Su rendimiento productivo y calidad dependen de las condiciones agroecológicas en las que se desarrollan las plantas, de su tratamiento postcosecha y de variables del proceso de destilación, entre otras [1,2].

Métodos

Mediante el desarrollo de modelos matemáticos empíricos, se establecieron las mejores condiciones de operación en la destilación por arrastre con vapor (AV), de los AE de las especies tomillo, romero, orégano de monte, citronela y palmarrosa que permitieron la mayor productividad con la mejor calidad posible, según normas técnicas internacionales.

Resultados y conclusiones

Las mejores condiciones de extracción de las especies orégano de monte y palmarrosa, mostraron que se requerían bajas presiones (≤ 50 psi) y densidades intermedias (200-250 kg/m³) para obtener la mayor cantidad de AE con alto contenido de carvacrol y geraniol, respectivamente. En la extracción del AE de citronela se lograron los rendimientos de extracción más altos, con un contenido alto de citronelal (37.1%) y citronelol (15.2%), a presiones por encima de los 100 psi y densidades mayores de 330 kg/m³. Esto se puede explicar por el mayor grosor y ancho de las hojas de citronela, comparados con los de palmarrosa, que requirió una menor presión de trabajo para la extracción del AE. Un mayor contenido de agua en el material vegetal de tomillo y romero, produjo una disminución en el rendimiento de extracción. Los resultados de calidad y productividad, a escala piloto, de las especies bajo estudio, mostraron que es viable la agroindustrialización de estos AE en Colombia, gracias a su rendimiento (biomasa, AE) y calidad alta de los aceites obtenidos.

Referencias

1. Stashenko, E.; Martínez, J. Plantas aromáticas y aceites esenciales: estudio y aplicaciones. Ediciones UIS Bucaramanga, Colombia, 2012, 314 p.
2. Denny, T. Field Distillation for Herbaceous Oils. 3^aEd. Denny, McKenzie Associates, Lilydale, Tasmania, Australia, 2001, 275 p.



Caracterización química por GC/MS de aceites esenciales de *Achyrocline satureioides* y *Achyrocline bogotensis*, recolectadas en Santander, Colombia

Sheylla T. Reyes,¹ Jairo R. Martínez,¹ Elena E. Stashenko,^{1*} Robert T. González M.²

¹Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

²Universidad Nacional de Colombia, sede Palmira.

*elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Achyrocline satureioides*, *Achyroclines bogotensis*, aceite esencial, GC/MS.

Introducción

Achyrocline satureioides y *Achyrocline bogotensis* son plantas nativas de América del Sur pertenecientes a la familia de las Asteráceas. En la medicina tradicional, ambas especies se han utilizado para el tratamiento de enfermedades en la piel y otras dolencias, particularmente, las de los tractos gastrointestinal y urinario [1-2].

Métodos

El material vegetal, proveniente de cultivos experimentales de CENIVAM, fue obtenido a través del Ministerio del Medio Ambiente y Desarrollo Sostenible: Contrato de acceso a recursos genéticos y productos derivados con fines de bioprospección N° 270. Los aceites esenciales (AE) se obtuvieron por la técnica de hidrodestilación asistida por microondas, a partir de hojas y tallos.

Resultados y conclusiones

La caracterización de los AE se realizó en un cromatógrafo de gases GC 7890 (*Agilent Technologies*) acoplado a un detector selectivo de masas AT 5975C (ionización con electrones, 70 eV). Se utilizaron dos columnas con diferentes fases estacionarias: polar (DB-WAX) y apolar (DB-5MS). Los componentes se identificaron tentativamente comparando sus índices de retención lineales con los reportados en la literatura y los espectros de masas con los de las bibliotecas espectrales (ADAMS, NIST, Wiley). Los componentes mayoritarios identificados en el AE de *A. satureioides* fueron trans- β -cariofileno (14,3%), óxido de cariofileno (6,1%) y α -pineno (5,6%). En el AE de *A. bogotensis* se identificaron los compuestos principales α -bisabol (25,2%), β -himachaleno (16,4%), trans- β -cariofileno (14,7%) y α -himachaleno (5,6%). Varios de estos compuestos se han encontrado como sustancias mayoritarias en AE con diferente actividad antibacteriana [3].

Referencias

- [1] Paniagua, N.; Bussmann, R.; Romero, C. *Achyrocline alata* (Kunth) DC. *Achyrocline bogotensis* (Kunth) DC. *Achyrocline satureioides* (Lam.) DC. Asteraceae. *Ethnobotany of the Andes*, 2020, 1-5.
- [2] Simões, C.; Schenkel, E.; Bauer, L.; Langeloh, A. Pharmacological investigations on *Achyrocline satureioides* (Lam.) DC., compositae. *J Ethnopharmacol.* 1988, 22(3), 281-293.
- [3] Chen, X.; Zhang, Y.; Zu, Y. Composition and biological activities of the essential oil from *Schisandra chinensis* obtained by solvent-free microwave extraction. *LWT-FOOD SCI TECHNOL.* 2011, 44(10), 2047-2052.



Composición química y destilación fraccionada a presión reducida del aceite esencial de *Cymbopogon nardus*.

Johanna C. Rosero, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.*

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Cymbopogon nardus*, destilación fraccionada, aceite esencial, GC/MS.

Introducción

El aceite esencial (AE) de *Cymbopogon nardus* (Poaceae) se usa comúnmente en la producción de repelentes de mosquitos y perfumes (1,2). Con el fin de agregar valor a los AE, se han aplicado técnicas como la destilación fraccionada para concentrar o separar los compuestos mayoritarios.

Métodos

El material vegetal se obtuvo de parcelas experimentales ubicadas en la sede UIS Barbosa, Santander. El AE se obtuvo por medio de destilación por arrastre con vapor y se fraccionó en un equipo de microdestilación fraccionada al vacío B/R Instruments, modelo 800.

Resultados y conclusiones

El AE y las fracciones de *C. nardus* se caracterizaron mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC/MS) y se cuantificaron mediante cromatografía de gases con detector de ionización en llama (GC/FID). Los componentes mayoritarios identificados en el aceite fueron geraniol (209 mg/g AE), citronelol (137 mg/g AE) y citronelal (96 mg/g AE). La rectificación del aceite esencial produjo tres fracciones F1, F2 y FF (fracción de fondo) recolectadas a diferentes temperaturas, a saber: F1 (64 °C), F2 (77.3 °C) y FF (131.4 °C). En comparación con el AE, F1 y F2 resultaron enriquecidas en monoterpeno limoneno (23,1 mg/g AE) y monoterpeno oxigenado citronelal (698 mg/g AE), respectivamente. FF se enriqueció principalmente en geraniol (259 mg/g AE) y citronelol (174 mg/g AE). Se observó un incremento significativo de más de seis veces en el contenido de citronelal de F2 con respecto al AE de partida.

Referencias

- [1] Nakahara K.; Alzoreky N.; Yoshihashi T.; Nguyen H.; Trakoontivakorn G. (Chemical Composition and Antifungal Activity of Essential Oil from *Cymbopogon nardus* (Citronella Grass). *Japan Agricultural Research Quarterly*. 2003, 37(4), 249–252.
- [2] Verma R.; Singh S.; Padalia R.; Tandon S. Chauhan A. Essential oil composition of the sub-aerial parts of eight species of *Cymbopogon* (Poaceae). *Industrial Crops and Products*. 2019, 142,1-13.



Estudio de estabilidad y propiedades antioxidantes de una microemulsión que incorpora extracto de *Psidium sarturianum* y aceite esencial de *Piper marginatum*

Juan Camilo Henríquez Sanabria, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.*

Centro de Investigación en biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Investigación en cromatografía y espectrometría de masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander, Carrera 27, Calle 9, Edificio 45, Bucaramanga, Colombia

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras Claves: Aceites, Extractos, Microemulsión, Antioxidante.

Introducción

Las microemulsiones son sistemas termodinámicamente estables, conformados por una fase oleosa, una acuosa y surfactante(s) [1]. Las microemulsiones ayudan en la penetración en la capa cornea de la piel, de compuestos con propiedades antioxidantes provenientes de productos naturales, como aceites esenciales y extractos [2].

Métodos

Se obtuvieron aceites esenciales y extractos de cinco especies pertenecientes a las familias *Asteraceae*, *Boraginaceae*, *Myrtaceae* y *Piperaceae*. La actividad antioxidante de aceites esenciales y extractos se evaluó por métodos colorimétricos (ABTS+ y β -caroteno). La composición de la microemulsión se escogió con base en un diagrama de fases pseudoternarias.

Resultados y Conclusiones

El extracto de *P. sarturianum* (*Myrtaceae*) presentó la actividad antioxidante más alta por los dos métodos evaluados. Según los resultados obtenidos por HPLC-DAD, el extracto fue rico en los ácidos elágico y gálico. En la microemulsión se incorporó el extracto de *P. sarturianum* al 1% p/v. El aceite esencial de *P. marginatum* fue incorporado como fragancia. La microemulsión se mantuvo estable luego de los 30 días de haber sido almacenada a 5, 25 y 40 °C.

Referencias

- [1] Kreilgaard, M. Influence of microemulsions on cutaneous drug delivery. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 2002 (54), S77-S98.
- [2] Garcia, L., Pires, G., Oliveira, D., Silva, L., Gomes, A., Amaral, J., Ruela, A. Incorporation of glycolic extract of cocoa beans (*Theobroma cacao* L.) into microemulsions and emulgels for skincare. *Industrial Crops and Products*, 2021 (161), 1-10.



Análisis de la composición química por GC/FID y GC/MS del aceite esencial de *Varronia curassavica* Jacq., cultivada en Colombia

Laisha Burgos-Díaz, Jairo René Martínez, Elena E. Stashenko*

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

*elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Varronia curassavica*, aceite esencial, GC/MS.

Introducción

Varronia curassavica Jacq. (Boraginaceae) es un arbusto aromático nativo de la región neotropical, utilizado en medicina popular para tratar inflamaciones, úlceras, artritis y dolores (1). Sus propiedades anti inflamatorias, analgésicas y cicatrizantes se deben principalmente a la presencia de (*E*)- β -cariofileno y α -humuleno en el aceite esencial (AE) aislado de hojas (2).

Métodos

El AE de partes aéreas de *V. curassavica* (Voucher: UIS 20892) se obtuvo mediante hidrodestilación asistida por radiación de microondas. El material vegetal se obtuvo mediante el "Contrato de acceso a recursos genéticos y productos derivados con fines de bioprospección N° 270" del Ministerio del Medio Ambiente y Desarrollo Sostenible.

Resultados y conclusiones

El análisis del AE se llevó a cabo por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC/MS) y por cromatografía de gases acoplada a detector de ionización en llama (GC/FID). Los compuestos se identificaron por comparación de sus espectros de masas e índices de retención lineales (LRI), en columnas polar y apolar, calculados con base en la serie homóloga de *n*-alcanos C6-C25, con diferentes bases de espectros de masas (NIST, Adams y Wiley) y datos de literatura científica (3), asimismo, usando patrones. Para la identificación confirmatoria de compuestos se emplearon sustancias-patrón. El AE de *V. curassavica* tuvo un rendimiento de $0.15 \pm 0.04\%$ (p/p). Los hidrocarburos sesquiterpénicos germacreno D ($21.32 \pm 0.08\%$) y (*E*)- β -cariofileno ($18.64 \pm 0.07\%$) fueron los compuestos mayoritarios del AE, seguidos de α -pineno ($13 \pm 1\%$) y α -copaeno ($11 \pm 2\%$).

Referencias

- [1] García, H. Flora Medicinal de Colombia: Botánica Médica. Tercer Mundo. 1992, 508.
- [2] De Carvalho, J.; Rodrigues, R.; Sawaya, A.; Marques, M.; y Shimizu, M. Chemical composition and antimicrobial activity of the essential oil of *Cordia verbenacea* DC. J. Ethnopharmacol. 2004, 95, 297-301.
- [3] Babushok, V.; Linstrom, P.; y Zenkevich, I. Retention indices for frequently reported compounds of plant essential oils. J. Phys. Chem. Ref. Data. 2011, 40, 1-47.



Caracterización química de aceites esenciales y extractos hidroetanólicos obtenidos a partir de biomasa residual post destilación de *Turnera diffusa*, colectada en Santander, Colombia

Félix C. Muñoz, Sheylla T. Reyes, Karen J. Ramírez, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko*

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

*elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Turnera diffusa*, aceite esencial, extractos, biomasa residual.

Introducción

T. diffusa es un pequeño arbusto que pertenece a la familia Turneraceae, crece en partes tropicales de América y se conoce comúnmente como damiana, tiene flor amarilla. Se usa en la medicina tradicional como afrodisiaco; y estudios previos mostraron que sus aceites esenciales y extractos presentan varias actividades biológicas [1-2].

Métodos

Tres tipos del material vegetal de *T. diffusa* (TD) fueron recolectados en diferentes zonas de Santander, Colombia. La identificación taxonómica de plantas se llevó a cabo en el Herbario Nacional de Colombia. Hojas y tallos se sometieron a destilación por arrastre con vapor. La biomasa post-destilación se usó para obtener extractos hidroetanólicos.

Resultados y conclusiones

Mediante destilación por arrastre con vapor se obtuvieron los siguientes rendimientos de extracción para tres accesiones de *T. diffusa* recolectadas: 0.2, 0.3 y 0.5% (p/p). La caracterización de los AE se llevó a cabo por GC/MS. Se utilizaron dos columnas con fases estacionarias polar y no polar. Los compuestos se identificaron con base en sus espectros de masas (EI, 70 eV) comparados con las bases de datos (Adams, 2007; NIST, 2017), sus índices de retención lineales y usando algunos compuestos patrón. Los componentes mayoritarios identificados fueron aristolocheno (17.8-23.8%) y β -selineno (5-6.5%), valores similares a los reportados por Bueno *et al.* [3]. La caracterización química de los extractos vegetales se realizó mediante cromatografía líquida con detector de arreglo de diodos (HPLC-DAD) y LC/MS. Se detectaron 21 compuestos polifenólicos, los cuales dan un valor adicional al material vegetal post-destilado de *T. diffusa*.

Referencias

- [1] Urbizu, A.; Castillo, O; Martínez, G & Torres, J. Natural variability of essential oil and antioxidants in the medicinal plant *Turnera diffusa*. *Asian. Pac. J. Trop. Med.* 2017, 10 (2), 121-125.
- [2] Zhao, J; Pawar, R; Ali, Z & Khan, I. Phytochemical investigation of *Turnera diffusa*. *Nat. Prod. J.* 2016, 48, 289-292.
- [3] Bueno, J; Escobar, P; Martínez, J; Leal, S; Stashenko, E. Composition of three essential oils, and their mammalian cell toxicity and antimycobacterial activity against drug resistant-tuberculosis and nontuberculous mycobacteria strains. *Nat. Prod. Commun.* 2011, 6 (11), 1743-1748.



Destilación fraccionada de aceite esencial de *Cymbopogon nardus* y de su producto de transformación por reacción de prins a escala laboratorio

Nelson G. Martínez Avellaneda,¹ Aída L. Villa,² Edwin A. Alarcón,² Jairo R. Martínez,¹ Elena E. Stashenko.^{1*}

¹Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

²Grupo de Catálisis Ambiental, Universidad de Antioquia.

*elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Cymbopogon nardus*, aceite esencial, fraccionamiento.

Introducción

Cymbopogon nardus (citronela) es una especie vegetal originaria del sur de India y de Sri Lanka. El aceite esencial (AE) presenta efecto repelente contra *Aedes aegypti* y *Tribolium castaneum* (1, 2). El citronelal, compuesto mayoritario del AE, se transforma en isopulegol por catálisis heterogénea; este producto de reacción es de interés comercial porque es un precursor de la síntesis de varios fármacos (3).

Métodos

El AE se obtuvo por destilación con arrastre con vapor a partir de material vegetal fresco cultivado en las parcelas experimentales de CENIVAM. La transformación catalítica del AE fue realizada en el grupo de Catálisis Ambiental. El fraccionamiento del AE y sus productos de reacción se realizó en una columna de fraccionamiento de eje rotatorio de 30 platos teóricos.

Resultados y conclusiones

La caracterización química del AE, fracciones y productos de reacción se realizó por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. Se usaron columnas apolar DB-5MS y polar DB-WAX, ambas de 60 m, inyección *split* 1:30, MSD (EI, 70 eV). La identificación de los compuestos se realizó con base en sus índices de retención lineales, por comparación de espectros de masas obtenidos con los de las bases de datos (Adams, Nist, Wiley) y sustancias de referencia. El componente mayoritario (citronelal) fue enriquecido de 51.8% al 88%, su producto de reacción isopulegol fue enriquecido de 49.4% a 94% con una única relación de reflujo. Los procesos de transformación catalítica y fraccionamiento permitieron obtener compuestos de mayor pureza y valor agregado que el AE crudo de partida.

Referencias

- [1] Stashenko, E. Aceites esenciales. División de publicaciones UIS, Bucaramanga, Ed. UIS, 2009, 11-85.
- [2] Aishah, M.; Ida, I.; Siti, N.; Nurul, A.; Liew, W.; Noer, H. Eur. Food Res. Technol. 2020, 246, 1519-1532.
- [3] Martina, S.; Paivi, M. A.; Ewelina, L.; Karolina, M. V.; Kari, E.; Atte, A.; Annika, S.; Narendra, K.; Konstantin, P. V.; Nariman, F. S.; Dmitry, Y. M. Catal. Today. 2017, 279, 56-62.



Destilación fraccionada de aceite esencial de *Cymbopogon nardus* y de su producto de transformación por reacción de prins a escala laboratorio

Rogelio Alejandro Saavedra Barrera, Juan Camilo Henríquez, Sheylla Reyes, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.*

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

*elena@tucan.uis.edu.co

Palabras claves: Piper_sp., actividad_antioxidante, aceite_esencial, GC/MS.

Introducción

El género *Piper*, cuenta con más de 700 especies distribuidas en América. Está conformado por plantas de importancia etnobotánica, productoras de metabolitos secundarios bioactivos [1]. Algunas especies, como *P. nigrum*, han demostrado capacidad antioxidante alta; atribuida a compuestos fenólicos, que se han identificado en sus extractos y aceites esenciales [2].

Métodos

Los AE se obtuvieron a partir de material fresco de siete plantas del género *Piper* recolectadas en Santander. Se empleó el método de hidrodestilación asistida por microondas, y su caracterización se realizó por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. Su capacidad antioxidante se determinó por el ensayo ORAC.

Resultados y Conclusiones

Los rendimientos de los AE variaron entre el 0,03 y el 0,40% (p/p). Todas las muestras tuvieron una cantidad representativa (>10%) de sesquiterpenos y sesquiterpenos oxigenados, cuya cantidad, en los AE de *P. peltatum* y *P. marginatum*, fue mayor de 50%. El mayor contenido de monoterpenos oxigenados, se detectó en el AE de *P. cumanense* (44,2%). En los AE de *P. dilatatifolium* y *P. peltatum* se presentó una cantidad de monoterpenos baja (<1%). Los AE exhibieron actividad antioxidante entre 680 y 2010 $\mu\text{mol Trolox}^{\text{®}}/\text{g}$ de AE, siendo *P. cumanense* la especie con la mayor capacidad protectora entre las especies estudiadas.

Referencias

- [1] Parmar, V.; Jain, S.; Bisht, K.; Jain, R.; Taneja, P.; Jha, A.; Tyagi, O.; Prasad, A.; Wengel, J.; Olsen, C. y Boll, P. Phytochemistry of the genus *Piper*. *Phytochemistry*. 1997, 46, 597-673.
- [2] Nakatani, N.; Inatani, R.; Ohta, H. y Nishioka, A.; Chemical constituents of peppers (*Piper* spp.) and application to food preservation: naturally occurring antioxidative compounds. *Environmental Health Perspectives*. 1986, 67, 135-142.



Uso de Aceites Esenciales de origen vegetal como solventes para extracción de Cannabis.

Dario Aguilera,¹ Jesús Acedo,² Gustavo García.³

¹Aguikem S.A.S.

²Khymós, S.A.

*daguica@hotmail.com

Palabras Claves: Cannabis, Extracción, Terpenos, Presión.

Introducción

Se propone el uso aceites esenciales orgánicos de origen vegetal, como solventes para el proceso de extracción a presión de cannabis. Se usó una relación mínima entre solvente y material sólido para obtener un extracto de CBD y THC de alta concentración, que puede considerarse como un producto final.

Métodos

La extracción se llevó a cabo en un soporte de columna de HPLC empacada con el material vegetal, conectada a la bomba del mismo equipo, para controlar el resultado con diferentes valores de tiempo, temperatura, presión y relación solvente/sólido. Los extractos fueron analizados en un HPLC Agilent 1290.

Resultados y Conclusiones

Se inicia el desarrollo de un método de un solo paso para extracción de cannabinoides, con aceites esenciales de origen vegetal. Se elimina el paso de remoción de solvente y la presencia de trazas de solvente en el extracto.

Se observan buenas capacidades de extracción para los aceites esenciales seleccionados. Hay una influencia positiva de la relación solvente/sólido en la eficiencia de la extracción, en cuanto a el total de cannabinoides extraídos, pero negativa en cuanto a concentración del extracto.

La temperatura, la presión y el tiempo también incluyen el resultado de la extracción. Existe apreciable influencia de la polaridad del aceite esencial en la eficiencia para extraer diferencialmente CBD, o THC, los terpenos hidroxilados aumentan la proporción de CBD. Se propone el estudio de los efectos sinérgicos que se establezcan entre los efectos terapéuticos potenciales reportados de los cannabinoides y los terpenos presentes en cada extracto

Referencias

[1] <https://www.leay.com/news/cannabis-/terpenes-the-avors-of-cannabis-aromatherapy>

[2] Russo EB. Taming THC: potential cannabis synergy and phytocannabinoid-terpenoid entourage effects. Br. J. Pharmacol. 2011; 163: 1344-1364.

[3] Monsalve, L.A, Staschenko E.: COMPARACIÓN DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LOS ACEITES ESENCIALES DE LAS PLANTAS DE Lippia alba (Mill) N.E Brown, PROVENIENTES DE DIFERENTES REGIONES DE COLOMBIA. UIS. Escuela de Química. Tesis de Grado

[4] Hajhashemi V, Safei A. Hypnotic effect of Coriandrum sativum, Ziziphus jujuba, Lavandula angustifolia and Melissa officinalis extracts in mice. Res Pharm Sci. 2015; 10: 477-484.



SLQAE-398

**ESTUDIO DE LA CALIDAD DE ACEITES ESENCIALES AISLADOS DE PLANTAS DEL GÉNERO
Cymbopogon EN SANTANDER, COLOMBIA**

Angie K. Romero, Diego C. Durán, Sandra Pérez, Karen Ramírez, Lady J. Sierra, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko*

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

*E-mail: elena@tucan.uis.edu.co

Palabras claves: *Cymbopogon martinii*, *Cymbopogon nardus*, aceite esencial, GC/MS.

Introducción: El aceite esencial (AE) de palmarrosa (*Cymbopogon martinii*, fam. Poaceae), se conoce por su alto contenido de geraniol y se usa como antimicrobiano, repelente de insectos, antiséptico y diurético (1). La citronela (*C. nardus*, fam. Poaceae) se utiliza en la medicina popular para el tratamiento del reumatismo y diferentes problemas digestivos y menstruales y como repelente de insectos (2).

Métodos: Los AE se obtuvieron por destilación por arrastre con vapor. Las propiedades físico-químicas de los AE se evaluaron según las normas ISO 1242, 709, 279, 280 y 592. La identificación de los compuestos presentes en los AE se realizó por GC/MS en columnas DB-5MS [5%-fenil-poli(metilsiloxano), 60 m x 0.25 mm (d.i.) x 0.25 (d.)] y DB WAX [poli-(etilenglicol), 60 m x 0.25 mm (d.i.) x 0.25 (d.)].

Resultados y conclusiones: En el AE de *C. martinii* se identificaron como componentes mayoritarios el geraniol (84.1%), acetato de geraniol (8.1%) y linalool (2.3%). En el AE de *C. nardus* se identificaron citronelal (41.1%), geraniol (16.8%) y citronelol (15.7%). Los rendimientos de extracción obtenidos para *C. nardus* y *C. martinii* fueron de 0.75% y 0.33% respectivamente. Las propiedades fisicoquímicas de los AE de palmarrosa y citronela obtenidos se encontraron dentro de los rangos de aceptación establecidos por estándares internacionales de calidad. La variación en la composición química se debió a diferencias en condiciones geoclimáticas y de cultivo de las parcelas experimentales, pero todos los AE cumplieron con las normas internacionales ISO 4727 para el AE de *C. martinii* e ISO 3848 para el AE de *C. nardus*.
SLQAE-105



SLQAE-242

EFEECTO ECOTÓXICO Y PREVENTIVO DEL USO DE ACEITES ESENCIALES EN LA MASTITIS BOVINA.

Jovanna Suárez Barreiro¹, Martha Cecilia Suárez², Fabian Parada A.³.

1. Unilabs Asesoría e Investigación S.A.S., Finca Hayuelos, Machetá-Cundinamarca
2. Departamento de Salud Animal, Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Veterinaria Zootecnia. Carrera 30 # 45-03, 111321 Bogotá.
3. Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Ciencias. Carrera 30 45-03, 111321 Bogotá.

Palabras Claves: Mastitis, aceites esenciales, hipersensibilidad

Introducción

Los aceites esenciales de *Lippia citriodora* (Ort.) y *Lippia origanoides* (Kunth), han mostrado actividad antimicrobiana asociada a la mastitis. El objetivo de este estudio fue evaluar el efecto ecotóxico con el bioensayo *Artemia salina* y el efecto preventivo

Métodos

mediante un ensayo in vivo en bovinos (n=20) de un producto a base de aceites esenciales utilizando como control un producto convencional. Se evaluó su reacción de hipersensibilidad de contacto, efecto en células somáticas y residualidad en muestra de leche.

Resultados y Conclusiones

Los resultados del bioensayo de *Artemia salina* fueron 10,05 y 19,36 ($\mu\text{g/mL}$) respectivamente. No se observaron efectos negativos, ni hipersensibilidad de contacto, y no se encontraron metabolitos residuales en leche posterior al ensayo. El conteo de células somáticas mostró efectividad en la prevención de mastitis del 80% con aceites esenciales frente al 63% del producto convencional.



SLQAE-254

ESTUDIO QUÍMICO DEL ACEITE ESENCIAL DE LA “YARETA” SMALLANTHUS PARVICPES (BLAKE)

ROB OLIVIO NINO CASTRO MANDUJANO

UNIVERSIDAD NACIONAL MAYOR DE SAN MARCOS

Palabras Claves: alfa-felandreno, p-cimeno, aceite esencial**Introducción**

Los aceites esenciales son líquidos oleosos volátiles obtenidos de diferentes partes de plantas. Actualmente, el género *Smallanthus* está constituido por 24 especies, distribuidas con mayor número de especies en Perú y México. Se realizó una búsqueda bibliográfica exhaustiva en diferentes bases de datos y no se han encontrado estudios fitoquímicos.

Métodos**RECOLECCION de la muestra**

identificación taxonomica de la muestra

Extracción del aceite esencial por el método de arrastre de vapor

Caracterización del aceite esencial análisis del aceite esencial por CG-MS

Resultados y Conclusiones

Se determinó 49 compuestos: monoterpenos, diterpenos, sesquiterpenos e hidrocarburos alifáticos, los cuales constituyen cerca de 82,77 % de la composición del aceite esencial. Los monoterpenos representan el 41,87 %, donde el constituyente en mayor abundancia es el α -felandreno seguido del p-cimeno y del α -pineno. De los resultados del análisis por GC-MS del aceite esencial de la planta *Smallanthus parviceps* (Blake) Rob se puede concluir que se identificaron 49 compuestos, de estos hay dos que son mayoritarios, el α -felandreno y el carofileno, los cuales son monoterpeno hidrocarburado que presenta propiedades antiinflamatorias, estos compuestos pueden ser aplicados en el ámbito farmacéutico. El presente estudio es un aporte a las investigaciones fitoquímicas de la familia Asteraceae en el Perú y en particular del género *Smallanthus*, ya que este es el primer reporte a nivel nacional en cuanto a la constitución de metabolitos volátiles de un género que cuenta con escasos estudios químicos.



SLQAE-311

INFLUENCIA DE LOS PARÁMETROS EN EL RENDIMIENTO DE EXTRACCIÓN Y EN EL PERFIL QUÍMICO (BAJO CONDICIONES ÓPTIMAS) DEL ACEITE ESENCIAL DE *Croton malambo*, OBTENIDO POR HIDRODESTILACIÓN ASISTIDA POR MICROONDAS (HDAM)

Angie Julieth Ortega Leguizamon, Cristóbal Rafael Caicedo Medina, Eduardo Jhair Varela Montenegro, Dary Luz Mendoza Meza

Universidad del Atlántico

Palabras Claves : AE, HDAM, Rendimiento, Perfil.

Introducción

El Croton malambo es un arbusto endémico del bosque seco tropical de Colombia, su aceite esencial es una fuente importante de componentes bioactivos con propiedades antinociceptiva, antibacteriana y biocontroladora de insectos y ácaros. Al igual que otros AE, los rendimientos son muy bajos cuando se usan métodos de extracción convencionales.

Metodos

Se empleó HDAM como método verde para la extracción del AE siguiendo un DBB.

Por medio de MSR se determinaron las mejores condiciones de extracción.

Se caracterizó el AE por cromatografía de gases acoplada a masas y los datos cromatográficos se analizaron a través PCA.

Resultados y Conclusiones

Rendimientos máximos fueron 4,76 % (120 min, 40 % nivel de potencia y 0,08 g/mL) y 4,75 % (120 min, 60 % nivel de potencia y 0,12 g/mL), los cuales se consideran altos comparados con los reportados en la literatura. La variable potencia tuvo un efecto significativo sobre el rendimiento de la extracción (valor-p = 0,01), seguido del efecto cuadrático de la relación p/v (valor-p = 0,03) y en menor medida la interacción de este último con el tiempo de extracción (valor-p = 0,04), con influencia positiva sobre la variable de respuesta. La caracterización del AE por cromatografía de gases acoplada a masas mostró que los componentes mayoritarios son derivados del eugenol (Isoeugenol y metil-isoeugenol). El PCA de los datos cromatográficos de AE extraídos en muestras de cuatro municipios del departamento del Atlántico develó que la ubicación geográfica influye en el perfil químico, particularmente en los componentes minoritarios.



COMUNICACIONES ORALES IV C2B2

SALUD HUMANA & ANIMAL

SLMC2-34

Evaluación *in vitro* de la actividad citotóxica de extractos de *Malachra alceifolia*, *Cordia dentata* Poir y *Heliotropium indicum* Linn sobre la línea celular de osteosarcoma canino OSCA-8

Nelitza Linárez Álvarez,^{1*} Karen Reyes Álvarez,² Erika Lozano Aguilar,² Harold Gómez Estrada,³ Orlando Torres,¹ Ana Muñoz.¹

¹Universidad Antonio Nariño

²Universidad Colegio Mayor de Cundinamarca

³Universidad de Cartagena

*linareznelitza@gmail.com

Palabras claves: Cáncer Citotoxicidad Extracto Cultivo

Introducción

Las terapias para el cáncer causan efectos secundarios indeseables en los pacientes y no alcanzan el 100% de efectividad. Es necesario desarrollar nuevas alternativas terapéuticas, como la medicina herbaria, ya que ciertos metabolitos de las plantas pueden interferir en el control de la supervivencia y muerte de las células malignas.

Métodos

Estudio *in vitro*, experimental.

Extractos obtenidos a partir de maceración con etanol.

Cultivos celulares realizados a partir de una línea celular de osteosarcoma canino y fibroblastos caninos, como control. Se hizo la curva de proliferación y el posterior ensayo de citotoxicidad. Finalmente, se realizó un ANOVA de los datos obtenidos.

Resultados y conclusiones

Los extractos vegetales demuestran actividad citotóxica dosis dependiente, siendo los más potentes *Malachra alceifolia* en concentración de 50 µg/mL; , *Cordia dentata* Poir en concentración 100 µg/mL y el extracto *Heliotropium indicum* Linn en concentración 200 µg/mL con inhibición celular del 90,6 sobre las células OSCA-8. Las diferentes fracciones de los extractos no tienen el mismo comportamiento en las tres especies vegetales estudiadas. El porcentaje de inhibición varía según la línea celular. Se requieren más experimentos empleando otras líneas celulares cancerígenas.

Referencias

- [1] Dash, G; Abdullah, M. (2013). A REVIEW ON HELIOTROPIUM INDICUM L. (BORAGINACEAE). International Journal of Pharmaceutical Sciences & Research, 4(4), 1253.
- [2] López, P., Álvarez, S., & González, J. L. (2011). Actualización del osteosarcoma para el médico de familia. SEMERGEN - Medicina de Familia, 37(1), 22–29.
- [3] Matias, E. F. F., Alves, E. F., do Nascimento Silva, M. K., de Alencar Carvalho, V. R., Coutinho, H. D. M., & da Costa, J. G. M. (2015). The genus Cordia: botanists, ethno, chemical and pharmacological aspects. Revista Brasileira de Farmacognosia, 25(5), 542–552.



SLMC2-49

Efecto de IGF2 sobre el panorama de metilación del DNA y la expresión de mRNA en la línea celular HTR-8/SVneo

David Alejandro López González,* Yadi Adriana Umaña Pérez.

Grupo de Investigación en Hormonas. Departamento de Química. Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá.

*daalopezgo@unal.edu.co

Palabras clave: Cáncer, epigenética, transformación maligna

Introducción

Las células cancerosas deben su origen a una pérdida de la identidad celular somática, que es consecuencia de la inestabilidad genómica y que depende del panorama de metilación del DNA [1]. Diversos estímulos extracelulares son capaces de promover una remodelación del metiloma de células somáticas tal que contribuyen a su transformación maligna [2].

Métodos

El efecto del péptido mitogénico IGF2 sobre la línea celular derivada de trofoblasto HTR-8/SVneo se evaluó a nivel de metilación del DNA mediante la tecnología MethylationEPIC de Illumina [3], a nivel transcripcional mediante RNAseq y a nivel celular mediante ensayos de actividad biológica (proliferación, migración e invasión).

Resultados y conclusiones

Identificamos variaciones a nivel epigenético y transcripcional que aparecen por efecto del estímulo y que ocurren de manera simultánea con un aumento de la actividad proliferativa, migratoria e invasiva de la línea celular. Muchos de los genes comprometidos en estas variaciones han sido descritos previamente en diversos tipos de cáncer y más aún, participan en vías de señalización a través de las cuales podría estar procediendo el estímulo con IGF2 y que son importantes para la adquisición de un fenotipo maligno en diversos tipos de cáncer. En conclusión, este trabajo es el primer reporte de que el péptido IGF2 tiene la capacidad de promover cambios en el panorama de metilación del DNA en la línea celular HTR-8/SVneo y encontramos que estos cambios ocurren de manera paralela con un aumento en la actividad proliferativa, migratoria e invasiva de la célula.

Referencias

- [1] Smith, Z. D.; Shi, J.; Gu, H.; Donaghey, J.; Clement, K.; Cacchiarelli, D.; Gnirke, A.; Michor, F.; Meissner, A. Epigenetic Restriction of Extraembryonic Lineages Mirrors the Somatic Transition to Cancer. *Nature* 2017, 549 (7673), 543–547. <https://doi.org/10.1038/nature23891>.
- [2] Oo, A. K. K.; Calle, A. S.; Nair, N.; Mahmud, H.; Vaidyanath, A.; Yamauchi, J.; Khayrani, A. C.; Du, J.; Alam, M. J.; Seno, A.; Mizutani, A.; Murakami, H.; Iwasaki, Y.; Chen, L.; Kasai, T.; Seno, M. Up-Regulation of PI 3-Kinases and the Activation of PI3K-Akt Signaling Pathway in Cancer Stem-Like Cells Through DNA Hypomethylation Mediated by the Cancer Microenvironment. *Transl. Oncol.* 2018, 11 (3), 653–663. <https://doi.org/10.1016/j.tranon.2018.03.001>.
- [3] Pidsley, R.; Zotenko, E.; Peters, T. J.; Lawrence, M. G.; Risbridger, G. P.; Molloy, P.; Van Djik, S.; Muhlhausler, B.; Stirzaker, C.; Clark, S. J. Critical Evaluation of the Illumina MethylationEPIC BeadChip Microarray for Whole-Genome DNA Methylation Profiling. *Genome Biol.* 2016, 17 (1), 208. <https://doi.org/10.1186/s13059-016-1066-1>.



Biomateriales de fibroína de seda con potencial aplicación en ingeniería de tejidos

Augusto Zuluaga,¹ Carlos Toro,¹ John Jairo Melchor,¹ Iván Alberto Lopera,¹ Lina M. Orozco,^{1,2} Juan Carlos Sepúlveda-Arias.^{1*}

¹Universidad Tecnológica de Pereira, Grupo Infección e Inmunidad, Facultad de Ciencias de la Salud, Colombia.

²Universidad Tecnológica de Pereira, Grupo Polifenoles, Facultad de Tecnología, Colombia.

*jcsepulv@utp.edu.co

Palabras claves: Hidrogeles, fibroína, biomateriales

Introducción

Todos los biomateriales requieren una evaluación de sus propiedades fisicoquímicas y un análisis de biocompatibilidad para ser considerados soportes candidatos en ingeniería de tejidos. Esta investigación muestra una evaluación de la citotoxicidad en células THP-1 inducida por hidrogeles a base de fibroína de seda y su caracterización fisicoquímica.

Métodos

La fibroína fue extraída a partir del capullo de gusano de seda por un tratamiento con Na₂CO₃, LiBr y diálisis [1]. Los hidrogeles fabricados por sonicación se evaluaron por FTIR-ATR y ensayos de biodegradabilidad [2]. Se determinó el efecto de los hidrogeles sobre la viabilidad de células THP-1 mediante el ensayo Alamar Blue [3].

Resultados y conclusiones

Se obtuvieron hidrogeles estables mediante sonicación durante 20 y 30 segundos, utilizando una solución estéril de fibroína al 4%. Un proceso de deconvolución del pico amida I del FTIR, permitió determinar que los hidrogeles de fibroína están gobernados por estructuras secundarias tipo hoja β y estructuras desordenadas asociadas a asas, las cuales pueden cambiar sus ángulos para empaquetarse como hojas β. Los hidrogeles de fibroína no provocaron citotoxicidad a las células evaluadas, lo cual está relacionado con la inocuidad del biomaterial, sin embargo, la proliferación de las células fue significativamente inferior al control (placa de poliestireno). Finalmente, mediante digestión enzimática y análisis porFPPLC, se estableció que los hidrogeles son biodegradables, una característica clave en el proceso de liberación controlada de fármacos. En conclusión, podemos establecer que los hidrogeles basados en fibroína de seda son biomateriales candidatos en ingeniería de tejidos.

Referencias

- (1) Zuluaga-Vélez, A.; Cómbita-Merchán, D. F.; Buitrago-Sierra, R.; Santa, J. F.; Aguilar-Fernández, E.; Sepúlveda-Arias, J. C. Silk Fibroin Hydrogels from the Colombian Silkworm Bombyx Mori L: Evaluation of Physicochemical Properties. *PLoS One* 2019, 14 (3), 1–16. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0208111>.
- (2) Naskar, D.; Bhattacharjee, P.; Ghosh, A. K.; Mandal, M.; Kundu, S. C. Carbon Nano ber Reinforced Nonmulberry Silk Protein Fibroin Nanobiocomposite for Tissue Engineering Applications. *ACS Appl. Mater. Interfaces* 2017, 9 (23), 19356–19370. <https://doi.org/10.1021/acsami.7b04370>.
- (3) Zhang, L.; Li, Y.; Li, L.; Guo, B.; Ma, P. X. Non-Cytotoxic Conductive Carboxymethyl-Chitosan/Aniline Pentamer Hydrogels. *React. Funct. Polym.* 2014, 82, 81–88. <https://doi.org/10.1016/j.reactfunctpolym.2014.05.001>.



SLMC2-156

Extractos de *Passiflora edulis f. edulis sims* inducen neuroprotección, plasticidad neuronal y sinergizan con la quimioterapia en un modelo *in vitro*

Sonia Luz Albarracín Cordero,* Oscar Fernando Sánchez Médina, Jose Maria Velasco España, Andrea Viviana Rodríguez, Laura Rojas Fonseca, Geison M. Costa, Jhon Jairo Sutachan Rubio.

PONTIFICIA UNIVERSIDAD JAVERIANA

*albarra@javeriana.edu.co

Palabras clave: Extractos, neuroprotección, dendritogénesis, quimioterapéuticos

Introducción

Se ha consolidado evidencia de que los supervivientes de cáncer sometidos a quimioterapia presentan síntomas neurológicos como pérdida de la memoria a corto plazo, disminución en la velocidad de procesamiento y dificultad para mantener la atención y efectuar multitareas, fenómeno conocido como deterioro cognitivo inducido por quimioterapia [1-3].

Métodos

Se prepararon y caracterizaron químicamente extractos crudos acuosos e hidroetanólicos de *P. edulis* derivados de hojas. Posteriormente, se evaluó *in vitro* el efecto neuroprotector y dendritogénico en neuronas corticales primarias. El efecto antiproliferativo se verificó en líneas celulares de glioblastoma humano (T98G) y neuroblastoma (SH-SY5Y).

Resultados y Conclusiones

Se demostró efecto dendritogénico del extracto acuoso a las concentraciones de 0.01 y 0.03 $\mu\text{g mL}^{-1}$ y del extracto hidroetanólico a 0.03 y 0.3 $\mu\text{g mL}^{-1}$. Adicionalmente se evidenció actividad neuroprotectora de los extractos frente al daño inducido por doxorubicina y ciclofosfamida; así como las propiedades antineoplásicas sinérgicas en las líneas celulares de glioblastoma y neuroblastoma.

El extracto acuoso de *P. edulis* demostró inhibir la activación de AKT en neuronas corticales de rata y reducir los niveles aumentados de p-AKT y p-ERK (1/2) derivados del tratamiento con Doxorubicina. Además, el extracto crudo acuoso mostro efecto sinérgico que favorece citotoxicidad de Doxorubicina o ciclofosfamida (CTX) en células de glioblastoma y neuroblastoma humanas en una forma dependiente de la dosis. Siendo particularmente incrementado el efecto citotóxico del fármaco quimioterapéutico en esquemas de coadministración y posteriores a la quimioterapia.

Referencias

- [1] Hardy, S.J.; Krull, K.R.; Wefel, J.S.; Janelins, M. Cognitive changes in cancer survivors. American Society of Clinical Oncology Educational Book 2018, 38, 795-806.
- [2] Bernstein, L.J.; McCreath, G.A.; Komeylian, Z.; Rich, J.B. Cognitive impairment in breast cancer survivors treated with chemotherapy depends on control group type and cognitive domains assessed: a multilevel meta- analysis. Neuroscience & Biobehavioral Reviews 2017, 83, 417-428.
- [3] Fardell, J.; Vardy, J.; Johnston, I.; Winocur, G. Chemotherapy and cognitive impairment: treatment options. Clinical Pharmacology & Therapeutics 2011, 90, 366-376.



Efecto del fibrinógeno gamma prima sobre la estructura de la fibrina formada sobre las células HMEC -1 y la secreción de elementos fibrinolíticos

Miriam Cantero,^{1,2*} Héctor Rojas,³ Eduardo Anglés-Cano,⁴ Rita Marchi,² Yuri Pardo.⁵

¹Grupo de Investigaciones Microbiológicas y Biomédicas de Córdoba, Programa de Bacteriología, Facultad de Ciencias de la Salud, Universidad de Córdoba, Montería, Colombia.

²Centro de Medicina Experimental, Laboratorio Biología del Desarrollo de la Hemostasia, Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas, Caracas, Venezuela

³Instituto de Inmunología, Universidad Central de Venezuela, Caracas, Venezuela

⁴Université de Paris, Terapias innovadoras en hemostasia, INSERM, F-75006, París, Francia ⁵Grupo de Bioquímica y de Biotecnología del departamento de Química y de Biología. Programa de Química, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Córdoba, Montería, Colombia.

*miriamcantero@correo.unicordoba.edu.co

Palabras Claves: Fibrinógeno, plasma, fibrina.

Introducción

El fibrinógeno γ' constituye aproximadamente del 8% al 15% del fibrinógeno plasmático¹. Su incremento se relaciona con enfermedades cardiovasculares², por la cual se analizó la estructura de la malla de fibrina formada sobre las células HMEC -1 y la secreción de algunos elementos fibrinolíticos.

Métodos

El efecto del fibrinógeno γ' (3% y 30%) sobre la estructura de la fibrina en la superficie de las HMEC-1 se observó por microscopía confocal de barrido láser. La secreción de compuestos fibrinolíticos en el sobrenadante y en los lisados celulares de las HMEC-1, se cuantificó utilizando kits comerciales.

Resultados y conclusiones

Las imágenes de microscopía confocal mostraron que la estructura de la malla de fibrina se alteró drásticamente al aumentar el porcentaje de fibrinógeno γ' de 3% a 30%. Las concentraciones del activador de plasminógeno tipo uroquinasa (uPA) y del inhibidor del activador de plasminógeno tipo 1 (PAI 1) en sobrenadantes de cultivo de células HMEC-1 tratadas con trombina o fibrina γ' al 30% aumentaron dos veces en comparación con los sobrenadantes de cultivo basal y HMEC-1 tratada con fibrina γ' al 3%. En todas las condiciones estimulantes, la concentración intracelular de uPA fue mayor que en los sobrenadantes. Por el contrario, la concentración de PAI 1 intracelular disminuyó en comparación con la medida en el sobrenadante, incluida la condición basal.

La fibrina γ' al 30% afecta la estructura del coágulo y la secreción celular de uPA y PAI-1. Muy probablemente, la estimulación en la secreción de uPA y PAI-1 al medio extracelular está modulada por la trombina unida a la fibrina.

Referencias

- [1] Pieters, M.; Kotze, R. C.; Jerling, J. C.; Kruger, A.; Ariens, R. A. Evidence that fibrinogen γ' regulates plasma clot structure and lysis, and relationship to cardiovascular risk factors in black Africans. *Blood* 2013, 1 - 24.
- [2] Macrae, F.; Domingues, M.; Casini, A.; Ariens, R. In *The (Patho) physiology of Fibrinogen γ'* . *Seminars in thrombosis and hemostasis*, vol. 42, Thieme Medical Publishers: vol. 42, 2016; pp 344-355.



SLMC2-190

Factores asociados a la radio y quimiorresistencia en cáncer de cuello uterino

Nelsy Alexandra Ramírez Beltrán,^{1*} Ruth Elizabeth Garzón Fernández,² Vanezza Paola Lorett Velazquez,¹

¹Universidad Antonio Nariño

²Universidad Nacional de Colombia

*alexiambe@gmail.com

Palabras Claves : Quimioresistencia, radioresistencia, Cáncer

Introducción

Buscamos identificar los factores que se asocian con la quimio y radioresistencia en pacientes con cáncer de cuello uterino, para explicar el porque del incremento constante en las tasas de mortalidad generadas por este cáncer. Revisión bibliográfica enfocada en proyectos de investigación con enfoque cuantitativo.

Métodos

Clasificación de la información teniendo en cuenta año de publicación de los artículos y relación con el cáncer ya mencionado. Análisis de los factores más prevalentes dando respuesta a la pregunta planteada.

Resultados y Conclusiones

La información recogida permitió identificar que dentro de los tratamientos más utilizados se encuentran la radioterapia y la quimioterapia fundamentalmente utilizando cisplatino, además tres factores principales: La modulación de la respuesta a los tratamientos mediada por la sobre o infra expresión de diferentes microARNs y de ARNs de cadena larga no codificante, que modulan la transición epitelial-mesenquimal, expresión de genes y proteínas que se encuentran asociados con aumento o disminución de la proliferación celular e inhibición de la apoptosis. La desregulación de diferentes componentes de las vías de señalización ERK, Akt/PI3K y Wnt/ β -catenina, finalmente la modulación de la respuesta a los tratamientos mediada por la infección de una cepa de alto riesgo de VPH y la sobre expresión de las oncoproteínas E6 y E7.

Referencias

- [1] Saxena, A., Yashar, C., Taylor, D. D., Gercel-taylor, C. (2005). Cellular response to chemotherapy and radiation in cervical cancer. <https://doi.org/10.1016/j.ajog.2004.12.045>
- [2] Herrera, M. P. J. (2018). Cáncer de mama y cuello uterino Colombia, 2018. VIGILANCIA Y ANÁLISIS DEL RIESGO EN SALUD PÚBLICA PROTOCOLO DE VIGILANCIA EN SALUD PÚBLICA CÁNCER DE MAMA Y CUELLO UTERINO, 2, 15.
- [3] Ziguí Chen, Ariana Harari, R. D. B. (2013). Human papillomavirus genome variants. *Virology*, 232–243.



SLMC2-194

IGF2 e IGF-1R modulan la expresión de factores de pluripotencia generada como respuesta a la privación de suero en HTR-8/SVneo

Oscar Mauricio Ramírez Ambrosio, Adriana Umaña Pérez.

Grupo de investigación en Hormonas. Universidad Nacional de Colombia–Sede Bogotá, Facultad de Ciencias, Departamento de Química. Cra 30 # 45-03 Ed. 451 Of. 464, Bogotá D.C., Colombia.

omramireza@unal.edu.co, yaumanap@unal.edu.co

Palabras clave: Pluripotencia, Cáncer, Factores de Crecimiento, Trofoblasto..

Resumen

Diversos estudios han puesto de manifiesto la relación entre la señalización celular mediada por el receptor del Factor de Crecimiento similar a la Insulina 1 (IGF-1R por su nombre en inglés, Insulin like growth factor 1 receptor), la expresión de Factores de Pluripotencia (FP) canónicos, el cáncer y la enfermedad trofoblástica gestacional, sin embargo, se desconoce la relevancia del IGF2, principal factor de crecimiento expresado durante la gestación, en la expresión mediada por IGF-1R de los FP Oct4 y Nanog en trofoblasto.

Métodos

Para responder este interrogante, se utilizó como modelo biológico la línea proveniente de trofoblasto humano del primer trimestre de gestación HTR-8/SVneo y una línea derivada de ella por silenciamiento estable para el IGF-1R (shRNA IGF-1R). Ambas líneas celulares se crecieron bajo privación de Suero Fetal Bovino (SFB) en presencia o ausencia de IGF2 durante 12, 24, 36, 48 y 72h. Los genes de interés fueron cuantificados mediante RT-qPCR.

Resultados y conclusiones

En las células parentales HTR-8/SVneo se observó una drástica y significativa disminución en la expresión del IGF-1R dependiente del tiempo ($p < 0.001$). Esta expresión no se alteró en respuesta a la estimulación con IGF2. En las células silenciadas, la expresión del receptor sólo presentó diferencias significativas al comparar el basal con el tiempo 12h no estimulado ($p < 0.001$), observándose un aumento en la expresión del receptor. La expresión de Oct4 y Nanog aumentó significativamente ($p < 0.001$) a las 12h posterior a la privación de SFB, de hecho, la expresión de Nanog fue alrededor de 24 veces mayor que la observada en la condición basal. Por otra parte, no se observaron diferencias significativas al comparar la expresión basal de los FP en las dos líneas. En la línea silenciada se observó un aumento significativo ($p < 0.001$) en la expresión de Oct4 al ser estimulada con IGF2. No se observaron diferencias significativas en la expresión de Oct4 ni de Nanog en las demás condiciones evaluadas para cada línea celular al compararlas con sus respectivas condiciones basales. Estos resultados muestran que HTR-8/SVneo sobreexpresa Nanog y Oct4 a las 12h como respuesta a la privación de SFB, probablemente como mecanismo de protección frente al estrés celular, manteniendo la potencialidad de regenerar sus poblaciones celulares. Además, se observó que IGF-1R es necesario para que dicha respuesta de corto plazo tenga lugar y que el estímulo con IGF2 permite la recuperación de la expresión temprana para Oct4 pero no para Nanog en las células silenciadas en IGF-1R.



Antimicrobianos al límite máximo de residuos y su efecto sobre proteínas del músculo animal

Erika Rodríguez-Cavallo,* Johana Márquez-Lázaro, Darío Méndez-Cuadro.

Grupo de Investigación en Química Analítica y Biomedicina, Facultad de Ciencias Farmacéuticas, Universidad de Cartagena.

*erodriguezc1@unicartagena.edu.co

Palabras clave: Proteínas, Carbonilación, Antimicrobianos, LMR

Introducción

La elevada población mundial ha incrementado la demanda de alimentos, y con ello, la ganadería intensiva y el uso de antimicrobianos para mantener el bienestar animal y la producción [1]. Los efectos de residuos de antimicrobianos sobre proteínas musculares, se describen bajo distintos modelos [2, 3].

Métodos

A fracciones proteicas de músculo bovino tratado con Fluroquinolonas, se determinó: índice de carbonilo, contenido proteico e identificación de proteínas oxidadas, mediante ensayo alcalino (2,4-dinitrofenilhidrazina), Western-blot, Bradford, y MS. Además, se evaluó su efecto sobre la digestión de las proteínas; y mediante un modelo *in vivo* basado en *Eisenia foetida*

Resultados y conclusiones

Concentraciones al LMR de Danofloxacina y Ciprofloxacina indujeron carbonilación significativa sobre proteínas miofibrilares y sarcoplásmicas ($p < 0,05$). Este daño se correlacionó con pérdida de solubilidad y digestibilidad, siendo las sarcoplásmicas las más afectadas. Danofloxacina fue la más oxidante, afectando proteínas de la glucólisis y del glucógeno.

Estos resultados, obtenidos bajo el modelo *in vitro*, se confirmaron con el modelo *in vivo* (*Eisenia foetida*). El análisis mediante MS (MALDI-TOF/TOF) identificó la Actina como la proteína más susceptible a la carbonilación. Se muestra por primera vez el poder oxidante de fluoroquinolonas en concentraciones al LMR sobre proteínas musculares bajo condiciones *in vivo*.

En conclusión, nuestros resultados sugieren que concentraciones al LMR de fluoroquinolonas inducen daño oxidativo irreversible en proteínas animales, afectando su valor nutricional. La homología de proteínas musculares en eucariotes permite sugerir que el efecto causado sobre *E. foetida* podrían experimentarlas proteínas de animales productores de alimentos para consumo humano.

Referencias

- [1] Silbergeld, E. K. (2019). One health and the agricultural transition in food animal production. In Global Transitions (Vol. 1). <https://doi.org/10.1016/j.glt.2019.01.003>
- [2] Ingenbleek, L., Hu, R., Pereira, L. L., Paineau, A., Colet, I., Koné, A. Z., ... Le Bizec, B. (2019). Sub-Saharan Africa total diet study in Benin, Cameroon, Mali and Nigeria: Pesticides occurrence in foods. Food Chemistry: X, 2(December 2018), 100034. <https://doi.org/10.1016/j.fochx.2019.100034>
- [3] MRLs-Codex Alimentarius. (2020). MRLs. Retrieved March 23, 2020, from <http://www.fao.org/fao-who-codexalimentarius/codex-texts/maximum-residue-limits/en/>



Caseínas carboniladas por residuos de antibióticos y pesticidas incrementan su alergenicidad *in vitro* e *in vivo*.

Albeiro Marrugo Padilla,¹ Gastón Rizzo,² Paola L. Smaldini,² Julián Vaccaro,² Darío Méndez Cuadro,¹ Erika Rodríguez Cavallo,¹ Guillermo H. Docena.^{2*}

¹Grupo de Química Analítica y Biomedicina - Universidad de Cartagena, Cartagena – Colombia.

²Instituto de Estudios Inmunológicos y Fisiopatológicos - Universidad Nacional de La Plata, La Plata - Argentina.

erodriguezc1@unicartagena.edu.co – guillermococena@gmail.com

Palabras Claves: Antibióticos Plaguicidas Alergenicidad Leche

Introducción

Algunas respuestas inmunes podrían relacionarse con nuevos epítopes en las caseínas (CAS) por cambios producidos por trazas de antibióticos y pesticidas [1]. Evaluamos el efecto de CAS carboniladas por concentraciones al LMR de TCs, β-lactámicos, fluoroquinolonas, PTDs o sus combinaciones, sobre la inmunorreactividad *in vitro* y la alergenicidad *in vivo*.

Metodología

Fracciones de CAS se expusieron a cada contaminante de modo *in vitro*. Se determinó la oxidación promovida (expresada como índice de carbonilos) por un método espectrofotométrico. Su inmunorreactividad *in vitro* se evaluó siguiendo un ensayo ELISA y dot blot³, y su alergenicidad *in vivo*, siguiendo un modelo murino³ de alergia [2].

Resultados y conclusiones

Los residuos de antibióticos y pesticidas promovieron carbonilación irreversible de CAS con valores entre 5.0 y 75 nmoles/mg de proteínas. CAS con índices de carbonilos > 19 nmoles/mg de proteínas incrementaron significativamente la inmunorreactividad mediada por IgE, tanto en ensayos ELISA como dot blot. Asimismo, ratones sensibilizados expuestos a CAS carboniladas, incrementaron sus signos clínicos e hinchamiento significativo de la almohadilla con respecto al blanco.

Referencias

[1] Candreva, A.; Smaldini, P.; Curciarello, R.; Fossati, C.; Docena, G.; Petruccelli, S. The Major Soybean Allergen Gly m Bd 28K Induces Hypersensitivity Reactions in Mice Sensitized to Cow's Milk Proteins. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2016, 64, 1590-1599.

[2] Milkovska-Stamenova, S.; Mnatsakanyan, R.; Hoffmann, R. Protein carbonylation sites in bovine raw milk and processed milk products. *Food Chemistry*, 2017, 229, 417-424.



Ensayo de aptitud para la detección de SARS-CoV-2

Sergio Luis Dávila González,^{1*} John Emerson Leguizamon Guerrero,¹ Maria Mercedes Arias Cortés,¹ Andres Felipe Leon Torres,¹
Esther Cristina Barros Lina,² Sergio Yebrail Gomez Rangel.²

¹Instituto Nacional de Metrología

²Instituto Nacional de Salud

*sldavila@inm.gov.co

Palabras Claves : SARS-CoV-2, COVID-19, RTqPCR, Metrología

Introducción

El brote de SARS-CoV-2, causante de la enfermedad COVID-19, ha generado importantes desafíos, especialmente para desarrollar herramientas que permitan atenuar el impacto de la pandemia. La correcta detección de personas infectadas para el control y seguimiento del avance de la pandemia es una de estas herramientas.

Métodos

Las muestras positivas correspondieron a diferentes diluciones gravimétricas del material RGTM10169 producido por NIST, se evaluó la homogeneidad y estabilidad del ítem de ensayo de aptitud se evaluaron de acuerdo con la Guía ISO 35: 2017, mediante RT-ddPCR y RT-qPCR.

Resultados y Conclusiones

La asignación de valor de cada uno de los tres niveles positivos se determinó mediante RT-ddPCR con valores de 1417 ± 216 copias/ μ L, 146 ± 28 copias/ μ L, 14 ± 10 copias/ μ L. En el Ensayo de aptitud participaron un total de 121 laboratorios los cuales utilizaron de una a tres secuencias objetivo de ARN para la detección, la secuencia del gen E fue el ensayo de mayor uso, seguida por RdRp y N (35%, 28% y 25% respectivamente). El 74% de los laboratorios participantes utilizaron plataformas de medición abiertas, donde solo se aplicó la transcripción inversa y amplificación de la muestra, el 26% restante los laboratorios utilizaron plataformas cerradas. La principal fuente de error fue la no detección de muestras asociadas con un nivel bajo de concentración de la secuencia objetivo.

Referencias

- [1] Dong L, Zhou J, Niu C, Wang Q, Pan Y, Sheng S, et al. Highly accurate and sensitive diagnostic detection of SARS-CoV-2 by digital PCR, 2020
- [2] Corman VM, Landt O, Kaiser M, Molenkamp R, Meijer A, Chu DK, et al. Detection of 2019 novel coronavirus (2019-nCoV) by real-time RT-PCR. Euro Surveill, 2020
- [3] World Health Organization, 2021. COVID-19 Weekly Epidemiological Update. [online] pp.20-29.



SLMC2-589

Interferencia de algunos detergentes en la inmunodetección del marcador exosomal CD81 en el secretoma de células de melanoma A375

S. Susana Novoa-Herrán,^{1*} Luis Alberto Gómez-Grossoa.^{1,2}

¹Grupo de Fisiología Molecular, Subdirección de Investigación Científica y Tecnológica, Dirección de Investigación en Salud Pública, Instituto Nacional de Salud, Colombia.

²Facultad de Medicina. Universidad Nacional de Colombia.

*snovoa@ins.gov.co

Palabras clave: vesículas extracelulares; exosomas, cáncer; tetraspanina 28

Introducción

El secretoma y las vesículas extracelulares tipo exosomas (VE) son una fuente promisoría de biomarcadores. Sin embargo, la cuantificación proteica y la inmunodetección del marcador exosomal CD81 puede ser afectada por detergentes usados en el proceso de lisis de VE1 y solubilización de proteínas de membrana2, procesos analíticos desafiantes.

Métodos.

El secretoma de células A365 fue concentrado por ultrafiltración, tratado con diferentes detergentes a diferentes concentraciones y en buffer Laemmli. Se cuantificó con el método de BCA y mediante fijación en membranas de nitrocelulosa y tinción con amidoblack3. El CD81 fue detectado mediante Dot- y Western-Blotting (n=3, p≤0,05).

Resultados y conclusiones

Se obtuvo el secretoma de células A375 enriquecido en VE menores a 200nm y proteínas mayores a 10kDa. El resultado de la cuantificación proteica y la inmunodetección de CD81 varió según el buffer de lisis usado (Tritón X-100 1%, NonidetP-40 1%, Deoxicolato de sodio 1%, SDS del 2% al 0.001%) y en buffer Laemmli con y sin calentamiento. El método de fijación y tinción con amidoblack permitió cuantificar las muestras tratadas con detergentes a alta concentración, a diferencia del método BCA. Mediante Dot-Blot se determinó que el Tritón X-100 y Nonidet P-40 interfieren en la detección del CD81, y se observó una mayor señal a mayor concentración de SDS (2%), obteniendo la máxima señal con el buffer Laemmli, detección confirmada mediante Western Blot. Los resultados sugieren que el SDS mejora la lisis de VE y la cantidad de proteína solubilizada es un factor determinante en la inmunodetección de CD81.

Referencias

- [1] Osteikoetxea, X.; Sódar, B.; Németh, A.; Szabó-Taylor, K.; Pálóczi, K.; Vukman, K. V.; Tamási, V.; Balogh, A.; Kittel, Á.; Pállinger, É.; Buzás, E. I., Differential detergent sensitivity of extracellular vesicle subpopulations. *Organic & Biomolecular Chemistry* 2015, 13 (38), 9775-9782.
- [2] Buschow, S. I.; Nolte-'t Hoen, E. N. M.; Van Niel, G.; Pols, M. S.; Ten Broeke, T.; Lauwen, M.; Ossendorp, F.; Melief, C. J. M.; Raposo, G.; Wubbolts, R.; Wauben, M. H. M.; Stoorvogel, W., MHC II in Dendritic Cells is Targeted to Lysosomes or T Cell-Induced Exosomes Via Distinct Multivesicular Body Pathways. *Traffic* 2009, 10 (10), 1528-1542.
- [3] Henkel, A. W.; Bieger, S. C., Quantification of Proteins Dissolved in an Electrophoresis Sample Buffer. *Anal. Biochem.* 1994, 223 (2), 329-331.



SLMC2-629

Alternativa para la detección de SARS-CoV-2 por RT-qPCR acoplada a SYBR Green

Valentina Guevara,* Andrea Carolina Barragán-Cárdenas, David Alejandro López-González, Andrés Correa-Sánchez, Sebastián Arcila-Barrera, Mauricio Urquiza, Adriana Umaña-Perez

Universidad Nacional de Colombia

*vguevarap@unal.edu.co

Palabras clave: COVID-19, qPCR, coronavirus, test diagnóstico

Introducción

El aumento exponencial de casos de contagio con SARS-CoV-2 a nivel mundial pone de manifiesto la importancia de la detección temprana para disminuir la velocidad de la progresión del contagio. Para realizar tamizaje a gran escala y detectar casos rápidamente, un test diagnóstico de bajo costo es necesario.

Métodos

Muestras de RNA de pacientes positivos para SARS-CoV-2 se retrotranscribieron mediante RT-PCR y posteriormente se realizó detección de los genes RdRp, E y RNP con los primers reportados por Corman et. al. (2020) usando un sistema de qPCR convencional acoplado a SYBR® Green. Los amplicones se observaron por electroforesis en gel de poliacrilamida.

Resultados y conclusiones

Se estandarizó la concentración y la temperatura de anillamiento de los primers para la detección del virus SARS-CoV-2 utilizando un volumen de reacción de 10µL. Las curvas de eficiencia muestran un comportamiento lineal y las curvas de fusión tienen una única señal correspondiente al amplicon esperado para cada uno de los genes. El gel de poliacrilamida muestra una única banda correspondiente al tamaño de pares de bases esperado. Con estos resultados es posible concluir que el sistema RT-PCR en dos pasos acoplado a SYBR Green permite la detección de los genes E y RdRp de SARS-CoV-2 y el gen RNP humano en muestras de RNA provenientes de pacientes.

Referencias

[1] Corman, V. M., Landt, O., Kaiser, M., Molenkamp, R., Meijer, A., Chu, D. K. W., Bleicker, T., Brünink, S., Schneider, J., Schmidt, M. L., Mulders, D. G. J. C., Haagmans, B. L., Van Der Veer, B., Van Den Brink, S., Wijsman, L., Goderski, G., Romette, J. L., Ellis, J., Zambon, M., ... Drosten, C. (2020). Detection of 2019 novel coronavirus (2019-nCoV) by real-time RT-PCR. *Eurosurveillance*, 25(3), 2000045. <https://doi.org/10.2807/1560-7917.ES.2020.25.3.2000045>



VEGETAL & AGRICULTURA

ILNC2-129

Hytoalexins-like phenalenones detected in apoplastic stem secretome of carnation (*Dianthus caryophyllus* L) during interaction with *Fusarium oxysporum* f. sp. *dianthi*

Martínez-González Ana Patricia,¹ Coy-Barrera Ericsson David,² and Ardila Barrantes Harold Duban.¹

¹Department of Chemistry, National University of Colombia, Bogotá, Colombia

²Department of Chemistry, Nueva Granada Military University, Bogotá, Colombia

*ana.martinez@unimilitar.edu.co

key-words : Carnation, Fod, Phytoalexins, Apoplast

Introduction

Vascular wilt caused by the fungus *Fusarium oxysporum* f. sp. *dianthi* is one of the most devastating diseases affecting the production of carnation. We present our current research related to the holistic survey of those metabolites accumulated in the carnation stem apoplast, as a consequence of the interaction with Fod.

Methods

Taking into account the characteristics of the apoplast, a solid-liquid polar extraction was carried out. In order to compare the metabolic profiles obtained at the apoplastic stem level during the plant-pathogen interaction, two cultivars with contrasting resistance to stem wilt were used. A separation method by RP-LC-DAD-ESI-MS was developed.

Results and conclusions

The obtained profiles were subjected to supervised multivariate statistics through discriminant analysis. Such an examination led to establish the differences in the metabolic composition of the carnation apoplastic fluid, depending on the cultivar, treatment and post-inoculation time. The time exhibiting the most significant metabolic changes were observed and the most relevant, differential peaks related to the response of the plant to the pathogen were also detected. In this regard, the most discriminant metabolites were annotated by HRMS data. Results indicated that the pathogen inoculation promotes the accumulation of four phenylphenalenone-like compounds at the apoplastic stem level, specifically related to lachnanthocarphone and hemofluorone moieties, which have been previously described as phytoalexins in other plant-pathogen interactions [1,2]. Such compounds were identified for the first time in this pathosystem model.

Referencias

[1] Otálvaro, F.; Nanclares, J.; Vásquez, L. E.; Quiñones, W.; Echeverri, F.; Arango, R.; Schneider, B. Phenalenone-Type Compounds from *Musa Acuminata* Var. “Yangambi Km 5” (AAA) and Their Activity against *Mycosphaerella Fijiensis*. *J. Nat. Prod.* 2007, 70 (5), 887–890. <https://doi.org/10.1021/np070091e>.

[2] Hidalgo, W.; Duque, L.; Saez, J.; Arango, R.; Gil, J.; Rojano, B.; Schneider, B.; Otálvaro, F. Structure–Activity Relationship in the Interaction of Substituted Perinaphthenones with *Mycosphaerella Fijiensis*. *J. Agric. Food Chem.* 2009, 57 (16), 7417–7421. <https://doi.org/10.1021/jf901052e>.



Citotoxicidad en fibroblastos humanos de extractos y compuestos de plantas con potencial uso en cosmética.

Silvia Juliana Flórez González,¹ Elena E. Stashenko,² Raquel Elvira Ocazonez,³ Jorge Luis Fuentes Lorenzo.^{1,2*}

¹Laboratorio de Microbiología y Mutagénesis Ambiental (LMMA), Grupo de Investigación en Microbiología y Genética, Escuela de Biología, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander (UIS), Bucaramanga, Colombia.

²Laboratorio de Cromatografía, CROM-MASS, Centro de Investigación en Biomoléculas, CIBIMOL, Escuela de Química, Facultad de Ciencias Universidad Industrial de Santander (UIS), Bucaramanga, Colombia.

³Centro de Investigaciones en Enfermedades Tropicales (CINTROP), Universidad Industrial de Santander (UIS), Departamento de Ciencias Básicas, Facultad de Salud, Bucaramanga, Colombia

*jfuentes@uis.edu.co, jflf2014@live.com

Palabras clave: Citotoxicidad, azul de tripano, fibroblastos humanos, plantas.

Introducción

La evaluación de la inocuidad de extractos y compuestos de las plantas usados como ingredientes cosméticos (antioxidantes, antibacterianos, antiinflamatorios y filtros solares, etc.), adquiere cada día mayor relevancia para la comercialización de este tipo de productos. El objetivo del trabajo fue evaluar la citotoxicidad en fibroblastos humanos de extractos y compuestos de plantas colombianas que muestran propiedades como filtros solares.

Métodos

Se estudiaron once extractos de especies de plantas colombianas y diez compuestos puros. Los extractos fueron obtenidos a partir de hojas y tallos mediante extracción de fluidos supercríticos (CO₂) o de flores mediante extracción hidroalcohólica. Los compuestos fueron adquiridos de casas comerciales. Para el estudio se cultivó la línea celular de fibroblastos humanos MRC5 en medio DMEM/F-12 suplementado con 10% de suero fetal bovino y con 1% de mezcla antibiótica penicilina/estreptomicina. La citotoxicidad de los extractos y compuestos fue ensayada mediante la tinción azul de tripano. Con este ensayo, las células vivas no permiten el paso del colorante; mientras que las células muertas, o con disrupción de sus membranas, se observan azules al microscopio óptico. Se calcularon las concentraciones de extractos y compuestos a las cuales sobreviven el 70% de las células (LD 30).

Resultados y conclusiones

Cuatro extractos obtenidos de las especies *Piper eripodon*, *Psidium sartorianum* y *Salvia aratocensis*, resultaron citotóxicos para los fibroblastos en el rango de concentraciones evaluadas. Los siete extractos restantes mostraron valores DL 30 (µg/mL) relativos como sigue: *Posoqueria latifolia* (750 ± 2) > *Rosa x centifolia* L4 (250 ± 2) = *Rosa x centifolia* L7 (250 ± 2) > *Chromolaena pellia* (145 ± 1) > *Ipomoea horsfalliae* (125 ± 1) = *Achyrocline satureioides* (125 ± 1) > *Lippia origanoides* (74 ± 1). Por su parte, el compuesto β-cariofileno resultó citotóxico para fibroblastos humanos en el rango de concentraciones evaluadas. Los valores DL 30 (µM) relativos para los restantes compuestos puros fueron como sigue: escualeno (810 ± 0) > óxido de titanio (456 ± 5) > ácido cafeico (448 ± 0) > ácido clorogénico (210 ± 0) > apigenina (180 ± 7) > quercetina (141 ± 2) > pinocembrina (98 ± 8) > resveratrol (68 ± 4) > curcumina (48 ± 7).

Los extractos obtenidos de las especies *P. eripodon*, *P. sartorianum* y *S. aratocensis*, y el compuesto β-cariofileno, resultaron citotóxicos en fibroblastos humanos. Los restantes extractos y compuestos son inocuos en este modelo celular a dosis ≤ a su LD 30; sugiriendo que estos pueden ser usados en futuras formulaciones para el desarrollo de protectores solares.



SLNC2-43

Actividad antimicrobiana de los extractos totales de *Cecropia mutisiana* Mildbr. sobre microorganismos cariogénicos

Luis G. Sequeda-Castañeda,¹ Laura P. Rocha-Figueroa,² Jennifer Blandón-Pardo,² Javier A. Matulevich-Peláez,² William F. Castrillón-Cardona,² Crispín A. Célis-Zambrano.¹

¹Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá, Colombia.

²Facultad de Ciencias y Educación, Proyecto Curricular de Licenciatura en Química, Bogotá, Colombia.

*lsequeda@javeriana.edu.co

Palabras clave: *Cecropia mutisiana*, actividad anticariogénica.

Introducción

La investigación en los campos químicos y biológicos de nuestra flora ha llevado al estudio de las especies endémicas colombianas en estos aspectos. El presente trabajo muestra los resultados obtenidos del estudio microbiológico realizado con los extractos totales (hexano, diclorometano, butanol, hidroetanólico) de las partes aéreas de *Cecropia mutisiana*.

Métodos

Se evaluó la actividad antimicrobiana de los extractos totales de la especie vegetal *Cecropia mutisiana* Mildbr. contra microorganismos cariogénicos (*Streptococcus mutans*, *Streptococcus sobrinus*, *Lactobacillus acidophilus* y *Lactobacillus casei*).

Resultados y conclusiones

Todos los extractos presentaron actividad antimicrobiana a diferentes concentraciones, siendo el extracto más activo el extracto en diclorometano al inhibir el crecimiento de la bacteria cariogénica *Streptococcus mutans* en 67.8% como Porcentaje Relativo de Inhibición con una Concentración Mínima Inhibitoria de 25 g/L.

El presente estudio es una contribución a la investigación antimicrobiana del género *Cecropia* y en particular la especie vegetal *Cecropia mutisiana* Mildbr, especie endémica colombiana, siendo éste es el primer reporte en cuanto a su actividad anticariogénica contra los microorganismos evaluados.

Referencias

- [1] Sequeda-Castañeda LG, et.al. (2015). Phytochemical and therapeutic use of *Cecropia mutisiana* Mildbr. (Urticaceae) an endemic plant from Colombia. *PharmacologyOnLine* 3, 62-64.
- [2] Balouiri M, et.al. (2016). Methods for in vitro evaluating antimicrobial activity: A review. *J Pharm Anal* 6, 71-79.
- [3] Ortíz-Ardila AE, et.al. (2017). Antioxidant and Antimicrobial capacity of *Cecropia mutisiana* Mildbr. (Cecropiaceae) leave extracts. *Emir J Food Agric.* 29(1):25-35.



SLNC2-181

Análisis metabolómico de plantas de aguacate Hass inoculadas con *Phytophthora cinnamomi*

Nathalie Guarnizo, Andree Álvarez, Diego Oliveros, María Bianney Bermúdez-Cardona, Jordi Eras, Walter Murillo Arango.*

Grupo de Investigación GIPRONUT, Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad del Tolima

*wmurillo@ut.edu.co

Palabras clave:

Introducción

Phytophthora cinnamomi causa una de las enfermedades más importantes en el cultivo del aguacate y su manejo químico representa el 25% del costo de la producción anual. La inducción de respuestas de defensa en plantas mediante elicitores es una estrategia prometedora que es compatible con la agricultura sostenible y puede incluirse en los planes de manejo integrado de enfermedades. En ese sentido, el elicitor de tipo β -1,3-glucano, curlano, ha demostrado ser efectivo en la activación de respuestas de defensa en plantas, como son: alcalinización del medio extracelular, producción de metabolitos como capsaicina y regulación de proteínas con diferentes funciones. Por tanto, este estudio tuvo como objetivo evaluar el efecto de la aplicación del β -1,3-glucano (curlano) en la inducción de respuestas de defensa en plántulas de aguacate contra *P. cinnamomi*.

Métodos

Los ensayos se realizaron en condiciones de invernadero, la aspersión foliar de curlano se hizo un día antes de la inoculación del patógeno. Se establecieron 4 tratamientos: plántulas inoculadas con patógeno más inductor (Curd+Phy), plántulas inoculadas con el patógeno sin inductor (Phy), plántulas solo con inductor (Curd) y testigo absoluto (Control), evaluados a las 0, 3, 24, 144 y 312 horas.

Resultados y conclusiones

Los resultados mostraron que la aplicación del elicitor aumentó significativamente la protección de las plántulas de aguacate frente a *P. cinnamomi*, disminuyendo el daño y marchitamiento causado por el patógeno. En el mismo sentido, los análisis de metabolómica empleando GC-MS muestran que los perfiles de metabolitos en los diferentes tratamientos, son diferentes desde el inicio, destacándose para Curd+Phy, un aumento en los primeros tiempos de ácido ferúlico, cafeico, sinápico, palmítico, vitamina E, entre otros, muchos de los cuales se mantienen en niveles más altos hasta el final de los muestreos, respecto de las plantas que solo estaban inoculadas con el patógeno (Phy). Por su parte, compuestos como el ácido p-cumárico, floroglucinol y catequina aumentaron en los tiempos finales de muestreo y aparecieron otros como emodina y timol en el tratamiento Curd+Phy respecto de Phy. Por lo tanto, estos resultados sugieren que el curdlan aumenta la protección contra *P. cinnamomi* debido posiblemente a la modulación de la respuesta de defensa, lo cual se evidencia en un aumento permanente de compuestos que tiene actividad antioxidante, antifúngica, protectora frente a patógenos, lo que finalmente se traduce en un aumento de la respuesta de defensa.



SLNC2-190

Efecto de la concentración de tiamina en la inducción de resistencia contra el marchitamiento vascular causado por *Fusarium* en clavel

Pérez Mora, W.,^{1,2*} Melgarejo, L.M.,¹ Ardila, H.²

¹Grupo de investigación en fisiología del estrés y biodiversidad en plantas y microorganismos, Departamento de Biología, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, sede Bogotá - Colombia

²Grupo de investigación en actividades metabólicas vegetales, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, sede Bogotá - Colombia

*whperez@unal.edu.co

Palabras Claves Incidencia, Resistencia-inducida, Severidad, Tiamina

Introducción

Colombia es el mayor productor de clavel del mundo. Sin embargo, los cultivos se ven afectados por el marchitamiento vascular causado por *Fusarium oxysporum f.sp. dianthi* (Fod); enfermedad que afecta de manera significativa su producción. Estudios previos encontraron que la tiamina induce resistencia a la enfermedad [1].

Métodos

Para evaluar el efecto de la concentración de tiamina sobre el marchitamiento vascular del clavel se aplicaron tratamientos de concentraciones 0 mM-0,1 mM-1,0 mM-10,0 mM-50 mM por aspersion sobre esquejes indexados de clavel (Florval-QFC-S.A.S.), posteriormente inoculados con Fod. Se realizaron mediciones de incidencia y severidad semanalmente, y el contenido de fenoles y flavonoides en raíces.

Resultados y Conclusiones

Los resultados obtenidos para las mediciones de fenoles y flavonoides de muestreos a las 0 y 12 h postinoculación con Fod y las mediciones de incidencia y severidad de la enfermedad de acuerdo a parámetros establecidos [2], se analizaron estadísticamente usando técnicas de análisis multivariado. El análisis de componentes principales muestra que el primer componente principal (50,7% de la varianza) separa al tratamiento inoculado sin tiamina, de todos los tratamientos con el inductor y el análisis de jerarquización por clusters confirma estos resultados. En conclusión, todas las concentraciones de tiamina trabajadas tienen un efecto positivo en la inducción de resistencia del clavel a la enfermedad, disminución en la incidencia y severidad encontrando que las concentraciones más bajas del inductor son las que presentan menor variabilidad y por tanto recomendadas como candidatas para futuros ensayos de aplicación de tiamina como alternativa sostenible para el control del marchitamiento vascular.

Referencias

[1] Pérez Mora, W.; Melgarejo, L.M.; Ardila, H.C. Effectiveness of some resistance inducers for controlling carnation vascular wilting caused by *Fusarium oxysporum f. sp. dianthi*, Arch Phytopath Plant Protect 2021 DOI: 10.1080/03235408.2020.1868734.

[2] Ardila, H. Contribución al estudio de algunos componentes bioquímicos y moleculares de la resistencia del clavel (*Dianthus caryophyllus* L) al patógeno *Fusarium oxysporum f. sp. dianthi*. Tesis de doctorado, Universidad Nacional de Colombia, 2013.



SLNC2-258

Actividad Antimicrobiana de Extractos etanólicos de cuatro plantas nativas de uno de los ambientes extremófilos de Chile: El Desierto de Atacama

Dioni Arrieche Polanco,^{1*} Lautaro Taborga Morales,² Hector Carrasco,³ Paula Santana,³ Javier Pardo.³

¹Universidad Técnica Federico Santa María - Universidad de Valparaíso

²Universidad Autónoma de Chile

³Programa de Conservación de Flora Nativa del Norte de Chile, Biorestauración Consultores.

*dioniarrieche@gmail.com

Palabras Claves : Actividad Antimicrobiana, Extracto etanólico

Introducción

Chile posee tres ambientes extremos: desierto de Atacama, la Antártida y la Araucanía andina. En estos parajes, habitan organismos (Extremófilos) que presentan adaptaciones químicas únicas que les permiten soportar por ejemplo bajas y altas temperaturas, entre otras condiciones, de allí la importancia de su estudio fitoquímico y sus actividades biológicas

Métodos

El material vegetal fue recolectado en la zona de Copiapó en el desierto de Atacama, los extractos etanólicos fueron preparados por maceración y extracción exhaustiva asistida por sonicación. La actividad antimicrobiana se evaluó contra *Escherichia coli* (ML-35) y *Staphylococcus aureus* (ATCC@25923TM), utilizando el método de microdilución en caldo

Resultados y Conclusiones

En este trabajo, la actividad antimicrobiana de cuatro plantas: *Pintoa chilensis*, *Nolana albescens*, *Krameria cistoidea* y *Skytanthus acutus* fue determinada. El material vegetal recolectado fue puesto a secar en estufa a 30°C por 96 hrs, seguidamente trituradas y puestos a macerar en una mezcla Etanol/agua (7:3) durante 96 hrs en un shaker incubador a velocidad constante (150 rpm) y una temperatura de entre 25 – 28°C. Luego fueron sometidos a sonicación exhaustiva (x3) a una temperatura de 50°C durante 1 hr., seguidamente fueron filtrados y el solvente fue eliminado a presión reducida obteniéndose los siguientes rendimientos: *P. chilensis* (Partes aéreas): 43.8%; *K. cistoidea* (Partes aéreas): 44.7%; *N. albescens* (Partes aéreas): 43%; *K. cistoidea* (semillas): 20.28%; *P. chilensis* (semillas): 30.45% y *S. acutus* (partes aéreas): 40.5%. Nuestros resultados muestran que el extracto etanólico de *K. cistoidea*, impidió el crecimiento de 1x10⁵ UFC/mL de *S. aureus*, a una concentración de 1 mg/mL

Referencias

- [1] Gidding, L.-A.; Newman, D. J. Bioactive compounds from terrestrial Extremophiles. Springer, New York. 2015.
- [2] Ramírez, N.; Serrano, J. A.; Sandoval, H. Rev. Mex. Cienc. Farm. 2006, 37(3), 56 – 71.
- [3] Kumar, L.; Awasthi G.; Singh B. Biotechnology. 2011, 10(2), 121 – 135.
- [4] Zhuang, X.; Han, Z.; Bai, Z.; Zhuang, G.; Shim, H. Environ. Pollut. 2010, 158, 1119 – 1126.
- [5] Pettit, R. K. Mar. Biotechnol. 2011, 13, 1 – 11.



SLNC2-277

Estandarización y establecimiento de la transformación mediada por *Agrobacterium* en cultivos embriogénicos de la especie *Theobroma cacao* L, para estudios de expresión génica.

Laura Michell Carmona Rojas,* Aura Inés Urrea Trujillo, Juan Felipe Tamayo, María Isabel Quintero

Universidad de Antioquia

*laura.carmona@udea.edu.co

Palabras Claves: *T.cacao*, *Agrobacterium*, GFP, embriogénesis.

Introducción

Para la caracterización funcional de los genes de *Theobroma cacao* es indispensable contar con sistema de transformación genética, no obstante, debido a los bajos porcentajes de transformación estable que se han reportado para la especie, los sistemas de transformación transitoria son alternativas versátiles para estos estudios.

Métodos

Se evaluó el efecto diferentes parámetros: sonicación, vacío, coadyuvante¹², vectores (pCambia 1302, pMDC85 y pG00.0126), tipo de explante (embriones somáticos y callo) y medio de activación, sobre la expresión transiente de la proteína verde fluorescente (GFP) en explantes embriogénicos de *T. cacao* genotipo CCN513, utilizando *Agrobacterium tumefaciens* AGL1.

Resultados y Conclusiones

La expresión transiente de GFP fue evaluada a partir del tercer día de co-cultivo con la bacteria y hasta 60 días, registrando la fluorescencia de los explantes, observada en el estereomicroscopio de fluorescencia. Los resultados demuestran un efecto positivo de la sonicación, el coadyuvante y el medio de activación sobre el porcentaje de explantes transformados, entre 60 y 70%. Con el vector pGH00.0126 y los embriones cotiledonares intermedios y tardíos se obtuvieron los mejores resultados. El crecimiento de la bacteria fue controlado con los antibióticos Timentin (150 mg/L) y Moxolactam (200 mg/L), este último demostró un efecto positivo en la respuesta embriogénica repetitiva. Respecto a la expresión estable en los embriones somáticos transformados, esta fue mucho más baja, entre 0.5 y 1.0%. La verificación de la inserción del gen GFP en el genoma vegetal y su expresión fue realizada por medio de técnicas de PCR convencional y tiempo real, respectivamente.

Referencias

- [1] Fister, A. S.; Shi, Z.; Zhang, Y.; Helliwell, E. E.; Maximova, S. N.; Guiltinan, M. J. Protocol: Transient Expression System for Functional Genomics in the Tropical Tree *Theobroma Cacao* L. *Plant Methods* 2016, 12 (1), 1–13.
- [2] Nanjareddy, K.; Arthikala, M. K.; Blanco, L.; Arellano, E. S.; Lara, M. Protoplast Isolation, Transient Transformation of Leaf Mesophyll Protoplasts and Improved *Agrobacterium*-Mediated Leaf Disc Infiltration of *Phaseolus Vulgaris*: Tools for Rapid Gene Expression Analysis. *BMC Biotechnol.* 2016, 16 (1), 1–14.



SLNC2-342

Efecto de la elicitación en la transcripción de algunos genes de defensa durante la interacción del clavel (*Dianthus caryophyllus* L) con el patógeno *Fusarium oxysporum* f.sp *dianthi*.

Santiago Monroy-Mena,* Harold Duban Ardila-Barrantes, Andrés Mauricio Pinzón-Velasco

Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia.

*smonroym@unal.edu.co

Palabras Claves: Clavel, ARNseq, Aminociclopropilcarboxilatooxidasa (ACO), Factor Transcripcional (ERF).

Introducción

En el presente trabajo se encontró que la aplicación de un elicitor de origen biótico en un ensayo *in vivo* disminuyó de la incidencia de la enfermedad causada por *Fod* en la variedad susceptible de clavel y cambios a nivel transcripcional de algunos genes relacionados en mecanismos de defensa[1].

Metodos

Ensayo *in vivo* con una variedad resistente y una susceptible sometidas a cuatro tratamientos y medición de la severidad de la enfermedad. Análisis transcriptómico de la elicitación en raíz por medio de ARNseq[2,3]. Técnica RT-qPCR para la medición de los niveles transcripcionales de genes relacionados con mecanismos de defensa.

Resultados y conclusiones

A nivel fenotípico se encontró una disminución de la severidad en la variedad susceptible previamente tratada con el elicitor. Se determinó que la elicitación generó un aumento en los niveles de transcripción de 1551 genes de los cuales, 347 se encontraban relacionados con respuesta a estrés. En esta categoría, se encuentran genes que codifican para proteínas relacionadas con patogénesis, rutas biosintéticas de metabolitos secundarios, reconocimiento de PAMPs y MAMPs y factores de transcripción de respuesta al etileno. A nivel transcripcional de los 4 de los genes seleccionados con potencial expresión diferencial mostraron que la elicitación sensibilización potencializa la expresión de una enzima aminociclopropilcarboxilato oxidasa relacionada con la biosíntesis del etileno y de una proteína que actúa como factor de respuesta a esta hormona. Estos resultados sugieren que la elicitación potencializa las rutas de señalización relacionadas con el Etileno y la inducción de resistencia en la variedad susceptible.

Referencias

- [1] Ardila, H; Martinez, S, T; Baquero, B. Inducción de La Actividad de La Enzima Fenilalanina Amonio Liasa En Clavel (*Dianthus Caryophyllus* L) Por El Hongo *Fusarium Oxysporum* f. Sp. *Dianthi* Raza 2. Rev. Colomb. Quim. 2007, 36 (2), 151–167.
- [2] Davidson, N. M.; Oshlack, A. Necklace: Combining Reference and Assembled Transcriptomes for More Comprehensive RNA-Seq Analysis. *Gigascience* 2018, 7 (5), 1–6.
- [3] Tarazona, S.; Garcia-Alcalde, F.; Dopazo, J.; Ferrer, A.; Coneso, A. Differential Expression in RNA-Seq: A Matter of Depth. *Genome Res.* 2011, 2213–2223.



CIENCIAS ÓMICAS Y BIOINFORMÁTICA

ILEC2-633

Rational design of peptides derived from human ACE2 protein with high binding affinity for SARS-CoV-2 spike protein using computational methods.

Mauricio Urquiza Martinez,^{1*} Cristian Nicolas Patiño Gomez,¹ Paula Andrea Vargas Pinilla,¹ Valentina Martinez Motta,¹ Diana Sofía Chaves Riascos,¹ Maria Fernanda Peralta Morales,¹ Derly Johana Diaz Ruiz.¹

¹Hormones research group, Faculty of Sciences, Universidad Nacional de Colombia

*murquizam@unal.edu.co

key-words: SARS-Cov-2, peptides, ACE2, In-Silico

Introduction

COVID-19 has affected the worldwide population. The computational design of high-affinity peptides to SARS-CoV-2 proteins could lead to the development of new detection and treatment methods that would control the virus spread and impact. ACE2, as natural ligand of Spike, is an optimal template for the design of peptides [1].

Methods

Spike-ACE2 binding site and residues were analyzed using PyMOL and GETAREA server Stability and helical behavior of peptides were predicted using Agadir server and molecular dynamics with explicit solvent using NAMD. Binding affinities of peptides for Spike protein was evaluated by molecular docking, using HDOCK server, and steered molecular dynamics [2].

Results y conclusions

10 ACE2-Spike complex structures were downloaded from the PDB, using GETAREA we found the solvent accessible areas of both the complex and ACE2. By comparing these 2 results we discovered a common 18 amino acids long helix (24th to 42nd residues) in ACE2 that is in proximity with Spike. We mutated residues from this original peptide to obtain a set of peptides that was filtered by sequence-based analysis with AGADIR. We further assessed the stability of a smaller set of peptides using molecular dynamics with explicit solvent during 20 ns, 5 peptides were selected from this step. Using HDOCK, we found that peptides AH3, AH6 and AH9 had the best docking scores and therefore we used steered molecular dynamics in them, and we found that peptide AH3 and AH6 required longer pulling times for disassociation than the original peptide and therefore could bind with spike protein with greater affinity.

Referencias

- [1] Larue, R.; Xing, E.; Kenney, A.; Zhang, Y.; Tuazon, J.; Li, J.; Yount, J.; Li, P.; Sharma, A. Rationally Designed ACE2-Derived Peptides Inhibit SARS-Cov-2. *Bioconjugate Chemistry* 2020, 32 (1), 215-223.
- [2] Kumari, L.; Sudan, J.; Sudandiradoss C. Evaluation of peptide designing strategy against subunit reassociation in mucin 1: A steered molecular dynamics approach. *PLoS ONE* 2017 12 (8).



ILOC2-188

Proteomic profile of the edible mushroom *Lentinula edodes* cultured by liquid state fermentation in two different broths

Carolina Vega-Oliveros,¹ Carolina Chegwin-Angarita,¹ Harold D. Ardila,¹ Maria Angeles Castillejo,² Jesús V. Jorrín-
Novo.²

¹Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia

²Dept. of Biochemistry and Molecular Biology. University of Cordoba, Spain

*cvegao@unal.edu.co

key-words: Biotechnology, Fungi, Proteomics, Shiitake

Introduction

Macromycetes offer different chemical compounds with the biological potential to be used in nutrition, industry, pharmacy, and nutraceuticals. There is a current branch of research focused on improving its cultivation conditions to increase the production yield or for generating bioactive molecules/peptides.

Methods

A strain of *L. edodes* was grown in submerged fermentation in two different broth called GPY and BIE in orbital shaking of 150 rpm, 25°C for 10 days. The mycelia were collected and proteins were extracted for determining protein profile and comparing the effect of growing in them

Results and conclusions

The biomass yield in BIE broth was higher than in GPY. Also, the mycelium of the fungus growing in GPY allowed the detection of 100 proteins, while in BIE, were detected 1360 proteins, including the previous 100 discovered in GPY. BIE broth which is a complex mix of different carbon sources induced a wide variety of proteins. As GPY broth instead had only glucose as a carbon source, the strain produced a small variety of intramycelial proteins, especially a low relative intensity of carbohydrate metabolism proteins. This behavior would probably indicate a state of senescence of the fungus in this medium and depletion of its carbon source (glucose). On the other hand, in BIE, the wide variety of proteins included some with a bioactive potential of the antioxidant type, lectins, and a greater variety and relative intensity of carbohydrate metabolism proteins that may become applicable in biotechnology.

References

[1] Chen, L.; Gong, Y.; Cai, Y.; Liu, W.; Zhou, Y.; Xiao, Y.; Xu, Z.; Liu, Y.; Lei, X.; Wang, G.; Guo, M.; Ma, X.; Bian, Y. Genome Sequence of the Edible Cultivated Mushroom *Lentinula Edodes* (Shiitake) Reveals Insights into Lignocellulose Degradation. 2016. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0160336>



SLOC2-191

Anotación de metabolitos y péptidos en cacao mediante metodología automatizada usando fragmentación *in silico*

Martha Zuluaga,^{1,2*} Margareth Santander,¹ Fabrice Vaillant,¹ Sebastian Escobar.¹

¹Corporación Colombiana de Investigación Agropecuaria (Agrosavia), Process & Quality Cocoa Laboratory. Centros de Investigación Palmira, Tibaitatá y La Selva.

²Universidad Nacional Abierta y a Distancia. Escuela de Ciencias Básicas Tecnología e Ingeniería. Transversal 25 F Carrera 23 Dosquebradas, Risaralda.

*martha.zuluaga@unad.edu.co

Palabras clave: Anotación de metabolitos, Metabolómica, Peptidómica

Introducción

La anotación de metabolitos es uno de los pasos menos eficientes en el procesamiento de datos metabolómicos y continúa siendo el cuello de botella de los análisis metabolómicos, ya que de acuerdo a la matriz estudiada hay un número limitado de espectros de MS-MS y la inspección se realiza manualmente [1,2].

Métodos

Este estudio se centra en proponer una metodología automatizada del proceso de anotación de metabolitos y péptidos usando espectros predictivos de la fragmentación *in silico* de los compuestos candidatos. Para esto se usaron datos experimentales de un estudio de metabolómica no dirigida en cacao mediante LC/MS-MS.

Resultados y Conclusiones

Se descargó el metaboloma del cacao de plantcyc.org y se calculó la masa para cada uno de los posibles aductos. Posteriormente, se realizó la comparación del ion molecular de los datos experimentales con los de la librería y posibles aductos, mediante un proceso automatizado estableciendo un error umbral de 20 ppm. De este, se obtiene una lista de compuestos candidatos por cada señal., a la cual se les determina el espectro teórico mediante la fragmentación *in silico* a tres energías de ionización. Finalmente, los espectros de MS-MS teóricos y experimentales son comparados para establecer el metabolito anotado. Para la anotación de péptidos se realiza un paso adicional que es la traducción del péptido a nomenclatura SMILES en un proceso automatizado usando web scraping . Esta metodología permite disminuir el tiempo de anotación de metabolitos y puede ser replicable a cualquier otra matriz biológica.

Referencias

- [1] Senan, O.; Aguilar-Mogas, A.; Navarro, M.; Capellades, J.; Noon, L.; Burks, D.; Yanes, O.; Guimerà, R.; Sales-Pardo, M. CliqueMS: A Computational Tool for Annotating in-Source Metabolite Ions from LC-MS Untargeted Metabolomics Data Based on a Coelution Similarity Network. *Bioinformatics* 2019, 35, 4089–4097.
- [2] Godzien, J.; Gil de la Fuente, A.; Otero, A.; Barbas, C. Metabolite Annotation and Identification. In *Comprehensive Analytical Chemistry*; Comprehensive analytical chemistry; Elsevier, 2018; pp. 415–445.



SLOC2-233

Modelamiento y docking molecular de péptidos derivados de toxinas de escorpión *Tityus macrochirus* (BUTHIDAE), con alta afinidad frente al receptor canal voltaje dependiente a potasio kv10.1

Mauricio Gantiva,* Edgar Antonio Reyes Montaña, Nohora Angelica Vega Castro

Universidad Nacional de Colombia

*mgantivag@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Kv10.1, *Tityus*, *Macrochirus*, Citotóxico.

INTRODUCCIÓN

Un target de interés terapéutico ha sido el canal Kv10.1 que se expresa en tejidos cancerosos, y en donde los bloqueadores de este canal han sido usados como agentes antiproliferativos. En el presente estudio se modeló y se realizó docking molecular, para la obtención de 4 péptidos candidatos.

MÉTODOS

Se realizó el modelamiento por los servidores I-TASSER y SWISS-MODEL. Los archivos de los modelos resueltos fueron preparados usando AudockTools 1.5.6. El docking molecular se realizó con AutodockVina definiendo como receptor el canal Kv10.1 y como ligandos los péptidos de 65 aa y 35 aa (Tma1 y FV2-16).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

El modelo obtenido por SWISS-MODEL para el receptor mostró un 99.63% de identidad frente a una estructura reportada en el PDB (5K7L), El principal modelo usado como plantilla por SWISS MODEL para la construcción del modelo de Tma1 fue la neurotoxina VII (Ts1) de *Tityus Serrulatus* (Código PDB: 1NPI) con una identidad de 57% y cobertura del 94%. Para el péptido FV2-16 fue ideal obtener el modelo por el servidor I-TASSER. En este último caso el modelo presentó un C-score > -1.5 (-1.30). Teniendo en cuenta las energías de interacción para cada uno de los docking y el número de interacciones significativas, fueron seleccionados para Tma1, 2 péptidos derivados, uno 19 residuos y otro de 12 residuos. Para FV2-16 fueron seleccionados 2 péptidos derivados de 12 residuos cada uno. Como conclusión pudimos realizar el análisis de modelado y Docking molecular determinando cuatro péptidos candidatos a tener actividad sobre canales KV10.1.

Referencias

- [1] Fosgerau, K; Hoffmann, T. Peptide therapeutics: current status and future directions. *Drug Discov Today* [Online]. 2015 ;20(1):122–8. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/25450771>. [visitado abril 1,2021].
- [2] Rincón-Cortés, CA; Reyes-Montaña, EA; Vega-Castro, NA. Purificación parcial de péptidos y actividad citotóxica del veneno *T. macrochirus*. *Biomédica*. 2017. 37:238-249.
- [3] Wulff, H; Castle, NA; Pardo LA. Voltage-gated potassium channels as therapeutic targets. *Nat Rev Drug Discov* [Online]. 2009; 8(12):982–1001. <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/19949402>. [visitado abril 1,2021]



SLOC2-371

Análisis *in silico* de derivados de Floretina, Cumato y Vanilato para suprimir expresión génica en *Drosophilla melanogaster* modificadas genéticamente

Juan Nicolás Fuentes,¹ María Lucía Otero,¹ Luis Carlos Vesga,^{1,2} Stelia Carolina Méndez Sánchez.^{1,2*}

¹Grupo de investigación en Bioquímica y Microbiología (GIBIM), Parque Tecnológico Guatiguará, Universidad Industrial de Santander, A.A. 678, Piedecuesta, Colombia.

²Grupo de Investigación en Compuestos Orgánicos de Interés Medicinal (CODEIM), Parque Tecnológico Guatiguará, Universidad Industrial de Santander, A.A. 678, Piedecuesta, Colombia.

*scmendez@uis.edu.co

Palabras Claves: supresión génica, docking molecular

Introducción

En la actualidad, los insectos se consideran una problemática asociada a la pérdida de producción en la agricultura y en la transmisión de enfermedades a pesar de los avances investigativos en el manejo de plagas [1] y, en consecuencia, los métodos genéticos de control de plagas han adquirido creciente importancia.

Métodos

Los sistemas de expresión genética regulados son una técnica para el control poblacional porque permite emplear proteínas represoras como estrategia para la inducción de letalidad sexo específica en insectos. Por tanto, en el laboratorio Akbari (Universidad de California, San Diego UCSD) se generaron moscas *Drosophila melanogaster* modificadas genéticamente.

Resultados y Conclusiones

Estas moscas presentan sistemas binarios formados por las proteínas represoras, VanR, CymR y TtgR. En cultivos *in vitro*, se ha demostrado que estos sistemas reprimen la transcripción, sin embargo, en modelos *in vivo* no se obtienen los mismos resultados. Es posible que este resultado sea consecuencia de la baja biodisponibilidad de los reguladores. Por consiguiente, se realizaron modelos de homología de las proteínas, se construyó una base de compuestos derivados de Vanilato, Cumato y Floretina, y se calcularon las propiedades ADME para cada compuesto. Posteriormente, se realizó un screening virtual mediante Glide docking v8.9. Nuestros resultados sugieren que los compuestos ácido-4-(hidroximetil)-benzoico, ácido-3-bromo-2- metilbenzoico y quercetina son buenos candidatos represores. Como conclusión, se espera que los compuestos identificados puedan suprimir la expresión génica mediante las interacciones presentadas con los residuos G58 y R85 de la VanR; N136, F166 y R170 de la CymR; N110 y H114 de la TtgR.

Referencias

- [1] Joint FAO/IAEA Division. (1987). Report of the advisory group meeting on genetic methods of insect control. Genetic methods of insect control, (págs. 3-4). Vienna, Austria.
- [2] Kaczmarczyk, A., Vorholt, J. A., & Francez-Charlot, A. (2013). Cumate-Inducible Gene Expression System for Shingomonads and Other Alphaproteobacteria. *Applied and Environmental Microbiology*.
- [3] Yun Min kwak, Sun Cheol Park, Hye-won Na, Seung Goo Kang, Geun-Shik Lee, Hyun-Jeon Ko, ...Sung-il Yoon. (2018). Crystal structure of the VanR transcription factor and the role of its unique α -helix in effectorrecognition. *The FEBS Journal*.
- [4] Yilmaz Alguel, Cuixiang Meng, Wilson Terán, Tino Krell, Juan L. Ramos, María- Trinidad Gallegos, & Xiaodong Zhang. (2007). Crystal Structures of Multidrug Binding Protein TtgR in Complex with Antibiotics and Plant Antimicrobials. *Journal of Molecular Biology*.



SLOC2-385

Estudio *in silico* de compuestos volátiles de plantas medicinales del pacífico colombiano contra proteínas de SARS-CoV-2.

Neyder Contreras-Puentes,^{1*} Manuel Salas-Moreno,² Lina Mosquera Chavera,³ Leonomir Córdoba-Tovar,³ Antistio Alviz-Amador.⁴

¹GINUMED, Medicina, Corporación Universitaria Rafael Núñez, Cartagena D.T y C., Colombia

²Facultad de Ciencias Naturales, Biología, Grupo de Investigación Biosistemática, Universidad Tecnológica del Chocó, Quibdó, Colombia.

³Grupo de Investigación en Recursos Naturales y Toxicología Ambiental, Universidad Tecnológica del Chocó, Quibdó, Colombia.

⁴Grupo de Farmacología y Terapéutica, Universidad de Cartagena, Cartagena D.T y C., Colombia.

*neyder.contreras@curvirtual.edu.co

Palabras claves: SARS-CoV-2 COVID-19 Docking GC-MS

Introducción

COVID-19 es una pandemia caracterizada por una serie de compromisos multisistémicos, la cual ha generado más 130 millones de infectados y alrededor de 2,5 millones de fallecimientos. Sin embargo, el desarrollo de un tratamiento ha llevado al estudio de productos naturales como posibles alternativas terapéuticas como candidatos contra SARS-CoV-2 [1].

Métodos

Se obtuvieron extractos etanólicos de *Phyla dulcis* y *Chenopodium ambrosioides* L., concentrados por rota- evaporación e identificación de metabolitos por GC-MS. Posteriormente, se realizaron estudios *in-silico* mediante acoplamiento molecular contra Mpro y PLpro utilizando Autodock-vina 1.1 basado en PyRx 0.8. Así como predicción ADMET mediante el servidor SwissADME y GUSAR-Online[2].

Resultados y conclusiones

Se identificaron 15 compuestos volátiles con similitud superior al 85% de ambos extractos, en su mayoría compuestos terpénicos. Los compuestos que mostraron la mayor afinidad contra Mpro fueron el α -amorfeno y el fitol por PLpro. Asimismo, se contrastaron con moléculas co-cristalizadas como Boceprevir y VIR2-251 como estructuras control. Finalmente, en las predicciones de ADMET las propiedades mostraron valores consistentes con la literatura. Por ello, se consideró el seguimiento de estudios *in-silico* con estas plantas como posibles herramientas en la búsqueda de moléculas activas frente a proteínas ligadas en la patogenia viral [3].

Referencias

- [1] Asif, M., Saleem, M., Saadullah, M., Yaseen, H. S. and Al Zarzour, R. COVID-19 and therapy with essential oils having antiviral, anti-inflammatory, and immunomodulatory properties', *Inflammopharmacology*. 2020, 28(5), 1153–1161.
- [2] Dallakyan, S. and Olson., A. J. Small-Molecule Library Screening by Docking with PyRx, 2015. *Methods Mol Biol*. 2015, 1263, 243–50.
- [3] Panikar, S., Shoba, G., Arun, M., Sahayarayan, J. J., Nanthini, A. U. R., Chinnathambi, A., Alharbi, S. A., Nasif, O. and Kim, H.-J. Essential oils as an effective alternative for the treatment of COVID-19: Molecular interaction analysis of protease (Mpro) with pharmacokinetics and toxicological properties. *J Infect Public Health*. 2021, 14(5):601-610.



MICROORGANISMOS & BIOTECNOLOGÍA

SLPC2-11

Bioenergética mitocondrial en estadios juveniles y adulto de *Aedes aegypti* (Diptera: Culicidae)

Ruth Castillo,¹ Diana Urbina,^{1,2} Jonny Edward Duque,¹ Stelia Carolina Méndez-Sánchez.^{2*}

¹Centro de Investigación en Enfermedades Tropicales (CINTROP), Parque Tecnológico Guatiguará, Universidad Industrial de Santander, A.A. 678, Piedecuesta, Colombia.

²Grupo de investigación en Bioquímica y Microbiología (GIBIM), Parque Tecnológico Guatiguará, Universidad Industrial de Santander, A.A. 678, Piedecuesta, Colombia.

*scmendez@uis.edu.co

Palabras clave:

Introducción

La mitocondria está implicada en procesos vitales para la célula, como la producción de energía, participación en la señalización celular y síntesis de moléculas clave en el funcionamiento de la célula. En este orgánulo se sintetiza ATP por medio de la fosforilación oxidativa, acoplado a la actividad de la cadena transportadora de electrones (CTE). El estudio de la CTE en insectos se ha enfocado en conocer sus características fisicoquímicas como punto blanco de acción para diferentes compuestos, comprender diferentes mecanismos de resistencia y diseñar nuevas alternativas que favorezcan el control poblacional. Para insectos de importancia médica como *Aedes aegypti*, los estudios que describen la bioenergética mitocondrial se han realizado en tórax de adultos. Sin embargo, no hay estudios que describan la bioenergética mitocondrial de esta especie en estadios juveniles.

Métodos

En el presente estudio se evaluó la función respiratoria de mitocondrias aisladas y tejido permeabilizado de larvas (L4), pupas y tórax de *Ae. aegypti* usando un Oxygraph-2k (Oroboros Instruments), con los sustratos Glutamato (5mM), Malato (10 mM), Prolina (10mM) + Piruvato (10mM), Succinato (3mM) y Glicerol 3 fosfato (20mM). Se calculó el Coeficiente de Control Respiratorio (CCR) en condiciones normales y con un estado 4 inducido con Oligomicina. Adicionalmente, se evaluó la actividad enzimática de algunas enzimas de la CTE: NADH oxidasa, Succinato oxidasa, Citocromo c oxidasa, NADH deshidrogenasa, Succinato deshidrogenasa, NADH citocromo c reductasa, Succinato citocromo c reductasa y ATPasa.

Resultados y conclusiones

Para mitocondrias aisladas se encontró un mayor valor de consumo de oxígeno con el sustrato Succinato en todos los estadios de desarrollo, sugiriendo un mayor ingreso de electrones vía Complejo II. Considerando que se evaluaron 1 y 5 individuos permeabilizados de cada estadio, se encontraron valores más altos de respiración con 5 individuos permeabilizados con el sustrato Succinato en todos los estadios de desarrollo. Los valores de CCR (≤ 3) indican la presencia de mitocondrias desacopladas tanto para mitocondrias aisladas como para individuos permeabilizados. Los resultados de la actividad enzimática muestran una mayor actividad del Complejo I en larvas. Para pupas, se encontró una mayor actividad del Complejo III, mostrando que este estadio emplea los electrones que ingresan vía NADH y Succinato. Para adultos, se encontró un mayor ingreso de electrones vía Complejo I y II. Estos resultados permitieron describir las diferencias funcionales a nivel mitocondrial y comprender los requerimientos energéticos de cada uno de los estadios de desarrollo de *Ae. aegypti*.



Conceptual design methodology for food with *Lentinula edodes* mycelia: advances and perspectives

Carolina Vega-Oliveros,¹ Fabian Rico,² Harold D. Ardila,¹ Carolina Chegwin-Angarita.¹

¹Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, sede Bogotá

²Programa de Ingeniería de Alimentos, Universidad de Cartagena.

*cvegao@unal.edu.co

Key-words: Functional Food, Shiitake, Submerged Fermentation, Conceptual Design Points

Introduction

The increase in the prevalence of chronic non-infectious diseases (CNID) has motivated the increment in the consumption of natural foods, supplements, enriched or containing nutraceutical compounds to reduce the ailments of CNID. Some compounds of interest are vitamins and minerals. However, other compounds have aroused consumer interest, such as polysaccharides (β -glucans), triterpenoids, and essential fatty acids that improve the body's immune system and other functions. These compounds have been found in fungi, and they could be used as a nutraceutical to increase their consumption. *L. edodes* is a basidiomycete with interesting compounds for health promotion and CNID prevention. Previously, it was found that some specific culture conditions produced bioactive compounds of interest in sufficient concentrations to be used in the development of foods with functional properties. The time for food and process design is coming shortly. To improve the efficiency of the design development cycle, design methodologies can be used to generate new processes and redesign existing processes. In this work, we aimed to develop a type of dessert food to generate a new brand product to promote fungi consumption and approach their bioactive compounds. Conceptual process design is an uprising field in the academy and food industry. Food design is focused not only on sensory and rheological properties but also on molecular interactions, biodisponibility, and biodigestibility of the compounds.

Methods

We developed a new food by using the conceptual design methodology following some basic steps: firstly, we evaluated a group of foods where mycelium could merge, causing the minimum disturbance in the food matrix. A matrix of advantages and disadvantages of the different foods proposed was made, and the one with the best perspective was selected. Also, it was necessary to propose some flavors that could hide the strong attributes of mycelia. Once this issue was solved, the next step was to design the unit operations for the required process.

Results and conclusions

After proposing a process diagram, the food was made with different quantities of mycelium and flavoring agents and its subsequent quality analysis to determine that the food met the desired quality standards. Finally, the product with the best conditions was determined using statistical tools, which allowed us to define that a dessert-type product with the addition of 20 g/l of wet mycelium and berry flavor was the most viable to produce a potential functional food aimed at a population who required of cholesterol control [1].

References

[1] Reinheimer MA. Diseño Conceptual de Procesos en Ingeniería de Alimentos. Incorporación de la Microestructura en el Análisis. Universidad Nacional del Litoral; 2011.



Herramientas de la biotecnología blanca aplicadas a la obtención de oleoquímicos como fuente de energía y como nutraceuticos.

César Godoy Vargas,^{1*} Esteban Toro Alzate,¹ César Carrasco López.²

¹Universidad del Valle

²Princeton University

*cesar.godoy@correounivalle.edu.co

Palabras Claves: Lipasas Inmovilización Biodiesel Omega-3

Introducción

Irónicamente muchos oleoquímicos diseñados para sustituir petroquímicos se producen industrialmente empleando catalizadores poco sostenibles. Los biocatalizadores son alternativas verdes pero su costo y menor actividad limitan su uso. Este trabajo muestra que la combinación de estrategias como la ingeniería de proteínas y de inmovilización pueden contribuir a superar estos impedimentos.

Métodos

Se obtuvieron derivados basados en lipasas y soportes comerciales y se evaluó su uso individual y combinado en síntesis de biodiesel (CG-MS/FTIR-ATR). Para obtener una lipasa mutante cuyo conformero activo fuera más estable, se empleó análisis estructural, mutagénesis dirigida, producción heteróloga (E.coli) y se evaluó su actividad en hidrólisis (DNAseq/UV-Vis/HPLC).

Resultados y Conclusiones

Los biocatalizadores basados en lipasas inmovilizadas en una misma partícula de soporte fueron 10% más activos en producción de ésteres de ácidos grasos (principales componentes del biodiesel) que sus contrapartes Combi-lipasas donde cada enzima está inmovilizada en diferentes partículas; la naturaleza del soporte incidió en las propiedades observadas obteniéndose por primera vez Combi-lipasas basadas en una misma enzima (semiCombi-lipasa); los biocatalizadores generados fueron hasta 70% más activos que la referencia industrial Novozyme®. El mutante “disulfuro” inmovilizado de la lipasa BTL mostró actividades y selectividades similares en la obtención de omega- frente a su par nativo (molEPA/molDHA= 1.8±0.2), pero su actividad hidrolítica contra un éster sintético no solo es modulable sino hasta seis veces mayor en presencia de detergentes y oxidantes.

References

- [1] Toro, E. C.; Rodríguez, D. F.; Morales, N.; García, L. M.; Godoy, C. A. Novel Combi-Lipase Systems for Fatty Acid Ethyl Esters Production. *Catalysts* 2019, 9 (6), 546. <https://doi.org/10.3390/catal9060546>.
- [2] Godoy, C. A.; Klett, J.; Di Geronimo, B.; Hermoso, J. A.; Guisán, J. M.; Carrasco-López, C. Disul de Engineered Lipase to Enhance the Catalytic Activity: A Structure-Based Approach on BTL. *Int. J. Mol. Sci.* 2019, 20 (21), 5245. <https://doi.org/10.3390/ijms20215245>



***Chlamydomonas reinhardtii*, un sistema eucariota para la expresión de proteínas recombinantes**

Sharon Eliana Villamil-Silva,* María Helena Ramírez-Hernández.

Laboratorio de Investigaciones Básicas en Bioquímica (LIBBIQ), Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Carrera 45 # 26-85, Bogotá, Colombia.

*sevillamils@unal.edu.co

Palabras clave: Algas, glicoproteínas, membrana.

Introducción

Las algas unicelulares constituyen un sistema heterólogo promisorio para la expresión de proteínas recombinantes (PR). En el proceso se usa un eucariota inocuo, de rápido y fácil crecimiento con distribución cosmopolita; que cuenta con la maquinaria transcripcional y traduccional para el plegamiento de proteínas con modificaciones postraduccionales de diversos organismos [1].

Métodos

Clonación en pGEM-T. A partir del Glico-pET30 y con los primers diseñados, fue construido pGEM-T-GPVR. Construcción de pChlamy_4-GPVR. Usando EcoRI y BglII, se obtuvo el vector de expresión algal [2]. Transfección de la microalga *C. reinhardtii* fue cultivada en medio TAP y transformada por electroporación, proceso monitoreado por SDS-PAGE y WB.

Resultados y conclusiones

Se empleó como modelo de expresión en el sistema la glicoproteína G del virus de la rabia (GPVR), mayor determinante de patogenicidad e importante herramienta para el diagnóstico de la enfermedad, cuya producción en sistemas mamíferos es dispendiosa y de alto costo [3]. Para ello, pChlamy_4 fue purificado por Maxi-preparado; en paralelo, la GPVR fue clonada en el pGEM-T para subclonación. Con el propósito de construir el clon de expresión algal, tanto vector como inserto en pGEM-T fueron digeridos enzimáticamente. El inserto liberado y purificado, fue ligado en pChlamy_4, el plásmido obtenido pChlamy_4-GPVR fue corroborado por PCR y digestión enzimática. A la par de la construcción del vector recombinante de expresión, se mantuvo el cultivo del alga *C. reinhardtii* en medio TAP; siendo este material biológico esencial para ensayos de transformación por electroporación y expresión. Tras la obtención de clones, la producción de la GPVR fue monitoreada por SDS-PAGE y WB.

References

- [1] E. H. Harris, «Chlamydomonas as a Model Organism», *Plant Physiol. Plant Mol. Biol.*, vol. 52, pp. 363-406, 2001.
- [2] C. number A24231 y Invitrogen, GeneArt TM Chlamydomonas Protein Expression Vector. 2016.
- [3] A. Ross B., M. Favi C., y A. Vásquez V., «Glicoproteína del virus rábico: Estructura, inmunogenicidad y rol en la patogenia», *Rev. Chil. Infectol.*, vol. 25, n.o SUPPL. 1, 2008.



SLPC2-236

Preparación de liposomas enriquecidos con curcumina y aceite esencial de *Lippia origanoides* y evaluación de su actividad antimicrobiana y citotóxica *in vitro*.

Juan Pablo Bedoya Agudelo,^{1*} Edwin Stiven Quiguanás Guarín,¹ Camilo Andrés Agudelo Marín,^{1,2} Leonardo Padilla Sanabria,¹ Néstor Iván Cardona Perez,² Jhon Carlos Castaño Osorio.¹

¹Grupo de Inmunología Molecular, Universidad del Quindío.

²Grupo de Investigación en Salud Oral, Universidad Antonio Nariño.

*jpbedoyaa@uqvirtual.edu.co

Palabras clave: Liposomas, Curcumina, Aceite esencial

Introducción

Los compuestos naturales como la curcumina y el aceite esencial de *Lippia origanoides* tienen un amplio espectro de actividades biológicas, sin embargo, su inestabilidad fisicoquímica, limita su uso terapéutico. El objetivo de este trabajo es producir liposomas cargados con ambos compuestos y evaluar su actividad antimicrobiana y citotóxica *in vitro*.

Métodos

Se caracterizó el aceite esencial mediante GC-MS. Se evaluó la actividad antimicrobiana de los compuestos sin encapsular mediante microdilución en placa [1] y la actividad citotóxica sobre células VERO utilizando el método de resazurin. Se han producido liposomas vacíos y cargados utilizando el método de capa delgada [2].

Resultados y conclusiones:

Se evidenció la presencia de 51 compuestos en el aceite esencial de *Lippia origanoides*, de los cuales, los componentes mayoritarios fueron el terpinen-4-ol y gamma-terpineno. Solo se encontró actividad antimicrobiana de la curcumina frente a *P. aeruginosa* y *S. aureus* a 30 y 50 µg/mL, respectivamente. Por otro lado, se encontró actividad antimicrobiana del aceite esencial frente a todos los microorganismos evaluados, a excepción de *P. aeruginosa*, en concentraciones desde 900 a 5500 µg/mL. La concentración citotóxica 50 de la curcumina frente a células VERO fue de 11,05 µg/mL, evidenciando cambios en la morfología celular y desprendimiento de la monocapa; sin embargo, no se encontró actividad citotóxica del aceite esencial a las concentraciones evaluadas. Parcialmente, se han producido liposomas vacíos y cargados con los compuestos, tanto multilamelares como unilamelares. Es importante el uso de alternativas nanotecnológicas para mejorar el uso terapéutico de compuestos naturales con potencial antimicrobiano.

Referencias

[1] Toro Segovia, L. J., Téllez Ramírez, G. A., Henao Arias, D. C., Rivera Duran, J. D., Bedoya, J. P., & Castaño Osorio, J. C. (2017). Identification and characterization of novel cecropins from the *Oxysternon conspicillatum* neotropical dung beetle. PLoS ONE, 12(11), 1–17. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0187914>

[2] Zhang, H. (2016). Thin-Film Hydration Followed by Extrusion Method for Liposome Preparation. Methods In Molecular Biology, 17-22. doi: 10.1007/978-1-4939-6591-5_2



SLPC2-249

Efecto de la tiamina sobre el crecimiento micelial y los niveles transcripcionales de los genes *sod1* y *sed4* en *Fusarium oxysporum* f. sp. *dianthi*.

Fernanda Castiblanco,* Harold Ardila.

Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

*nfcastiblancoq@unal.edu.co

Palabras Claves : Fusarium-oxysporum-f.sp.dianthi, Tiamina, Superóxido-dismutasa, Tripeptidil-Peptidasa

Introducción

La aspersión foliar con tiamina a plantas de clavel puede reducir la severidad de la enfermedad del marchitamiento vascular causado por *Fusarium oxysporum* f. sp. *dianthi* [1]. Sin embargo, no se conoce si este efecto de ésta sobre el crecimiento y la transcripción de *sod1* y *sed4*. Posteriormente, se inocularon plantas de clavel previamente tratadas con tiamina evaluando su efecto sobre los niveles de transcripción *in planta* de *sed4* y *sod1*.

Métodos

El patógeno se cultivó en medio complementado con tiamina para determinar el efecto de ésta sobre el crecimiento y la transcripción de *sod1* y *sed4*. Posteriormente, se inocularon plantas de clavel previamente tratadas con tiamina evaluando su efecto sobre los niveles de transcripción *in planta* de *sed4* y *sod1*.

Resultados y Conclusiones

Se evidenció que durante la fase exponencial, la presencia de tiamina genera una disminución de hasta un 24% en el crecimiento de Fod; así mismo, se observó que los niveles transcripcionales de *sod1* disminuyen significativamente con la presencia de tiamina. No obstante, a las 48 y 120 horas de cultivo, la presencia de tiamina en el medio genera un aumento significativo en los niveles de transcripción de *sed4*, asociados a la fase de crecimiento exponencial. A nivel *in vivo*, se encontró que la aspersión foliar de tiamina disminuye la severidad de la enfermedad causada por Fod. Así mismo, la aplicación foliar de esta sustancia disminuye los niveles de expresión de *sod1* y aumenta la expresión de *sed4*. Estos hallazgos revelan que la tiamina actúa como inhibidor del crecimiento micelial *in vitro* y como un regulador de la transcripción de diversos genes relacionados con virulencia en *Fusarium oxysporum* f. sp. *dianthi*.

Referencias

- [1] Perez, W.; Ardila, H.; Melgarejo, L. Efecto de Cuatro Inductores Sintéticos de Resistencia Sobre La Incidencia, Severidad y Contenido de Fenoles y Flavonoides En El Patosistema Clavel-Fusarium Oxysporum. Fitopatol. Colomb. 2019, 43 (2), 194.
- [2] Nazemi, L.; Kordbacheh, P.; Daei Ghazvini, R.; Moazeni, M.; Akbari Dana, M.; Rezaie, S. Effects of Thiamine on Growth, Aflatoxin Production, and Aflr Gene Expression in A.Parasiticus. Curr. Med. Mycol. 2015, 1 (1), 26–34. <https://doi.org/10.18869/acadpub.cmm.1.1.26>.



Actividad microbica de un nanocompuesto de NPIO@SIO2/AG sintetizado mediante sonoquímica.

Cristian Camilo Ramirez Fosca,¹ Brayan Stick Betin Bohórquez,¹ José Miguel Montero Vásquez,¹ Daniel Llamosa,² Javier Rincón,² Angélica Murillo.¹

¹Grupo de Investigación en Ciencias Biológicas y Químicas- GIBIQs. Universidad Antonio Nariño

²Grupo de Investigación Fundamental y Aplicada en Materiales - GIFAM. Universidad Antonio Nariño

Palabras Claves: Nanocompuesto, plata, microbica, multiresistencia.

Introducción

La multiresistencia a los antimicrobianos es un tema importante a nivel global por su relación con la salud pública, donde la implementación de nanopartículas de plata podría ser una alternativa emergente para mitigar la resistencia bacteriana. Sin embargo, este tipo de nanopartículas son contaminantes ambientales, presentando citotoxicidad sobre células eucariotas.

Métodos

Se sintetizó un nanocompuesto de núcleo magnético (NPIO) utilizando el método de coprecipitación, se recubrió con SiO₂ por metodología sol-gel y finalmente se funcionó con plata. El nanocompuesto se caracterizó por SEM/EDX, AFM y VSM. Además, se determinó su capacidad antibacteriana empleando el método Kirby-Bauer en disolución de caldo Müeller-Hinton.

Resultados y Conclusiones

Mediante DRX se identificaron las fases cristalinas Fe₃O₄, Si y Ag del nanocompuesto. Por DLS se determinó la distribución de tamaños y el índice de polidispersión (PDI) identificando que estos sistemas son altamente monodispersos. La distribución de tamaños obtenida por AFM y SEM comprobó que las nanopartículas presentan una morfología esférica. Por análisis de EDX se confirmó la composición química de las nanopartículas. Empleando VSM se realizaron ciclos de histéresis magnéticas mostrando un comportamiento superparamagnético. Con la técnica Kirby-Bauer se estableció la dosis mínima inhibitoria para los nanocompuestos sintetizados en diferentes concentraciones (2-10%) sobre cepas bacterianas Gram positivas y Gram negativas. Se logró identificar que al aumentar el porcentaje de plata el sistema alcanzaba un comportamiento biocida en un 100%. Este estudio concluyó que los nanocompuestos desarrollados podrán aplicarse como agentes bactericidas que pueden ser removidos magnéticamente, siendo una gran alternativa en procesos de desinfección para el control microbiano.

Referencias

- [1] Escobaro, A.; Pizzio, L.; Romanelli, G. Catalizadores magnéticos basados en Óxidos de Hierro: Síntesis, Propiedades y Aplicaciones. Ciencia en Desarrollo, [Online] 2019, 10, artículo 1. <https://doi.org/10.19053/01217488.v10.n1.2019.88111>.
- [2] Quiñones, D. Resistencia antimicrobiana: evolución y perspectivas actuales ante el enfoque "Una salud" Mi SciELO [Online] 2017,69, artículo 3. http://scielo.sld.cu/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0375-07602017000300009
- [3] Zhang, W.; Ning B.; Sun C.; Song K.; Xu X.; Fang T.; Yao L. Dynamic nano-Ag colloids cytotoxicity to and accumulation by Escherichia coli: Effects of Fe³⁺, ionic strength and humic acid. Elsevier, [Online] 2020, 98. <https://doi.org/10.1016/j.jes.2019.10.013>



Identificación de la NMNAT de *Trichomonas vaginalis* – Una enzima esencial en el metabolismo energético

Leidy Constanza Villalobos Gonzalez,* Luis Ernesto Contreras, Maria Helena Hernandez Ramirez.

Universidad Nacional de Colombia

*lvillalobos@unal.edu.co

Palabras clave: NAD+, ETS, parásito, protozoo

Introducción

El parásito *Trichomonas vaginalis* [1] causante de la ETS no viral de mayor incidencia, presenta resistencia a los tratamientos actuales, para identificar estrategias de control, se analiza el metabolismo energético del NAD+. En este trabajo se desarrolló un acercamiento experimental mediante la producción y evaluación enzimática de la proteína recombinante.

Métodos

Fue realizada la amplificación de la región codificante del candidato a NMNAT (XP_001584530.1) construyendo pETSUMO-*tvnmnat*. La expresión del recombinante se evaluó mediante SDS-PAGE e inmunoblot, posteriormente, se purificó mediante IMAC y se comprobó su actividad enzimática mediante la generación de NAD+ en ensayos acoplados a la ADH [2,3].

Resultados y Conclusiones

Se identificó la NMNAT de *Trichomonas vaginalis* (24 kDa) como una proteína clave en el metabolismo del NAD+ mediante ensayos enzimáticos acoplados. Para ello, se realizó la clonación de la región codificante en el vector pET-SUMO, los plásmidos recombinantes fueron aislados y verificados por PCR y digestión enzimática. La expresión de 6xHis-SUMO-TvNMNAT (37 kDa) se realizó en la cepa BL21 D3 *E.coli*, como se evidenció por SDS-PAGE y western blot. La purificación de la NMNAT se realizó desde la fracción soluble mediante IMAC, obteniendo 3 mg proteína/ g pellet bacteriano con un rendimiento 22% en la purificación. La actividad de la enzima se evidenció realizando la detección de NADH generado a 340 nm a 37°C y pH 7.4 en los ensayos acoplados a la ADH.

Referencias

- [1] Mercer, F.; Johnson, P. J. *Trichomonas Vaginalis*: Pathogenesis, Symbiont Interactions, and Host Cell Immune Responses. *Trends Parasitol.* 2018, 34 (8), 683–693. <https://doi.org/10.1016/j.pt.2018.05.006>.
- [2] Contreras, L. E.; Neme, R.; Ramírez, M. H. Identification and Functional Evaluation of *Leishmania Braziliensis* Nicotinamide Mononucleotide Adenylyltransferase. *Protein Expr. Purif.* 2015, 115, 26–33. <https://doi.org/10.1016/j.pep.2015.08.022>.
- [3] Forero-Baena, N.; Sánchez-Lancheros, D.; Buitrago, J. C.; Bustos, V.; Ramírez-Hernández, M. H. Identification of a Nicotinamide/Nicotinate Mononucleotide Adenylyltransferase in *Giardia Lamblia* (GINMNAT). *Biochim. Open* 2015, 1, 61–69. <https://doi.org/10.1016/j.biopen.2015.11.001>.



Identificación de dos transportadores de NAD⁺ en *Trypanosoma cruzi* (TCNDT1 Y TCNDT2) mediante ensayos de complementación en *Saccharomyces cerevisiae*

Miguel Esteban Chacón Gómez,* Maria Helena Ramirez Hernandez.

Laboratorio de Investigaciones Básicas en Bioquímica-LIBBIQ, Universidad Nacional de Colombia.

*mechacong@unal.edu.co

Palabras Claves: Trypanosoma NAD⁺ transportador complementación

Introducción

Las secuencias candidato a transportador de NAD⁺ TcNdt1 y TcNdt2 de este parásito protozoario fueron analizadas *in silico* previamente [1]. Ensayos de complementación en *Saccharomyces cerevisiae* son un estándar en la caracterización de estos transportadores [2]; empleando la cepa mutante Δ ndt2, se comprobó la actividad transportadora de NAD⁺ de TcNdt1 y TcNdt2.

Métodos

El vector de expresión pYES2-TcNdt1 fue obtenido por sub-clonación. Mediante transfección por el método de LiAc/ssDNA/PEG3500 se generaron las líneas Δ ndt2+TcNdt1 y Δ ndt2+TcNdt2. Tras inducir la expresión, diluciones seriadas de células en medios fermentable y no fermentable fueron monitoreadas, comparando las líneas transfectantes con las cepas INVSc1 (wild-type) y Δ ndt2.

Resultados y Conclusiones

La identidad del pYES2-TcNdt1 fue corroborada por PCR y digestión enzimática. La transfección de células Δ ndt2 de *S. cerevisiae* con pYES2-TcNdt1, pYES2-TcNdt2 y pYES2-AtNdt2 (control positivo de *Arabidopsis thaliana* [3]) fue evaluada por PCR de colonia. Monitoreando el crecimiento de seis diluciones seriadas 1:10 de células, iniciando en densidad óptica a 600nm de 2×10^{-2} , se encontró que en medio fermentable no hubo diferencias atribuibles a la presencia de los vectores recombinantes. En medio no fermentable, la presencia de TcNdt1, TcNdt2 y AtNdt2 permitieron un crecimiento comparable al de la cepa INVSc1, y diferente al de la cepa Δ ndt2, cuyo crecimiento fue reducido a partir de la tercera dilución, con respecto a las demás. El rescate del crecimiento celular inducido por TcNdt1 y TcNdt2 en la cepa Δ ndt2 de *S. cerevisiae*, corroboró funcionalmente la actividad transportadora de NAD⁺ de estas dos proteínas del parásito protozoario *Trypanosoma cruzi*, constituyendo una evidencia experimental.

Referencias

- [1] Chacón, E.; Ramírez-Hernández, M. H. Aproximación bioinformática y experimental al estudio de transportadores de NAD⁺ en el parásito protozoario *Trypanosoma cruzi*; Mem. Congreso. Nac. Cienc. Biológicas: Armenia, 2019; No. 2, pp 409–411. ISSN 2665--265X
- [2] Todisco, S.; Agrimi, G.; Castegna, A.; Palmieri, F. Identification of the Mitochondrial NAD⁺ Transporter in *Saccharomyces Cerevisiae*. *J. Biol. Chem.* 2006, 281 (3), 1524–1531. <https://doi.org/10.1074/jbc.M510425200>.
- [3] Morales Herrera, D. S.; Contreras Rodríguez, L. E.; Rubiano Castellanos, C. C.; Ramírez Hernández, M. H. Identification and sub-cellular localization of a NAD transporter in *Leishmania braziliensis* (LbNDT1). *Heliyon* 2020, 6 (7), e04331. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e04331>.



Expresión y purificación de la proteína recombinante de la Nucleocápside (N) perteneciente al coronavirus SARS-CoV-2 para su evaluación e implementación como antígeno en pruebas serológicas de detección del virus SARS-CoV-2

Paula Andrea Pedroza,^{1*} Isaura Patricia Torres,¹ Óscar Mauricio Gómez,¹ Rubén Manrique,¹ Juan Esteban Gallo.¹

¹GenomaCES Biotechnologies, Laboratorio especializado en Biología Molecular de la Universidad CES, Medellín, Colombia.

*ppedroza@ces.edu.co

Palabras clave: SARS-CoV-2, COVID-19, nucleoproteína, serología

Introducción

El virus SARS-CoV-2 ocasionó la pandemia COVID-19¹. Las proteínas S, S1, S2, N y RBD son usadas en pruebas serológicas. N posee una menor complejidad estructural y genera una respuesta inmune dominante y duradera². El objetivo fue obtener N para su uso en pruebas serológicas diagnósticas de COVID-19.

Metodología

Se obtuvo la secuencia para N (SARS-CoV-2 (NC_045512)). El ORF se insertó en el vector pET30a. El plásmido se transformó en *E. coli* por electroporación. El repliegamiento se hizo mediante diálisis, la purificación por cromatografía de intercambio catiónico. La pureza e identidad de N se evaluó por SDS-PAGE y WB.

Resultados y conclusiones

Se obtuvo un clon en *E. coli* capaz de expresar en cuerpos de inclusión una proteína de 45,6 KDa, reconocida por un anticuerpo monoclonal en el WB. Se estableció un protocolo para el repliegamiento y purificación de N. La pureza de la proteína fue $\geq 95\%$ en SDS-PAGE y el rendimiento de 50 mg/L. La inmunoreactividad de N fue confirmada en sueros de pacientes infectados, mostrando un 100% de sensibilidad y especificidad diagnóstica, detectando 4 pacientes positivos y 8 negativos. En el ensayo de WB, 1 mg de proteína purificada detectó títulos de IgG de hasta 1:10,000 en sueros de pacientes. Se logró obtener exitosamente la proteína recombinante N con un alto rendimiento, confirmando su utilidad como antígeno para la detección de SARS-CoV-2. Este desarrollo abre la posibilidad de diseñar pruebas serológicas locales de forma masiva y a bajo costo, que permitan atender la alta demanda generada por la COVID-19.

Referencias

- [1] Li, H.; Burm, S. W.; Hong, S. H.; Ghayda, R. A.; Kronbichler, A.; Smith, L.; Koyanagi, A.; Jacob, L.; Lee, K. H.; Shin, J. I. A Comprehensive Review of Coronavirus Disease 2019: Epidemiology, Transmission, Risk Factors, and International Responses. *Yonsei Med. J.* 2021, 62 (1), 1–11. <https://doi.org/10.3349/ymj.2021.62.1.1>.
- [2] Rump, A.; Risti, R.; Kristal, M.-L.; Reut, J.; Syritski, V.; Lookene, A.; Ruutel Boudinot, S. Dual ELISA Using SARS-CoV-2 Nucleocapsid Protein Produced in *E. Coli* and CHO Cells Reveals Epitope Masking by N- Glycosylation. *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 2021, 534, 457–460. <https://doi.org/10.1016/j.bbrc.2020.11.060>.



Elicitación de metabolitos secundarios en células de *Thevetia peruviana* libres e inmovilizadas: efecto en la producción de biomasa, glucósidos cardiotónicos y flavonoides

Dary Mendoza,¹ Olmedo Cuaspad,² Juan Pablo Arias,² Mario Arias.²

¹ Grupo de Investigación en Productos Naturales y Bioquímica de Macromoléculas. Universidad del Atlántico, Colombia

² Grupo de Biotecnología Industrial. Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín, Colombia.

*darymendoza@mail.uniatlantico.edu.co

Palabras Clave: Elicitación Cardiotónicos Flavonoides Bioprospección

Introducción

Thevetia peruviana es una planta de gran interés farmacéutico por el alto contenido de glucósidos cardiotónicos [1] y flavonoides [2] con actividad anti-cáncer. Se evaluó el efecto del jasmonato de metilo-JM y ácido salicílico-AS en la producción de biomasa y metabolitos, en cultivos de células libres e inmovilizadas de *T.peruviana*.

Métodos

Cultivos de células libres se obtuvieron a partir de callos friables en medio SH suplementado con 2,4-D/kinetina/sacarosa/mioinositol. Las células en fase exponencial se inmovilizaron en una matriz de alginato de calcio. Ambos cultivos se trataron con JM-3 μ M y AS-300 μ M. El efecto sobre la biomasa y metabolitos se evaluó durante 5 días post-elicitación.

Resultados y Conclusiones

Los cultivos de células libres e inmovilizadas alcanzaron su crecimiento máximo entre los días 10-12 de la fase exponencial. Elicitación con JM redujo significativamente la producción de biomasa en ambos cultivos, lo cual fue atribuido al efecto represor sobre la mitosis. JM y AS causaron efecto elicitor sobre la biosíntesis de flavonoides y cardiotónicos en las células libres, obteniéndose concentraciones intracelulares máximas de Flavonoides: 6,88 \pm 0,65 mg EQ/gPS y Cardiotónicos: 4,11 \pm 0,41 mg EP/gPS, a las 96h de tratamiento con JM. En células inmovilizadas, el efecto elicitor fue a nivel extracelular por tratamiento con AS, obteniendo concentraciones máximas de Flavonoides: 74,61 \pm 3,64 mg EQ/L y Cardiotónicos: 562,5 \pm 51,5 mg EP/L a 96h y 48h, respectivamente; lo cual se atribuye a la permeabilidad celular ocasionada por alginato de calcio. Estos resultados contribuyen al conocimiento de la respuesta de células libres e inmovilizadas de *T. peruviana* a la adición exógena de elicitors del metabolismo secundario.

Referencias

- [1] Reddy, D.; Kumavath, R.; Tan, TZ.; Ampasala, D. R.; Kumar, A. P. Peruvoside targets apoptosis and autophagy through MAPK Wnt/ β -catenin and PI3K/AKT/mTOR signaling pathways in human cancers. *Life Sci.* [Online] 2020, 241, 117147. <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/31830480/> (accessed Jan 4, 2021).
- [2] Wang, R.; Zhu, X.; Wang, Q.; Li, X.; Wang, E.; Zhao, Q.; Wang, Q., & Cao, H. The anti- tumor effect of taxifolin on lung cancer via suppressing stemness and epithelial-mesenchymal transition in vitro and oncogenesis in nude mice. *Ann. Transl. Med.* [Online] 2000, 8 (9), 590. <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/32566617/> (accessed Jan 4, 2021).



IV Congreso Colombiano de
Bioquímica y Biología Molecular



COMUNICACIONES ORAL PÓSTER



BIOTECNOLOGÍA Y MICROORGANISMOS

SLPC2-26

Una Variante Enzimática Del Ensayo Cometa Para La Evaluación Genotóxica En Fibroblastos Humanos Sobre Una Plataforma De Microplacas

Silvia Juliana Flórez González¹, Raquel Elvira Ocazonez², Jorge Luis Fuentes Lorenzo^{1*}

1) Laboratorio de Microbiología y Mutagénesis Ambiental (LMMA), Grupo de Investigación en Microbiología y Genética (COL0083849), Escuela de Biología, Facultad de Ciencias, Universidad Industrial de Santander (UIS), Bucaramanga, Colombia.

2) Centro de Investigación en Enfermedades Tropicales (CINTROP), Facultad de Salud, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.

Introducción: El ensayo Cometa es una de las pruebas de evaluación genotóxica más usadas para el estudio de nuevos productos cosméticos a nivel mundial. La versión alcalina del ensayo es bien conocida por su sensibilidad y versatilidad; sin embargo, el paso de lisis celular alcalina frecuentemente resulta agresiva para las células conduciendo a niveles elevados de fraccionamiento nuclear en los controles del ensayo. Adicionalmente, el montaje del ensayo sobre laminillas portaobjeto para microscopía, limita su rendimiento durante el escrutinio masivo de muestras.

Palabras clave: Ensayo Cometa, evaluación genotóxica, fibroblastos, bleomicina, 4-nitroquinolina 1-óxido.

Propósito: El presente trabajo estableció una versión del ensayo Cometa que usa digestión enzimática con proteinasa K para la disrupción de las membranas celulares sobre una plataforma de microplacas de 96 pocillos.

Metodología: Para el estudio se cultivó la línea celular de fibroblastos humanos MRC5 en medio DMEM/F-12 suplementado con 10% de suero fetal bovino y 1% de la mezcla antibiótica penicilina/estreptomicina. La citotoxicidad en fibroblastos humanos de los mutágenos estándar bleomicina (BL) y 4-nitroquinolina 1-óxido (4-NQO) fue ensayada mediante la tinción azul de tripano. Para desarrollar el ensayo Cometa, las células fueron mezcladas con agarosa de bajo punto de fusión y descargadas sobre el sistema CometChip, expuestas a los controles y mutágenos (BL y 4-NQO) y luego lisadas enzimáticamente. Por último, el *chip* fue sometido a electroforesis alcalina, neutralizado y los microgeles fueron teñidos y visualizados mediante microscopía de fluorescencia. El nivel de daño fue tipificado en cinco categorías (0-4), siendo 4 el mayor nivel de daños; y finalmente expresado como unidades del índice de daño genético (GDI).

Resultados: La dosis letal media (LD₅₀) de los mutágenos BL y 4-NQO fueron de 0.66 y 2.37 mM, respectivamente. La tipificación del daño genético mostró células en categorías 0 y 1 en los controles no tratados; mientras que los tratamientos con mutágenos mostraron mayormente categorías 2, 3 y 4. El nivel de daño en los núcleos de células no tratadas (niveles de daños basales) resultó consistentemente bajo (GDI = 0.53 ± 0.05). Este índice de daño genético mostró una clara dependencia de la concentración de los mutágenos. La plataforma de microplacas de 96 pocillos incrementó la capacidad de escrutinio en 40 veces respecto al montaje en laminillas portaobjeto. **Conclusión:** El ensayo Cometa usando digestión con proteinasa K mostró niveles de daños basales aceptables para estudios genotóxicos. Las curvas dosis respuesta con BL y 4-NQO mostraron la sensibilidad del ensayo para la detección de roturas nucleares en fibroblastos humanos.



SPAЕ
II SIMPOSIO PANAMERICANO DE
ACEITES ESENCIALES

PÓSTER



COMUNICACIONES PÓSTER XVIII COLACRO

ILRCO-435

DETERMINATION AND EVALUATION OF POLYCHLORINATED BIPHENYLS AND AROMATIC POLYCYCLIC HYDROCARBONS IN SOILS FROM VALENCIA (SPAIN)

Rafael Boluda, Miguel Gamón.

Universitat de València. Depto. Biología Vegetal. Facultad de Farmacia. Av Vicent Andrés i Estellés s/n. 46100 Burjassot (València, España)

boluda@uv.es

The study was carried out on soils of rice growing with special protection. Six types of soils were chosen from urban and industrial areas. The analysis of the soils was performed by GC-MS/MS. The results were found PCB-101, PCB-138 and PCB-153, however PAHs were detected in 97% of samples.

This study shows a quick extraction and quantification method for organic pollutants (OPs) to evaluate the presence and level of contamination of polychlorinated biphenyls (PCBs) and polycyclic aromatic hydrocarbons (PAHs) in soils of a Mediterranean wetland affected by human activities. The study area corresponds to the Albufera Natural Park of Valencia (Spain) (ANP); it is a special protection for birds' area, and a RAMSAR wetland with 14,000 ha dedicated to rice cultivation; it is an enclave of great ecological and socio-economic importance that for decades has been under great pressure due to human activities. A field campaign was carried out to sample soils within the paddy fields of the ANP. Six different areas were chosen according to their distance from the urban centre, as well as two horticultural farming areas and four urban soils corresponding to parks and gardens of neighboring towns in order to make comparisons. A part of the samples obtained was used for the characterization of the fundamental properties of soils, while the other was destined to the extraction and determination of PCBs and PAHs. The extraction of the OPs was carried out through an accelerated extraction with organic solvents by stirring and then quantified by GC-MS/MS. For quality control, a control soil (uncontaminated) reinforced with 50 µl of standards of 1,0 ppm was used in the case of PCBs and an EPA 525 PAHs Mix B standard for PAHs. The detection limit was 2 µg/kg for all congeners PCBs and 5 µg/kg for PAHs except for dibenz(a,h)anthracene (20 µg/kg) and Benzo(ghi)perylene and Indene[1,2,3-cd]pyrene (10 µg/kg). Recoveries were generally over 70%. The analytical method was fast, simple and effective. Only three soils tested positive for PCBs, with PCB-101, PCB-138 and PCB-153 being the congeners detected. Regarding the PAHs, with 97% of detections; pyrene, chrysene, benzo(a)anthracene, benzo(b)fluorene and benzo(a)pyrene, were the most detected congeners. In general, rice paddies soils showed the highest concentrations, which was associated with higher urban and industrial pressure. The soils of the urban parks analyzed presented important concentrations, being the concentration of benzo(b)fluorene of 127.06 µg/kg. From the point of view of the application of regulations, no contamination was observed; however, our results suggest the need to conduct monitoring studies to avoid environmental and health risks.

Referencias:

1. Validation of an Adapted QuEChERS Method for the Simultaneous Analysis of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons, Polychlorinated Biphenyls and Organochlorine Pesticides in Sediment by Gas Chromatography–Mass Spectrometry. Ben Salem Fida, et al. Bulletin of Environmental Contamination and Toxicology. 96(5). 2014.
2. GC/MS Monitoring of Selected PAHs in Soil Samples Using Ultrasound-assisted QuEChERS in Tandem with Dispersive Liquid-Liquid Microextraction. Hamid Reza Sobhi. International Journal of Environmental Monitoring and Analysis. 3:5(288). 2015.
3. Rapid determination of polyaromatic hydrocarbons and polychlorinated biphenyls in water using solid phase microextraction and GC/MS. David W. Potter and Janusz Pawlinszyn. Environ. Sci. Technol. 28, 2, 298–305. 1994.



Separación Multidimensional de Hidrocarburos Saturados, mono, di, tri, tetra, penta-aromáticos y polares por HPLC-Semipreparativo con DAD y colector de fracciones.

Jesús Acedo, Laura Cristina Aguilar Casas, Darwin Edgardo Velandia, Diego Leonardo Blanco Arena, Esperanza Torres Bautista.

Khymós S A S – Lab3. Instituto Colombiano de Petróleos.

Jesus.acedo@khymos.com

Palabras Claves: Mono-aromáticos, Poliaromáticos, HPLC-Semipreparativo, crude-oil.

Introducción: La caracterización de derivados de petróleo representa un gran reto debido a la cantidad y naturaleza de sus componentes. Hay normas ASTMs que evalúan parámetros del crudo de forma individual, pero no una que simplifique la separación de fracciones para su posterior análisis por GC, HPLC, espectrómetros, RMN, FTIR, etc.

Métodos: El sistema HPLC-Semipreparativo multidimensional consta, DAD, autosampler programable, colector de fracciones, dos válvulas (6-puertos), una columna DNAP (que separa mono, di, tri, tetra y penta-aromáticos), y SCX activada con AgNO₃ (que ayuda a la separación de saturados y compuestos polares), bomba cuaternaria, usando gradiente con heptano, diclorometano, acetonitrilo e isopropanol.

Resultados y conclusiones: Con el ajuste de gradientes, tiempos de acción de las válvulas y otros parámetros cromatográficos (1) se logra la separación de saturados, mono, di, tri, tetra y penta aromáticos en una misma corrida. A la salida del DAD se acopló un colector de fracciones que recoge los diferentes picos para su posterior caracterización por otras técnicas analíticas.

Para cada familia de compuestos, excepto los saturados, se automatizó la elaboración de una curva de calibración usando un automuestreador. Se tomaron volúmenes variables de estándar y se diluyeron con solvente dentro del loop capilar. Se obtuvo un coeficiente de correlación superior a 0.995 en todos los casos.

El perfil de presión de la bomba se monitorea como control de calidad entre corridas. La precisión se evaluó con 7 corridas donde se obtuvo un %RSD > 5%. El método resultó repetible, robusto, y confiable a pesar de lo complejo de la matriz.

Referencias:

- Jonathan C. Putman, Steven M. Rowland, David C. Podgorski, Winston K. Robbins, and Ryan P. Rodgers; Dual Column Aromatic Ring Class Separation with Improved Universal Detection across Mobile-Phase Gradients via Eluate Dilution; Energy Fuels 2017, 31, pg 12064-12071.



FATTY ACIDS IN EXTRA VIRGIN OLIVES COMMERCIALIZED IN THE TRIPLE BONDARY (BRAZIL, PARAGUAY AND ARGENTINA)

Leticia M. S. Santos, Martha B. R. Cabrera, Aline T. Toci, Marcelo N. Kapp, Marcela Boroski

Federal University of Latin American Integration (UNILA), 6731 Tancredo Neves Av., Foz do Iguaçu, PR, 85867-970, Brazil.

marcela.boroski@unila.edu.br

Keywords: Volatile organic compounds adulteration.

Food fraud as the adulteration of extra virgin olive oil (EVOO) can take on considerable proportions, with a negative impact on the economy and the health of consumers. This work aimed to evaluate EVOO commercialized in Foz do Iguaçu, a frontier city of the countries Brazil, Argentina and Paraguay. Analysis of free fatty acid (acidity) and fatty acid composition measured by gas chromatography coupled to flame ionization (GC-FID) were carried out in order to identify adulteration among the samples. Volatile organic compounds (VOCs) were measured by solid phase microextraction followed by gas chromatography analysis coupled to mass spectrometry (SPME/GC-MS). An amount of 22 EVOOs were evaluated, and also 14 vegetal and animal oil sample in order to set the adulteration origin. Acid levels out of the limits were detected in 13.6% samples. Oleic acid (C18:1n-9c) was major in EVOO, whilst adulterated samples presenting high levels of alpha linolenic (C18:2n-6c) and linoleic (C18:3n-3) acids. Fatty acids composition pointed 31.8% adulterated samples, presumably with soy oil, due to the high levels of linoleic acid (C18:2n-6c) found. Principal Component Analysis and VOCs approach were able to separated EVOO from de adulterated samples, and also distinguish the origin country.

Referencias

1. Persurić et al. Comparison of triacylglycerol analysis by MALDI-TOF/MS, fatty acid analysis by GC-MS and non-selective analysis by NIRS in combination with chemometrics for determination of extra virgin olive oil geographical origin. A case study. *LWT* (95) 326-332, 2016.
2. Indelicato et al. Triacylglycerols in edible oils: Determination, characterization, quantitation, chemometric approach and evaluation of adulterations. *Journal of Chromatography A*, (1515) 1-16, 2017.
3. Fernandez et al. Volatile Profile Characterization of Extra Virgin Olive Oils from Argentina by HS-SPME/GC-MS and Multivariate Pattern Recognition Tools. *Food Analytical Methods*, 7 (10) 2122-2136, 2014.



CAPILLARY LC COLUMN PACKED WITH GRAPHENE OXIDE-C18 FUNCTIONALIZED FOR SEPARATING HORMONES FROM URINE SAMPLES

Edvaldo V. S. Maciel, João V. B. Borsatto, Fernando Mauro Lanças.

University of Sao Paulo.

edvaldovasconcelos@usp.br

Since its first isolation by Novoselov et al. in 2004, graphene has been applied in several areas of science, such as optics, electronics, medicine, sports. In 2011, graphene-based materials (GBMs) were applied for the first time as sorbents in sample preparation techniques. Although the last decade has been marked by a tremendous number of applications, quite a few of them have been dedicated to assess GBMs as liquid chromatography stationary phase despite some intrinsic properties pinpoint them as a good candidate — polyaromatic structure, high specific surface area, and easy chemical functionalization. As our research group has an established experience on the synthesis and applications of GBMs, we now investigate their potential as a stationary phase in capillaryLC separations. Among the “*per us synthesized*” materials (graphene and graphene oxide both separately supported onto aminosilica, and graphene oxide supported onto aminosilica functionalized with octadecylsilane further end-capped – SiGoC18ecap), the last one initially reported superior performance and was chosen for this study. Firstly, two similar tubes (fused silica capillaries with an external stainless steel protective coating) were slurry packed with SiGoC18ecap through a high-pressure hydropneumatic packing system (~2500bar) to generate capillaryLC columns of 100 mm length x 300 µm internal diameter, 5 µm particle diameter. Once our analytical system included also an extraction column (for sample prep) online connected with our capillaryLC-MS/MS instrument, a full factorial design 2² was performed to reach an ideal condition for hormones extraction, separation, and detection in urine samples. Under optimized conditions, some important figures of merits were evaluated to indicate the method performance – linearity, accuracy, precision, and LODs and LOQs. Lastly, two urine samples from consented donors were tested for the presence of the four analytes: estrone, progesterone, hydrocortisone, and dexamethasone. The results obtained indicate that GBMs acts as suitable novel stationary phases for capillaryLC.

Referencias:

1. K.S. Novoselov, Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films, *Science* (80- .). 306 (2004) 666–669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>.
2. Q. Qu, Y. Shen, C. Gu, Z. Gu, Q. Gu, C. Wang, X. Hu, Capillary column coated with graphene oxide as stationary phase for gas chromatography, *Anal. Chim. Acta.* 757 (2012) 83–87. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2012.10.032>.
3. X. Zhang, S. Chen, Q. Han, M. Ding, Preparation and retention mechanism study of graphene and graphene oxide bonded silica microspheres as stationary phases for high performance liquid chromatography, *J. Chromatogr. A.* 1307 (2013) 135– 143. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2013.07.106>.



ILRCO-710

A simple method for simultaneous analysis of cannabinoids, including THC metabolites in human urine by packed in-tube SPME-LC-MS/MS

Douglas Morisue Sartore, Álvaro José dos Santos-Neto

São Carlos Institute of Chemistry, University of São Paulo

douglas.sartore@usp.br

Cannabinoids are pharmacologically active compounds, present in the cannabis plants, which have become important research topics in the modern toxicological and medical research fields. Not only cannabis is the most used drug in the world, but also, the cannabinoids have an on growing use for the treatment of a series of diseases. New, fast and efficient analytical methods, for the analysis of these substances in different matrices are currently demanded. In this study, we developed a new packed in-tube SPME method for the automated extraction/preconcentration of Δ^9 -tetrahydrocannabinol (THC), 11- hydroxy- Δ^9 -tetrahydrocannabinol (THC-OH), 11-nor- Δ^9 -tetrahydrocannabinol-9-carboxylic acid (THC-COOH), THC-COOH glucuronide conjugate (THC-COOH-glu), cannabidiol (CBD), cannabinol (CBN) and tetrahydrocannabivarin (THCV) from human urine. Their simultaneous detection and quantification was performed via LC-MS/MS. Packed in-tube SPME micro columns were prepared, via slurry-packing method, in (508 μm i.d. x 50 mm) stainless-steel hardware and spent only 12 mg of C18 commercial sorbent phase (15-25 μm particle diameter). Different sorbents were evaluated and after sorbent selection, a fractional factorial design (2^{4-1}) was used for variables screening. Finally, the selection of the best microextraction conditions was performed by a central composite design with the most significant variables. Under optimized conditions, the developed method demonstrated to be a simple, fast and cheap approach. Sample consumption was inferior to 250 μL of urine and no sample hydrolysis was required. The sample pretreatment included only dilution and centrifugation steps (8 min). The on-line extraction/preconcentration and the chromatographic run (including sample loading and clean-up, analytes elution, chromatographic separation and detection, columns cleaning and reconditioning), took 12 minutes, therefore, the complete analysis method presented a total analysis time of 20 minutes per sample. At this moment, to evaluate method performance under selected conditions a partial validation is being conducted. Moreover, the method will be applied for the analysis of unknown urine samples from 20 consented donors. Further details of method performance and unknown samples analysis, will be discussed in the poster presentation.

References:

1. United Nations Office on Drugs and Crime. *Drug Market Trends: Cannabis and Opioids*; 2021.



Isolation of polyphenols from Chilean *Cryptocarya alba* (Peumo) fruits using a combination of Sephadex® LH-20 gel permeation and counter-current chromatography (CCC).

Javier Antileo-Laurie^{1,2}, Felipe Jiménez-Aspee³, Marlene Fischer⁴, Daniel Mieres-Castro¹, Guillermo Schmeda-Hirschmann¹.

¹Laboratorio de Química de Productos Naturales, Instituto de Química de Recursos Naturales, Universidad de Talca, 3460000 Talca, Chile. ²Facultad de Medicina y Ciencia, Universidad San Sebastián, General Lagos 1163, 5090000 Valdivia, Chile. ³Departamento de Ciencias Básicas Biomédicas, Facultad de Ciencias de la Salud, Universidad de Talca, 3460000 Talca, Chile.

javier.antileo@uss.cl

Keywords: Isolation, Polyphenols, Sephadex® LH-20, CCC.

Peumo fruits were consumed as food by Mapuche people and still consumed in Chilean rural areas. The fruits were studied to describe their polyphenols composition. This work presents the isolation of the main polyphenols by combining two chromatographic techniques: Sephadex® LH-20 gel permeation in a chromatographic column and CCC.

Phenolic extracts of cotyledon and peel were chromatographed on a Sephadex® LH-20 column with 80% aqueous MeOH, obtaining 13 and 9 fractions, respectively. According to TLC and HPLC patterns, fraction 8 of peel extract was injected into a CCC system, previously selected based on KD values calculated using the AUC.

From the cotyledon extract, fraction 2 (496 mg) was loaded on a Sephadex® LH-20 column, and 80% aqueous MeOH used as mobile phase. Fractions were collected and pooled after TLC analyses: Fractions 19-30 (266 mg) contained mainly 5-CQA with some 3-CQA, while fractions 31-40 (71 mg) afforded a 1:1 mixture of 5-CQA and 3-CQA. NMR analyses and co-chromatography with standards confirmed the identity.

From the peel extract, fraction 8 (293 mg) was selected to further separation by CCC. The system selected was n-Hex/EtOAc/MeOH/H₂O (1:3:0.5:4 v/v/v/v) to separate 2 of the main compounds which identity remained unknown after HPLC-DAD-ESI-MS/MS analysis. After comparison by TLC, fractions with similar patterns were pooled. 3 compounds were finally isolated and the identity confirmed by NMR analyses: Fraction 8 (11.8 mg) Q-3-O-arabinofuranoside; fraction 10 (25 mg): Q-3-O-rhamnoside + K-3-O-rhamnoside in a 2:1 ratio and fraction 11 (15 mg): K-3-O rhamnoside.

References:

1. Ito, Y. Golden rules and pitfalls in selecting optimum conditions for high-speed counter-current chromatography. <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0021967304023374?via%3Dihub> (accessed Jun 1, 2021).
2. Mieres-Castro, D.; Schmeda-Hirschmann, G.; Theoduloz, C.; Rojas, A.; Piderit, D.; Jiménez Aspee, F. Isolation and characterization of secondary metabolites from *Gaultheria tenuifolia* berries. <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/10.1111/1750-3841.15380> (accessed Jun 1, 2021).



SLRC2-729

APLICACIÓN DE HIDROCHAR EN TRATAMIENTO DE AGUAS ÁCIDAS DE MINA PARA REMOCIÓN DE METALES PESADOS

YEIMY FERNANDA HERNÁNDEZ LASSO, JULIANA MARITZA ZARATE JIMENEZ, LUIS FERNANDO LOZANO GOMEZ, MARÍA DEL PILAR TRIVIÑO RESTREPO.

Grupo Interdisciplinario e interinstitucional de carbones y Carboquímica GIC, Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia – Tunja.

yeimy.hernandez02@uptc.edu.co

Palabras clave: Adsorción, Hidrochar, Carbonización hidrotermal.

Introducción: Este trabajo muestra la aplicación de *hidrochar* como material adsorbente en el tratamiento de aguas ácidas de mina, para remoción de metales pesados tóxicos: Cd, Fe, Pb y Hg, se usaron isotermas de adsorción y se determinó la capacidad de adsorción.

Metodología: Se evaluó capacidad de sorción del *hidrochar*, mediante pruebas de azul de metileno (ASTM D3860) e índice de yodo (ASTM 4607) ; se caracterizó el agua residual ácida de mina antes y después del tratamiento y analizando concentración de metales pesados , siguiendo la norma ASTM 3860 .

Resultados y conclusiones: Los datos obtenidos se evaluaron a partir de la interacción de isotermas de adsorción de Langmuir y Freundlich, tanto en biomasa como en hidrochar; con el tratamiento de hidrochar se logró una remoción de metales máxima de 58.9% de Cd, 19.18% de Fe, 50% de Hg y 24.12% de Pb, además de una reducción de concentración considerable en cloruros, dureza total, dureza cálcica, oxígeno disuelto, sulfatos, nitratos y nitritos.

La isoterma de adsorción en la biomasa de mejor ajuste es la de Langmuir, debido a una adsorción homogénea en monocapa, mientras la isoterma que en el hidrochar es la isoterma de Freundlich, lo cual demuestra que la adsorción es heterogénea, lo cual facilitaría la desorción y a su vez se evaluaría la preferencia de los sitios activos por determinada molécula según su interacción fisicoquímica, por lo que pueden verse efectos al manipularlo químicamente con iones.

Referencias:

1. Bejarano Moreno, L. M.; Aguilar Diaz, P. A. Evaluación Del Biochar E Hidrochar Como Medios Para Captura De Carbono En El Suelo. **2017**, 80.
2. Figueroa, M. L. H.; Rodríguez, B. L. Cinética e Isotermas de Adsorción de Pb (II) En Suelo de Monterrey. **2008**, XI (41), 24–31.
3. ASTM. Normas ASTM https://www.astm.org/america_latina/sp/index.html.
4. Baird, R.; Bridgewater, L. *Standard Methods for the Examination of Water and*



AVANCES EN LA VALIDACIÓN DE UN MÉTODO PARA DETERMINACIÓN CUANTITATIVA DE TERPENOIDES Y CANNABINOIDES EN MATERIAL VEGETAL DE CANNABIS SP POR CROMATOGRAFÍA DE GASES ACOPLADA A ESPECTROMETRÍA DE MASAS.

Tania Lorena Montaña Sánchez.

Palabras clave: Cannabis, potencia, terpenos, prevalidación.

A cannabinoides y terpenoides, se atribuye la actividad farmacológica del cannabis, haciéndolos destacar entre los más de 450 compuestos químicos identificados en *C. Sativa* (1). Los cannabinoides presentan actividad conjunta con los terpenoides, principalmente monoterpenoides y sesquiterpenoides, útil para el tratamiento de diferentes enfermedades y condiciones médicas (2,3).

Un método optimizado para el análisis de los tres cannabinoides principales desarrollado en la empresa Khymós S.A (CBD, THC y CBN), se ajustó para realizar el análisis conjunto con los terpenos comúnmente presentes en el cannabis por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas GC-MS.

El método emplea dos rampas de temperatura entre 60 y 280 °C, He (1mL/min), monitorea un ión cuantificador y dos iones cualificadores por cada compuesto; partiendo de la identificación de los espectros de masas obtenidos para soluciones patrón comerciales (SPEX certiprep, Terpenes mix 1 y 2) por método SCAN utilizando un GC 7890A, acoplado a MS 5975 (Agilent Technologies).

Los grupos de compuestos se separan en segmentos de tiempo diferentes (terpenos: 5 - 9,4 min / cannabinoides:13-15 min). Los límites de detección (LOD) y cuantificación (LOQ), para cada uno de los terpenoides se determinaron con los valores de relación señal ruido (S/N) obtenidos en una curva de bajas concentraciones; determinado el LOQ se estableció el intervalo lineal de trabajo para los terpenoides entre 5 y 100 µg/mL.

El método permite el análisis de 39 terpenoides y los tres cannabinoides principales, en 18,3 min por muestra.

El trabajo fue desarrollado en la empresa Khymós S.A ubicada en Bogotá D.C, en modalidad pasantía.

Referencias:

1. Gallo-Molina, A.C., Castro-Vargas, H.I., Garzón-Méndez, W.F., Martínez Ramírez, J.A., Rivera Montoya, Z.J., King, J.W., Parada-Alfonso, F. Extraction, isolation and purification of tetrahydrocannabinol from the Cannabis sativa L. plant using supercritical fluid extraction and solid phase extraction. *J. Supercrit. Fluids*, 146, 208–216.
2. Upton, R., Craker, L., ElSohly, M., Romm, A., Russo, E., Sexton, M. Cannabis Inflorescence Cannabis spp. Standards of identity, analysis, and quality control. *American Herbal Pharmacopoeia*, 2014, Scotts Valley, USA.
3. Robson, P. Human studies of Cannabinoids and Medicinal Cannabis. *Cannabinoids*, 2005, 719-756.



Determinación de Compuestos Traza en Ron Mediante Extracción con Solvente y Cromatografía de Gases-Masas

Liliana Moncayo Martínez, Victoria Recalde, Milton Rosero Moreano, Gonzalo Taborda Ocampo.

Industria Licorera de Caldas. Universidad de Caldas.

lilianamoncayomartinez@gmail.com

Palabras Clave: Ron, CG-MS, Extracción L-L

Introducción: La identificación y cuantificación de compuestos en bajas concentraciones en bebidas añejadas como el ron es fundamental debido a la influencia que compuestos con umbrales de percepción bajos pueden tener sobre las características sensoriales del producto y su identificación puede facilitar la autenticación del mismo y elucidar sus características sensoriales.

Métodología: Se realizó una extracción líquido-líquido con diclorometano y estándares internos 1-octanol y hexalactona. Se concentró bajo corriente de nitrógeno y se analizó por CG-Masas en modo sim. Se validó mediante la extracción y análisis de muestras de ron sin dopar y dopadas durante 3 días con dos replicas por día.

Resultados y discusión: Los valores de R2 fueron superiores a 0,99 en la calibración, los porcentajes de recuperación fueron superiores al 80% y los valores de %RSD fueron inferiores al 8% entre réplicas de extracción y entredías.

Las concentraciones en las muestras aumentaron con la edad de añejamiento. Los compuestos más abundantes fueron: vainillina (0.8 a 1.4 mg/L), ácido butírico (0.6 a 2.1 mg/L) y siringaldehído (2.3 a 4.3 mg/L). Los ésteres hexanoato, decanoato y dodecanoato se encontraron en menores concentraciones (0.01 a 0.6 mg/L). El guaiacol solo fue detectado en los rones más añejos (0,04 mg/L). El eugenol mantuvo una concentración de 0,7 mg/L en todas las muestras lo cual indica que no es un marcador de añejamiento. La cis-whiskylactona alcanzó una concentración de 0,1 mg/L en los rones de 8 y 15 años. Los compuestos octanoato de etilo y trans-whiskylactona no fueron detectados en ninguna de las muestras.

Referencias:

1. López, K. Analytical Quantification of Phenolic Compounds in Barrel-Aged Alcoholic Beverages as a Control Measurement in the Manufacturing Process. Agilent Technologies, Inc., 2015, Published in the USA, December 1. Mexico City, Mexico.
2. M.S. Perez-Coello, J. Sanz b, M.D. Cabezudo. Analysis of volatile components of oak wood by solvent extraction and direct thermal desorption-gas chromatography-mass spectrometry. Journal of Chromatography A, 1997. 778, 427-434
3. Rafael E. Gonzales. Cuantificación y comparación de sustancias marcadoras de envejecimiento de rones envejecidos aceleradamente y en barriles de roble (*Quercus humboldtii* Bonpland). Revista Venezolana de Ciencia y Tecnología de Alimentos. 2010, 1 (2): 170-183.



DETERMINACIÓN DE RESIDUOS DE FÁRMACOS ANTI-INFLAMATORIOS Y SUS METABOLITOS POR LC/MS EN PLANTAS ACUÁTICAS

Andrés F. González, Stefhanny C. Luna, Óscar E. Osorio, Jairo R. Martínez, Elena Stashenko

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: AINE, metabolitos, MSPD, SPE

Introducción: Los anti-inflamatorios no esteroideos (AINE) persisten en efluentes de las plantas de tratamiento de aguas residuales, y sus trazas han sido determinados en fuentes hídricas a nivel mundial (1). Algunos de estos compuestos pueden causar daños tanto en ecosistemas acuáticos, como incorporarse en vegetales de consumo humano (2,3).

Métodos: Se realizó la extracción de los AINE diclofenaco, ibuprofeno, naproxeno y piroxicam y sus metabolitos de plantas acuáticas (*Salvinia adnata* y *Azolla filiculoides*) y del medio acuoso, mediante las técnicas de dispersión de la matriz en fase sólida (MSPD) y extracción en fase sólida (SPE), respectivamente, y su posterior análisis por UHPLC-ESI-Orbitrap-HRMS.

Resultados y conclusiones: En la extracción MSPD, se obtuvo una eficiencia de extracción de 77-105% al usar gel de sílice modificada como dispersante (1:10) y elución con acetato de etilo:metanol (60:40 v/v). La técnica SPE permitió recuperar todos los analitos (98-99%), con un cartucho *Strata X*[®](100 mg), en tres niveles de concentración. La mejor respuesta analítica en el sistema cromatográfico UHPLC se obtuvo con agua y metanol como fase móvil, con ácido fórmico al 0,1% v/v y formiato de amonio 5 mM, a un voltaje de capilar de la interfaz ESI de ± 3.5 kV. Los metabolitos hidroxilados y conjugados de AINE fueron los principales compuestos identificados en los extractos acuosos y en plantas acuáticas. Este estudio podría ser útil para monitorear el proceso de absorción y eliminación de los metabolitos en plantas acuáticas, en aguas contaminadas.

Referencias:

1. Tran NH, Reinhard M, Gin KYH. Occurrence and fate of emerging contaminants in municipal wastewater treatment plants from different geographical regions-a review. *Water Res.* **2018**,133, 182-207.
2. Cleuvers M. Mixture toxicity of the anti-inflammatory drugs diclofenac, ibuprofen, naproxen, and acetylsalicylic acid. *Ecotoxicol, Environ. Saf.* **2004**, 59, 309-315.
3. Wu X, Conkle JL, Ernst F, Gan J. Treated wastewater irrigation: Uptake of pharmaceutical and personal care products by common vegetables under field conditions. *Environ. Sci. Technol.* **2014**, 48,11286-11293.



IMPLEMENTACIÓN DE LA TÉCNICA DE EXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA PARA EL ANÁLISIS DE FÁRMACOS ANTIINFLAMATORIOS EN MATRICES ACUOSAS

Stefhanny C. Luna, Andrés F. González, Oscar E. Osorio, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: AINE, SPE, HPLC

Introducción: En Colombia, los fármacos de mayor comercialización y consumo son los antiinflamatorios no esteroideos (AINE). Algunos de estos compuestos, entran en el medio ambiente a través de los efluentes de aguas residuales (1), que los transportan hacia fuentes de suministro que se usan para consumo y riego de cultivos agrícolas (2).

Métodos: Se realizó la extracción de diclofenaco, ibuprofeno, naproxeno y piroxicam de muestras de agua enriquecidas, mediante la implementación de la técnica de extracción en fase sólida (SPE). Se evaluaron las siguientes variables: tipo de sorbente, volumen de muestra, pH, volumen y solvente de elución.

Resultados y conclusiones: Se obtuvo una eficiencia de extracción de los AINE de 98-99% para un volumen de muestra de 250 mL con el cartucho Strata X[®](500 mg), un pH=6 y metanol (12 mL) como solvente de elución. Con la implementación del método de extracción SPE se espera monitorear y determinar los AINE en experimentos de interacción planta-fármacos en un ecosistema acuático, lo que permitirá comprender mejor la posible depuración del fármaco intacto o sus metabolitos al medio acuoso (3).

Bibliografía

1. Botero, A.; Martínez, D.; Boix, C.; Rincón, R.; Castillo, N.; Arias, L.; Manrique, L.; Torres, R.; Moncayo, A.; Hernández, F. 'An Investigation into the occurrence and removal of pharmaceuticals in Colombian wastewater.' *Sci.Total Environ.* **2018**, *642*, 842-853.
2. Heberer, T. Occurrence, Fate, and removal of pharmaceutical residues in the aquatic environment: A review of recent Research Data. *Toxicology Letters.* **2002**, *131*, 5-17.
3. Dordio, A.; Ferro, R.; Teixeira, D.; Palace, A.; Pinto, A.; Dias, C; Study on the use of Typha Spp. for the phytotreatment of water contaminated with ibuprofen. *Int. J. Environ. Anal. Chem.* **2011**, *91*, 654-667.



PERFIL CROMATOGRÁFICO DE ACEITES ESENCIALES DE ESPECIES DE LOS GÉNEROS *Zanthoxylum* Y *Amirys*

Marcial Fuentes Estrada^{1,4}, Andrea Jimenez-González², Elena Stashenko³, Olimpo García Beltrán⁴.

¹Facultad de ingeniería Agronómica, Universidad del Tolima, ²Facultad de Ciencias, Universidad del Tolima, ³Research Center of Excellence CENIVAM, CIBIMOL, Universidad Industrial de Santander, Building 45, UIS, Carrera 27, Calle 9, Bucaramanga 680002, Colombia, ⁴Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas, Universidad de Ibagué, Carrera 22 Calle 67, Ibagué 73002, Colombia.

mafuentes@ut.edu.co

Palabras claves: Aceites esenciales, Rutaceae, *Zanthoxylum*, *Amirys*

Introducción: Los aceites esenciales (AE) extraídos de las hojas y semillas de las plantas han sido utilizados desde hace décadas, dado que presentan diferentes propiedades etnobotánicas, organolépticas y de bioactividad; es así como parte de las investigaciones se direccionan en la búsqueda de compuestos que se puedan usar como agentes terapéuticos.

Materiales y métodos: El material vegetal fue recolectado y procesado en húmedo. Para la extracción se empleó un equipo de hidrodestilación asistido por microondas con ciclo de irradiación de 60 minutos y una potencia del 70%. El análisis cromatográfico se realizó en un GC 6890 System Plus, Agilent con detector selectivo de masas.

Resultados y discusión: El rendimiento para el AE RZM fue de 1,75%, para el RZC (**Z**= *Zanthoxylum*) fue de 2,45%, y para RAB (**A**=*Amirys*) fue de 1,04%. La composición química del aceite esencial por GC-MS de RZM revela la existencia de 12 compuestos mayoritarios de los cuales resaltamos la Xantoxilina (47,6 %) y Germacreno D (14,2 %). Así mismo, el análisis de RZC mostró 14 Compuesto de los cuales los mayoritarios encontramos el Germacreno D (31,5 %) y el cis-β-Farneseno. Finalmente el análisis para el AE obtenido de la muestra RAB revela la presencia de 11 compuesto mayoritarios de los cuales el β-sesquifelandreno (38,8 %) y el β-Bisaboleno (5,1 %) son los más representativos. Además, se logra evidenciar a través del perfil cromatográfico que los aceites esenciales analizados presentan un compuesto común, el Germacreno D. Compuesto muy importante por su relación con actividades antimicrobiana e insecticida.

La extracción de aceites esenciales de RZM, RZC y RAB asistida por microondas muestra altos rendimientos con respecto a otras plantas aromáticas dado que supera la hasta el 2 % en rendimiento. Además son una fuente rica en quimiotipos que pueden ser utilizados en ensayos de actividad antimicrobiana y antioxidante.

Referencias:

1. Wang, B., Sui, J., Yu, B., Yuan, C., Guo, L., Abd El-Aty, A. M., & Cui, B. (2020). Physicochemical properties and antibacterial activity of corn starch-based films incorporated with *Zanthoxylum bungeanum* essential oil. *Carbohydrate Polymers*, 117314.
2. Christofoli, M., Costa, E. C. C., Bicalho, K. U., de Cássia Domingues, V., Peixoto, M. F., Alves, C. C. F., ... de Melo Casal, C. (2015). Insecticidal effect of nanoencapsulated essential oils from *Zanthoxylum rhoifolium* (Rutaceae) in *Bemisia tabaci* populations. *Industrial Crops and Products*, 70, 301–308.
3. Park, H.-M., & Park, I.-K. (2012). Larvicidal activity of *Amyris balsamifera*, *Daucus carota* and *Pogostemon cablin* essential oils and their components against *Culex pipiens pallens*. *Journal of Asia-Pacific Entomology*, 15(4), 631–634.



Selección de un método de extracción para obtener ácido abscísico de semillas de *Zea mays*

Juan David Rivera¹, Diana Marcela Ocampo², Javier Torres³, Juan Pablo Penagos⁴, Raúl Andrés Martínez⁵

^{1,2,5}Grupo de Investigación en Estudios Ambientales en Agua y Suelo. Universidad de Caldas ^{1,3,5}Grupo de Investigación en Campos Electromagnéticos Medio Ambiente y Salud Pública. Universidad de Caldas. ⁴Departamento de Análisis Estadístico y Departamento de I+D, Dirac Consultorías S.A.S.

juan.rivera@ucaldas.edu.co

Palabras clave: ácido abscísico, maceración, DSASE

El maíz (*Zea mays*) está reconocido actualmente como una de las plantaciones más productivas. El crecimiento de este cereal está relacionado con mecanismos de acción bioquímica que implican cambios en la concentración de fitohormonas como el ácido abscísico (ABA), encargado de regular procesos como maduración embrionaria y latencia de semillas.

Se planteó seleccionar el método de extracción más eficiente para la obtención de esta fitohormona en semillas de maíz. Primero se compararon los métodos de extracción por maceración y extracción dinámica con disolvente asistida por sonicación (DSASE), con flujo continuo y con suspensión de flujo. Luego se determinaron los mejores parámetros de extracción para el mejor método. La cuantificación de la fitohormona se realizó mediante cromatografía líquida de alta eficiencia.

Mediante un diseño factorial se determinó que la concentración más alta de ácido abscísico se obtuvo por maceración ($0.300 \pm 0.020 \text{ mg kg}^{-1}$), cuya eficiencia aumentó al emplear como disolvente metanol-ácido fórmico al 5.0 % (60:40) a pH de 2.50, tiempo de extracción 24.0 h y 20.0 °C. Previamente se efectuó la construcción de la curva de calibración y verificación de los parámetros de validación obteniéndose: un límite de detección de 0.010 mg kg^{-1} , un límite de cuantificación de 0.035 mg kg^{-1} y linealidad entre 0.035 mg kg^{-1} y 2.000 mg kg^{-1} . Los resultados sugieren que el parámetro más importante en el proceso de extracción es el tiempo de exposición de la matriz al disolvente de extracción, haciendo que la extracción por maceración sea mejor.

Referencias:

1. Benítez, L., Gómez, F., Trejo, L., & Robledo, A. (2011). Anatomía, contenidos de ácido abscísico y nutrimentos y germinación de semillas de heliconia. *Revista Fitotecnia Mexicana*. 34(3): 189–196.
2. Rivera, J. D., Correa, Y. M., & Penagos, J. P. (2017). Evaluación de métodos de extracción para la obtención del ácido giberélico en semillas germinadas de maíz (*Zea mays* L.) *Revista Colombiana de Química*. 45–50.
3. Stirk, W. A., Tarkowská, D., Turečová, V., Strnad, M., & van Staden, J. (2014). Abscisic acid, gibberellins and brassinosteroids in Kelpak®, a commercial seaweed extract made from *Ecklonia maxima*. *Journal of Applied Phycology*. 26(1): 561–567. Doi: 10.1007/s10811-013-0062-z

METODOLOGÍA ANALÍTICA PARA LA DETERMINACIÓN DE GLIFOSATO (GLY) Y ÁCIDO AMINOMETILFOSFÓNICO (AMPA) POR UHPLC-MS-IT EMPLEANDO EL MODO SRM (SELECTED REACTION MONITORING)

María Alejandra Sarasty Pabon¹; Germán Cuervo Ochoa¹; Tania Milena Gutiérrez Valencia¹

¹Grupo de Investigación en Procesos Electroquímicos-GIPEL. Departamento de Química, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y de la Educación, Universidad del Cauca, Sector Tulcán, CP 190003, Popayán, Colombia.

tgutierrez@unicauca.edu.co

Resumen: El glifosato (N-fosfometilglicina-GLY) fue introducido en la década de 1970 en la práctica agrícola, es el principal ingrediente activo en los plaguicidas de la marca Roundup® producidos por la Compañía Monsanto. Los plaguicidas a base de GLY, son los más ampliamente utilizados en todo el mundo, su uso incluye manejo agrícola, industrial, de jardinería ornamental y de malezas en las residencias, la formulación se encuentra registrada en más de cien países. El ácido aminometilfosfónico (AMPA) principal producto de biodegradación del GLY es un residuo conocido en los cultivos y otras plantas tratadas con GLY. El GLY en el cuerpo humano, se metaboliza y se genera como principal metabolito el AMPA del cual se puede asumir que tienen un perfil de toxicidad comparable al GLY.¹ La implementación de metodologías para la determinación y cuantificación de GLY y AMPA en diversos tipos de muestras, es de vital importancia para establecer focos de contaminación en humanos, animales y otras especies.^{2,3} En esta ocasión se desarrolló un método analítico para la determinación del GLY y AMPA empleando UHPLC acoplado a MS con IT (analizador de trampa iónica) y su aplicación en muestras reales complejas (sangre).

El control selectivo de reacción (SRM) (selected reaction monitoring) permitió detectar y cuantificar con un alto grado de sensibilidad y selectividad los iones fragmentos característicos de los analitos, lo cual permitió que sean monitoreados en una matriz compleja, ya que minimiza al máximo la presencia de otros interferentes (Figura 1). Basta con una leve separación cromatográfica entre los analitos para identificar cada segmento de acuerdo con el ion producto, para GLY se monitoreo la relación m/z= 88.16 en el primer segmento de análisis y para AMPA la relación m/z= 112.14 registrada en un segundo segmento.

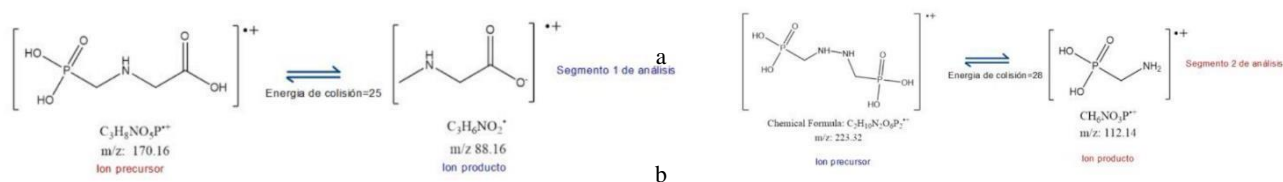


Figura 1. Formación de iones producto por MS-MS para el GLY y AMPA en el modo SRM: **a.** GLY + ácido fórmico 0,1% energía normalizada de colisión de 25. **b.** AMPA + ácido fórmico 0,1% energía normalizada de colisión de 28.

La metodología implementada, UPLC-MS-IT cumplió con los parámetros estadísticos requeridos de linealidad (0.5-10 mg L⁻¹, R>0.95), precisión instrumental con DER ≤ 17 %, límites de cuantificación y detección de 0,5 mg L⁻¹ y 0,1 mg L⁻¹ respectivamente. Con la metodología de análisis optimizada, se aplicó a extractos de sangre humana obtenidos a partir de la dispersión de matriz en fase sólida-DMFS, con un porcentaje de recuperación del 37.0 ± 4.5 %.

Referencias

1. Bolognesi, C.; Bonatti, S.; Degan, P.; Gallerani, E.; Peluso, M.; Rabboni, R.; Roggeri, P.; Abbondandolo, A. Genotoxic Activity of Glyphosate and Its Technical Formulation Roundup. *J. Agric. Food Chem.* **1997**, *45*, 1957–1962. [https://doi.org/10.1021/jf9606518\(1997\)](https://doi.org/10.1021/jf9606518(1997)).
2. Mink, P. J.; Mandel, J. S.; Scurman, B. K.; Lundin, J. I. Epidemiologic studies of glyphosate and cancer: A review. *Regulatory Toxicology and Pharmacology.* **2012**, *63*, 440-452. <https://doi.org/10.1016/j.yrtph.2012.05.012>
3. Ciasca, B.; Pecorelli, I.; Lepore, L.; Paoloni, A.; Catucci, L.; Pascale, M.; Lattanzio, V. M. T. Rapid and reliable detection of glyphosate in pome fruits, berries, pulses and cereals by flow injection – Mass spectrometry. *Food Chemistry.* **2020**, *310*, 125813. <https://doi.org/10.1016/j.foodchem.2019.125813>
4. Guo, H.; Wang, H.; Zheng, J.; Liu, W.; Zhong, J.; Zhao, Q. Sensitive and rapid determination of glyphosate, glufosinate, bialaphos and metabolites by UPLC-MS/MS using a modified Quick Polar Pesticides Extraction method. *Forensic Sci. Int.* **2018**, *283*, 111–117. <https://doi.org/10.1016/j.forsciint.2017.12.016>



DESARROLLO Y VALIDACION DE UN METODO POR HPLC/DAD PARA LA CUANTIFICACION DE CANNABINOIDES EN ACEITE DE CANNABIS SATIVA

Raslan-Jaramillo J., De Diego, M. Avello, M, Ríos, G

Departamento de Farmacia, Facultad de Farmacia, Universidad de Concepción, Concepción, Chile – Dpto. Ciencias y Tecnología de los alimentos, Universidad de Concepción, Chile.

mdediego@udec.cl

Palabras clave: cannabinoides, Tetrahidrocannabinol, cannabidiol, aceite de cannabis,

Los extractos de cannabis pueden ser utilizados como tratamiento alternativo en patologías que cursan con dolor crónico como fibromialgia y cáncer.

Se desarrolló y validó un método analítico mediante HPLC/DAD para la determinación de los cannabinoides tetrahidrocannabinol (THC) y cannabidiol (CBD) en muestras del extracto de cannabis sativa en aceite.

Para la separación cromatográfica se empleó una columna Purospher® STAR RP-18 con una fase móvil compuesta de acetonitrilo y agua con ácido fórmico (0,1%) (pH 2,5) 80:20 v/v, a flujo 1 mL min⁻¹ y detección UV (DAD) a 208 y 280 nm para CBD y THC respectivamente.

Se demostró que el método cumple con las normas de validación de la ICH, con respecto a linealidad ($r^2 = 0.9928$) en un intervalo de concentraciones de 1-2 µg/mL, para el CBD y de 40-100 µg/mL, para el THC. El método demostró ser preciso, exacto y con límites de detección y cuantificación adecuados.

La extracción de los cannabinoides fue desde inflorescencias con etanol y reconstituido en aceite de coco y maravilla, siendo este aceite diluido en isopropanol para su posterior cuantificación.

Se concluye que el método desarrollado es adecuado para la determinación cuantitativa de CBD y THC en aceite de cannabis sativa.

Referencias:

1. Citti, C. *et al.* Medicinal cannabis: Principal cannabinoids concentration and their stability evaluated by a high performance liquid chromatography coupled to diode array and quadrupole time of flight mass spectrometry method. *J. Pharm. Biomed. Anal.* **128**, 201–209 (2016)



Optimización de un método para solventes residuales en productos de Cannabis por HS-GC/MSD

Laura Geraldine Benavides Garzón, Jesús Enrique Acedo Albero.

Universidad Nacional de Colombia. Khymós S.A.S.

lgbenavidesg@unal.edu.co

Palabras Claves: Solventes Residuales, Cannabis, HS-GC/MSD.

Introducción: La determinación de solventes residuales para productos farmacéuticos está definida por la USP <467>, sin embargo, los productos derivados del cannabis difieren mucho de estos, especialmente en su naturaleza variada (aceites, concentrados, comestibles, etc.), por lo que es indispensable desarrollar una metodología para su determinación.

Métodos: 34 compuestos comúnmente utilizados en la fabricación de productos de cannabis se estudiaron, por HS GC/MSD en modo SIM, utilizando α,α,α -trifluorotolueno como ISTD con una columna DB-624 Ultra Inerte. La adquisición y manejo de datos se llevó a cabo con el software MassHunter.

Resultados y conclusiones: En los productos derivados del Cannabis se encuentran compuestos orgánicos volátiles que pueden ser solventes residuales, usados durante la extracción y/o fabricación, y deberían ser eliminados durante el proceso, dando lugar a una contaminación que dependiendo de su concentración puede llegar a ser tóxica para los seres vivos.

Se recomienda un método para poder determinar 34 compuestos, bajo parámetros cromatográficos optimizados, en el que se revisa para cada compuesto, el cumplimiento de la normatividad canadiense, obteniendo una linealidad con un coeficiente de correlación mínimo de 0.995, manteniendo un límite de detección teniendo en cuenta la relación señal ruido para cada compuesto.

Referencias:

1. Terry Harper, Jeffery Hollis, Eric Fausett, Novel Residual Solvents Analysis of Cannabinoid Products with the Agilent Headspace-GC/MS System, Application Note Cannabis & Hemp Testing (5994-1926EN), pg 11, 2020.
(2) United States Pharmacopeia, USP <467> Disolventes residuales, pg 23, 2019.



Efecto del ultrasonido de alta intensidad en el proceso de extracción y despolimerización de procianidinas del Cacao (*Theobroma cacao*): Aproximación a la formulación de un ingrediente rico en compuestos absorbibles y de fácil incorporación a matrices alimentarias

Álvaro José García Ortega, Catalina Agudelo Ramírez, Luis Carlos Carrillo Hormaza, Susana Muñoz Acevedo, Edison Javier Osorio Durango, Elkin Galeano Jaramillo

Grupo de Investigación en Sustancias Bioactivas (GISB), Facultad de Ciencias Farmacéuticas y Alimentarias, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia.

alvaroj.garcia@udea.edu.co

Palabras Claves: Cacao Catequinas Procianidinas Ultrasonido

Introducción: La semilla del cacao (*Theobroma cacao* L.) presenta un alto porcentaje de compuestos fenólicos, el cual oscila en un rango entre 12-18% del total del grano. La presente investigación, está relacionada con la obtención de extractos de Cacao (*T. cacao*) ricos en flavanoles de tipo monómeros y mediante la aplicación del ultrasonido de alta intensidad, se fragmento los polímeros de tipo procianidinas a compuestos más pequeños.

Métodos: Se realizó un procesamiento del Fruto del Cacao hasta obtener una matriz vegetal con un alto contenido de activos, para ello se usó tecnologías como extrusores térmicos y secadores de lecho fluidizado que permitieran preservar las moléculas en todo el proceso, además se optimizó los procesos de extracción mediante un diseño experimental donde se cuantifico las moléculas de interés en las distintas etapas por HPLC-DAD-FLD.

Resultados y Conclusiones: Se logró obtener una metodología de procesamiento de materia vegetal que logró preservar las moléculas en todo el proceso preservando los monómeros (+)-catequina y (-)-epicatequina, al igual que las procianidinas presentes en la matriz. Se optimizó los procesos de extracción mediante el modelamiento cinético, lo que permitió definir las variables más importantes en la extracción y mejorar su eficiencia en los procesos de escalado. Se logró obtener un extracto con alto contenido de flavanoles que fue sometido al procesos de fragmentación mediante el uso ultrasonido de alta intensidad y medios ácidos con el fin de disminuir el contenido de polímeros, logrando así una reducción del 21% de los polímeros totales.

Referencias

1. Actis-Goretta, Lucas et al. 2013. "Intestinal Absorption, Metabolism, and Excretion of (-)-Epicatechin in Healthy Humans Assessed by Using an Intestinal Perfusion Technique." *American Journal of Clinical Nutrition* 98(4):924–33.
2. Degrees of Polymerization." 563:33–43. Cadena-cala, Tatiana and Jenny Herrera-ardila. 2009. "Artículos Originales El Cacao y Sus Productos Como Fuente de Antioxidantes : Efecto Del Procesamiento."
3. Gogate, Parag R. and Amrutlal L. Prajapat. 2015. "Ultrasonics Sonochemistry Depolymerization Using Sonochemical Reactors : A Critical Review." 27:480–94.



Desarrollo y Validación de un método para la determinación de cannabinoides en soluciones orales por Cromatografía Líquida (HPLC-DAD).

Jesús Acedo, Gustavo García Guevara, Laura Camila Achury, Laura Geraldine Benavides.

Khymós S.A.S - Lab3.

Jesus.Acedo@khymos

Palabras Clave: Cannabinoides, HPLC-DAD, Soluciones Orales.

Introducción: El cannabis medicinal tiene alrededor de 500 compuestos diferentes entre metabolitos primarios y secundarios derivados de su actividad celular. Esto supone un importante reto analítico debido a que, debemos cuantificar de manera exacta y precisa un grupo reducido de ellos y evitar que el resto no interfieran en el análisis.

Métodos: Actualmente hay pocos métodos normalizados (ASTM, UOP, EPA, AOAC, etc.) para cannabis. Luego de una exhaustiva revisión bibliográfica, se realizó una adaptación de la norma AOAC 2018:11; para su uso en derivados de cannabis. Se utilizó un HPLC-DAD Agilent y una columna C18, que permite la resolución de 11 cannabinoides.

Resultados y conclusiones: Los parámetros evaluados fueron: linealidad, repetibilidad, límite de detección y cuantificación, recuperación, robustez y especificidad. La fase móvil utilizada fue acetonitrilo 0.1% FA y Agua 0.1% FA en gradiente, lo que permitió obtener una resolución >1. Se evaluaron dos solventes para la extracción (ACN, EtOH), de los cuales se eligió el etanol obteniendo mejores resultados en la repetibilidad.

El DAD permite la colección de los espectros de manera instantánea durante la corrida, esto permite evaluar la calidad espectral para el estudio de especificidad; y así descartar que alguna interferencia coeluyera con los compuestos de interés. También se analizaron diferentes longitudes de onda, seleccionándose 228 nm por su respuesta promedio para los analitos estudiados.

El método resultó sensible, repetible, robusto, selectivo y confiable para los 11 cannabinoides estudiados.

Referencias:

1. Lukas Vaclavik, Frantisek Benes, Marie Fenclova, Jiri Hricko, Ales Krmela, Veronika Svobodova, and Jana Hajslova, Katerina Mastovska. Quantitation of Cannabinoids in Cannabis Dried Plant Materials, Concentrates, and Oils Using Liquid Chromatography–Diode Array Detection Technique with Optional Mass Spectrometric Detection: Single-Laboratory Validation Study, First Action. 2018.11. Journal of AOAC International Vol. 102, No. 6, 2019. pg 1822-1833.



Extracción simultánea y determinación cromatográfica de compuestos fenólicos y terpenoides de *M. spicata*: Contribución al uso de una química total de interés

Karina Sierra¹, Edison Osorio¹, Luis Carlos Carillo ^{1,2}

¹Grupo de Investigación en Sustancias Bioactivas, Facultad de Ciencias Farmacéuticas y Alimentarias, Universidad de Antioquia UdeA, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia. ²Bioingred Tech, spinoff Universidad de Antioquia.

karina.sierra@udea.edu.co.

Palabras claves: *Mentha spicata*, cromatografía líquida, cromatografía gaseosa, ácido rosmarínico, carvona.

Introducción: *Mentha spicata* conocida como hierbabuena, es una especie ampliamente usada por su aceite esencial en muchas industrias. El componente principal del aceite esencial es carvona (CA) (1,2). Por otro el compuesto fenólico mayoritario corresponde al ácido rosmarínico (AR), el cual es un potente compuesto antioxidante (3).

Métodos: El proceso de extracción se realizó a partir de la comparación con diferentes solventes. Los perfiles químicos se desarrollaron a través de (GC-MS) y (HPLC DAD). Además, se realizó la cuantificación de los compuestos mayoritarios CA y AR. Posteriormente, se plantea su optimización de extracción utilizando ultrasonido de alta intensidad UAI.

Resultados y conclusiones: El presente estudio se basó en la obtención simultánea de los compuestos terpenicos volátiles y los fenólicos no volátiles de *M. spicata* cultivada en el Oriente Antioqueño, y el potencial aprovechamiento de su riqueza química. Este desarrollo se realizó a través de la extracción dirigida en UAI donde se estandarizaron las mejores condiciones para la obtención de dichos compuestos de interés. Se encontró que el solvente etanol-agua 80:20 favoreció la extracción de los compuestos terpenicos identificados a través de GC/MS como los compuestos fenólicos identificados por HPLC/DAD. Con esta información se busca desarrollar procesos sostenibles, disminuyendo tiempos en los procesos, usando solventes ecológicos que combinen alto rendimiento en la extracción y sin daño o pérdida de los compuestos objetivos. Mediante esta tecnología, se pretende obtener productos que posean la toda química de la hierbabuena, pero con menor costo energético y con aplicabilidad en diferentes industrias.

Referencias:

1. Mahboubi, M. *Mentha spicata* L. essential oil, phytochemistry and its effectiveness in flatulence. *Journal of Traditional and Complementary Medicine*. (2018)
2. Narasimhamoorthy, B., Zhao, L. Q., Liu, X., Yang, W., & Greaves, J. A.. Differences in the chemotype of two native spearmint clonal lines selected for rosmarinic acid accumulation in comparison to commercially grown native spearmint. *Industrial Crops and Products*, (2015) 63, 87–91.
3. Prakash, O., Chandra, M., Pant, A. K., & Rawat, D. S.. Mint (*Mentha spicata* L.) oils. In *Essential Oils in Food Preservation, Flavor and Safety*. Elsevier Inc (2016).



EFFECTO DE CLONES Y ÁREAS DE CULTIVO SOBRE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA POLIFENÓLICA DE GRANOS DE CACAO: UN ENFOQUE QUIMIOMÉTRICO PARA LA SELECCIÓN Y DESARROLLO DE MATRICES ALIMENTARIAS RICAS EN FLAVONOIDES

Susana Muñoz Acevedo¹, Catalina Agudelo Ramírez¹, Luis Carlos Carrillo Hormaza^{1,2}, Álvaro José García Ortega¹, Edison Javier Osorio Durango¹, Elkin Galeano Jaramillo¹.

¹Grupo de Investigación en Sustancias Bioactivas (GISB), Facultad de Ciencias Farmacéuticas y Alimentarias, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia. ²Bioingred Tech S.A.S, TECH INNOVATION GROUP, Itagüí, Colombia

susana.munoza@udea.edu.co

Palabras claves: cacao, catequinas, procianidinas, clones.

Introducción: *Theobroma cacao* es una planta reconocida por el sabor de sus semillas y sus compuestos funcionales asociados a efectos antioxidantes¹ y cardioprotectores². En este estudio se evaluó la variabilidad de monómeros y polímeros polifenólicos, respecto al clon y la procedencia³, por técnicas quimiométricas, para seleccionar un material rico en flavonoides.

Métodos: Se analizaron 141 muestras de seis clones universales y cuatro regionales en dos tiempos de cosecha. Los granos fueron procesados y extraídos por ultrasonido; Los extractos fueron cuantificados mediante HPLC-DAD-FLD. El modelado quimiométrico incluyó análisis de componentes principales y análisis discriminante de mínimos cuadrados parciales (matriz 141 x 16).

Resultados: Se observó prevalencia de los monómeros (+)-catequina y (-)-epicatequina, junto con un dímero (procianidina B2); En menor cantidad se encontraron 11 procianidinas de pesos moleculares variables. Al discriminar según las 16 variables (catequina, epicatequina, procianidina B2, 11 procianidinas desconocidas, total de monómeros y total de flavonoides) se pudo determinar que la expresión de monómeros promovió la diferenciación entre regiones mostrando una mayor producción en Turbo, mientras que el Nordeste destaca por un mayor contenido de procianidinas. El clon EET 96 fue el de mayor riqueza en compuestos (20.88mg/g muestra) y poca variabilidad entre las áreas de cultivo. En contraste, los demás clones presentaron variabilidad moderada o alta en la expresión metabólica. Los resultados indican que el origen de los frutos afectó significativamente la expresión de metabolitos, siendo el clon EET 96 un material indicado para su aprovechamiento en el desarrollo de ingredientes funcionales útiles en matrices alimentarias ricas en flavonoides.

Referencias:

1. Indiarto, R.; Pranoto, Y.; Santoso, U.; Supriyanto. *In Vitro* Antioxidant Activity and Profile of Polyphenol Compounds Extracts and Their Fractions on Cacao Beans. *Pak. J. Biol. Sci.* **2019**, *22* (1), 34–44. <https://doi.org/10.3923/pjbs.2019.34.44>.
2. Ishaq, S.; Jafri, L. Biomedical Importance of Cocoa (*Theobroma Cacao*): Significance and Potential for the Maintenance of Human Health. *Matrix Sci. Pharma MSP* **2017**, *1* (1), 1–5.
3. D'Souza, R. N.; Grimbs, S.; Behrends, B.; Bernaert, H.; Ullrich, M. S.; Kuhnert, N. Origin-Based Polyphenolic Fingerprinting of *Theobroma Cacao* in Unfermented and Fermented Beans. *Food Res. Int.* **2017**, *99*, 550–559. <https://doi.org/10.1016/j.foodres.2017.06.007>.



REDES MOLECULARES COMO PREDICTORES DE LA DIVERSIDAD QUÍMICA Y RESPUESTA A FITOPATÓGENOS DE ESPECIES ARBÓREAS PRESENTES EN REMANENTES DE BOSQUES ANDINOS

Juan Pablo Naranjo¹, Tatiana Lobo-Echeverri¹, Brian E. Sedio²

¹Grupo de Investigación en Química de los Productos Naturales y los Alimentos, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín - Colombia. ²Department of Integrative Biology University of Texas at Austin, EEUU.

junaranjov@unal.edu.co

Palabras clave: metabolómica, fitopatógenos, redes moleculares

Introducción: Las relaciones entre plantas y hongos se establecieron desde los primeros linajes de su evolución, dándose de tipo simbióticas o patogénicas (1). El análisis metabolómico mediante redes moleculares, permite abordar mezclas complejas y descubrir núcleos químicos relacionados con adaptación al medio, descriptores taxonómicos o actividad biológica (2).

Métodos: Se determinó capacidad antifúngica de 48 especies arbóreas de cinco remanentes de bosque andino, mediante ensayos de inhibición del crecimiento micelial con método del agar envenenado (3) sobre tres fitopatógenos: *Botrytis cinerea*, *Colletotrichum gloeosporioides* y *Fusarium oxysporum*. La caracterización química de los extractos se realizó con GC-MS y UHPLC-MS.

Resultados y Conclusiones: Como resultados se obtuvieron diferencias significativas en la actividad antifúngica entre los lugares de origen de las especies, así como también entre los grupos taxonómicos que representan. Se observó coincidencia en las muestras con actividad contra *B. cinerea* y *F. oxysporum*, posiblemente el efecto de los extractos tenga un mecanismo de acción común a ambas especies. En el análisis de redes moleculares se observó la contribución de las muestras activas de forma general en biflavonoides, flavonoles, ácidos hidroxicinámicos y acilos grasos, y en compuestos específicos en taninos, pterocarpanos, macrolactamas, diterpenos, sesquiterpenos, tetraterpenos, saponinas, bencenoides, fenilaminas, glucósidos fenólicos, halobencenos, oligosacáridos y piridinas.

Referencias:

1. Freeman, B. C.; Beattie, G. A. An Overview of Plant Defenses against Pathogens and Herbivores. *Plant Heal. Instr.* 2008. <https://doi.org/10.1094/phi-i-2008-0226-01>.
2. Sedio, B. E.; Spasojevic, M. J.; Myers, J. A.; Wright, S. J.; Person, M. D.; Chandrasekaran, H.; Dwenger, J. H.; Prechi, M. L.; López, C. A.; Allen, D. N.; et al. Chemical Similarity of Co-Occurring Trees Decreases With Precipitation and Temperature in North American Forests. *Front. Ecol. Evol.* 2021, 9 (May), 1–18. <https://doi.org/10.3389/fevo.2021.679638>.
3. Sundram, S. FIRST REPORT : ISOLATION OF ENDOPHYTIC *Trichoderma* FROM OIL PALM AND THEIR in Vitro ANTAGONISTIC ASSESSMENT ON *Ganoderma Boninense*. 2013, 368–372.



Caracterización química de alcaloides de Amaryllidaceae aislados de *Crinum jagus*

Arango-Velásquez, N.¹, Trujillo-Chacón, LM.¹, Osorio, E.¹

¹Grupo de Investigación en Sustancias Bioactivas, Facultad de Ciencias farmacéuticas y Alimentarias, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia.

natalia.arangov@udea.edu.co

Palabras claves: Alcaloides, *Crinum jagus*, GC/MS.

Introducción: La subfamilia Amaryllidoideae de la familia Amaryllidaceae es uno de los taxones más importantes de plantas que contienen alcaloides. Su estudio fitoquímico ha permitido la identificación de aproximadamente 636 alcaloides de Amaryllidaceae (1). Muchos de ellos presentan actividades biológicas y farmacológicas motivando así a la investigación de esta subfamilia (2,3).

Métodos: La fracción alcaloidal de *Crinum jagus* fue obtenida mediante una extracción ácido-básica asistida por ultrasonido (2); la cual se purificó mediante cromatografía por exclusión de tamaño (SEC) utilizando Sephadex LH-20; Los alcaloides fueron detectados e identificados mediante patrones de fragmentación obtenidos por GC-MS (3), y elucidados estructuralmente por espectroscopia RMN.

Resultados y discusión: El análisis por GC-MS de la fracción alcaloidal de *Crinum jagus*, logró la identificación de un grupo de alcaloides con patrones de fragmentación característicos de los alcaloides de la familia Amaryllidaceae. Se detectaron 28 alcaloides tipo crinina, narciclasina, haemantamina y licorina. A partir de 6 sub-fracciones obtenidas por SEC, se logró la identificación por GC-MS de alcaloides como crinina, hamayne, ismina, licorina, powellina y trisfaeridina, entre otros. Además, se logró el aislamiento y purificación de trisfaeridina, una molécula con un ion molecular de m/z 223, consistente con su fórmula molecular C₁₄H₉NO₂. La elucidación mediante espectroscopia de RMN se encuentra en concordancia con las señales reportadas en la literatura. De esta forma se logró establecer que estas técnicas analíticas, proporcionan información fundamental en la caracterización química de los alcaloides de la especie *Crinum jagus*, siendo esta especie una fuente relevante de alcaloides de Amaryllidaceae.

Referencias :

1. Colombiana, B.; Lesmes, M.; Cortés, N.; Varela, S.; Osorio, E. Biota Colombiana. Biota Colomb. 2019, 20 (1), 2–20. <https://doi.org/10.21068/C2019.V20N01A01>.
2. Ka, S.; Masi, M.; Merindol, N.; Di Lecce, R.; Plourde, M. B.; Seck, M.; Górecki, M.; Pescitelli, G.; Desgagne-Penix, I.; Evidente, A. Gigantelline, Gigantellinine and Gigancrinine, Cherylline- and Crinine-Type Alkaloids Isolated from *Crinum Jagus* with Anti-Acetylcholinesterase Activity. Phytochemistry 2020, 175, 112390. <https://doi.org/10.1016/J.PHYTOCHEM.2020.112390>.
3. N, C.; RA, P.-D.; R, A.; F, A.; S, B.; GP, C.-G.; E, O. Neuroprotective Activity and Acetylcholinesterase Inhibition of Five Amaryllidaceae Species: A Comparative Study. Life Sci. 2015, 122, 42–50. <https://doi.org/10.1016/J.LFS.2014.12.011>.



Métodos *in vivo* abren nuevas posibilidades para acceder a la quimiodiversidad única que se encuentra en las ranas de la superfamilia Dendrobatoidea

Mabel Gonzalez¹, Alexander Asenov², Pieter Dorrestein³, Chiara Carazzone¹.

¹Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia. ²University of Connecticut, Connecticut, United States. ³University of California San Diego, San Diego, California, United States.

mabel.c.gonzalez@uniandes.edu.co

Palabras clave: Rana-venenosa, alcaloides, volátiles, swab.

Las ranas dendrobatidas son reconocidas por la diversidad única de más de 500 alcaloides que se encuentran en su piel. Sin embargo, en los últimos 50 años se ha practicado la eutanasia a más de 10.000 animales de diferentes especies para dilucidar sus estructuras químicas. El objetivo de este estudio fue la estandarización de dos protocolos de extracción *in vivo*. En primer lugar, se comparó la extracción de *swabs* (hisopos) de tres materiales diferentes (rayón, algodón y espuma de poliuretano). En segundo lugar, se realizó una extracción longitudinal de alcaloides empleando parches de PDMS. Los resultados de los *swabs* dieron lugar a perfiles químicos similares a los obtenidos por el método letal estándar, detectando un total de 94 compuestos en *Dendrobates truncatus* y *Oophaga histrionica*. Nuestros hallazgos demuestran que las especies y las localidades pueden diferenciarse de forma cualitativa por métodos *in vivo*. Por el contrario, las mediciones semicuantitativas condujeron a una subestimación. Por otro lado, los parches de PDMS permitieron un seguimiento temporal *in vivo* de 63 compuestos en *Dendrobates auratus*. Sin embargo, tras 36 horas de muestreo sucesivo de las secreciones, la eficacia de la extracción en términos de abundancia y diversidad disminuyó drásticamente. Estos resultados son especialmente relevantes ahora, cuando los anfibios se enfrentan a la quitridiomycosis panzootica y la bio y quimiodiversidad de Colombia juega un papel esencial, al ser un país megadiverso y tener un alto número de dendrobátidos endémicos y/o en riesgo de extinción.

Referencias:

1. Daly, J. W.; Spande, T. F.; Garraffo, H. M. Alkaloids from Amphibian Skin: A Tabulation of over Eight-Hundred Compounds. *J. Nat. Prod.* 2005, 68 (10), 1556–1575. <https://doi.org/10.1021/np0580560>.
2. Umile, T. P.; McLaughlin, P. J.; Johnson, K. R.; Honarvar, S.; Blackman, A. L.; Burzynski, E. A.; Davis, R. W.; Teotonio, T. L.; Hearn, G. W.; Hughey, C. A.; Lagalante, A. F.; Minbirole, K. P.
3. C. Nonlethal Amphibian Skin Swabbing of Cutaneous Natural Products for HPLC Fingerprinting. *Anal. Methods* 2014, 6 (10), 3277–3284. <https://doi.org/10.1039/C4AY00566J>.



Aislamiento de Mamea B/BA Ciclo D a partir del Extracto Etanólico Bioactivo de las Semillas de *Mamea americana* L.

Jadys Stella Mulett Vidal, Andres Felipe Oliveros Diaz, Fredyc Diaz Castillo, Gina Pajaron Gonzalez, Winston Quiñones, Julian Cabrera.

Universidad de Cartagena

jmulettv@unicartagena.edu.co

Palabras claves: Mamea cumarinas, Mamey, Callophylaceae.

Introducción: En la búsqueda de metabolitos secundarios presentes en el extracto bioactivo de las semillas de *Mamea americana* L. se aisló una nueva cumarina denominada Mamea B/BA Ciclo D, cuya estructura fue establecida de manera preliminar haciendo uso de RMN 1D y 2D de protón y carbono.

Metodología: El aislamiento se realizó mediante cromatografía en columna abierta de fase normal. Una vez aislado y purificado el compuesto 34S-K004 se llevó a cabo la elucidación estructural empleando Resonancia Magnética Nuclear de protón (¹H RMN) y de carbono (¹³C RMN) en una y dos dimensiones (COSY, HSQC, DEPT y HMBC).

Resultados y conclusiones: El espectro de ¹H-RMN de 34S-K004 mostró las siguientes señales en la zona alifática: un triplete a 0.99 ppm (CH₃), tres tripletes a δ1.89, 2.64 y 2.88, integrando para dos protones cada uno, un singlete a δ1.33 integrando para seis protones (2 x CH₃) y un multiplete a 2.23 integrando para un protón. Por otro lado, se observó un singlete integrando para un protón a δ 5.93 indicando la presencia de un protón vinílico. El espectro ¹³C-RMN mostró señales para 26 carbonos: Los desplazamientos de δ 200.1 y 160.76, corresponden a los carbonos de una cetona y una lactona respectivamente, junto con ocho señales en la zona aromática (desde 102 a 158.5 ppm), indicando la presencia del esqueleto característico de mamea cumarinas. Las correlaciones de los espectros COSY, HSQC y HMBC permitieron la localización de los sustituyentes, dando como resultado la estructura del compuesto denominado Mamea B/BA ciclo D.

Referencias:

1. Gouda, M. A.; Hussein, B. H.; El-Demerdash, A.; Ibrahim, M. E.; Salem, M. A.; Helal, M. H.; Hamama, W. S. A review: Synthesis and medicinal importance of coumarins and their analogues (Part II). *Current Bioactive Compounds*, **2020**, 16(7), 993-1008.
2. Gómez-Calderón, C.; Mesa-Castro, C.; Robledo, S.; Gómez, S.; Bolivar-Avila, S.; Diaz-Castillo, F.; Martínez-Gutiérrez, M. Antiviral effect of compounds derived from the seeds of *Mamea americana* and *Tabernaemontana cymosa* on Dengue and Chikungunya virus infections. *BMC complementary and alternative medicine*, **2017**, 17(1), 1-12.
3. Beltran Villanueva, C.E.; Diaz Castillo, F.; Gomez Estrada, H. Tamizaje fitoquímico preliminar de especies de plantas promisorias de la costa atlántica colombiana. *Revista Cubana de Plantas Medicinales*, **2013**, 18(4), 619-631.



Identificación de compuestos fenólicos y actividad tripanocida de un extracto etanólico obtenido de las hojas de *Castanedia santamartensis* (Asteraceae)

Quintero H.¹; Veas R.¹; Lapier M.²; Carrillo I.³; González-Herrera F.³; Carbonó-Delahoz, E.³; Quintero-Pertuz I.³; Díaz Pongutá B.⁴; Olea C.⁵; Maya J.²; Delporte C.¹

¹Laboratorio de Productos Naturales, Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile. ²Laboratorio de Bioquímica, Metabolismo y Resistencia a Fármacos, Instituto de Ciencias Biomédicas ICBM, Facultad de Medicina, Universidad de Chile. ³Universidad del Magdalena, Santa Marta, Colombia. ⁴Grupo de Investigaciones en Aguas, Pesticidas y Metales Pesados GIAMP, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Córdoba. ⁵Laboratorio de radicales libres y antioxidantes. Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile.

helena.quintero@ug.uchile.cl

Palabras clave: Polifenoles, *T. cruzi*, Enfermedad de Chagas.

Introducción: *Castanedia santamartensis* es una especie endémica de Colombia¹, usada por comunidades indígenas con fines etnomédicos². El objetivo de este estudio fue evaluar la actividad tripanocida de un extracto etanólico proveniente de las hojas de *C. santamartensis*, e identificar la presencia de compuestos fenólicos en las fracciones con mayor actividad biológica.

Métodos: El extracto etanólico (EET) se obtuvo de las hojas de *C. santamartensis* por maceración en frío. El fraccionamiento se realizó por separación cromatográfica con solventes alcohólicos. La viabilidad celular se evaluó *in vitro* mediante ensayos de MTT y citometría de flujo. La identificación de compuestos fenólicos se realizó mediante HPLC-UV-ESI-MS.

Resultados y Conclusiones: El EET y sus fracciones CS400 y CS402 presentaron actividad tripanocida con valores de concentración inhibitoria 50 (CI50) correspondientes a: 15,4 ± 3,1 y 33,1 ± 1,5 µg/mL respectivamente, mientras que el control positivo (nifurtimox) presentó una CI50 de 5,7 ± 0,7 µg/mL. Los compuestos fenólicos identificados entre ambas fracciones fueron: ácido gálico, ácido siríngico, ácido ferúlico, ácido clorogénico, ácido cafeico, ácido cumárico, ácido 3-HBenzoico, rutina, quercetina, ácido abscísico, kaempferol, apigenina, quercitrina, ácido criptoclorogénico y myricetin. Los resultados indican que el EET y sus fracciones CS400 y CS402 provenientes de las hojas de *C. santamartensis*, contienen compuestos fenólicos con actividad tripanocida. Por lo tanto, ambas fracciones son candidatas potenciales para seguir investigando en el desarrollo de nuevos fitofármacos anti protozoarios.

Referencias

1. Bernal, R.; Gradstein, S.; Celis, M. *Castanedia santamartensis* R.M.King & H.Rob. Catálogo de plantas y líquenes de Colombia <http://catalogoplantasdecolombia.unal.edu.co> (accessed Sep 29, 2021).
2. Carbonó-Delahoz, E.; Dib-Diazgranados, J. C. Medicinal Plants Used by the Cogui at Palomino River , Sierra Nevada of Santa Marta (Colombia). *Caldasia* **2013**, 35 (2), 333–350.



Optimización y validación de un método de derivatización con BF₃ / MeONa para el análisis de FAME de *Staphylococcus aureus* por GC-MS

Miguel A. Pinzón-Olarte¹; Gerson-Dirceu López¹; Chad Leidy¹; Chiara Carazzone¹

¹Universidad de los Andes, Bogotá DC, Colombia

miguelpinzon99@gmail.com

El *Staphylococcus aureus* (*S. aureus*) es una bacteria Gram-positiva responsable de infecciones nosocomiales y adquiridas en humanos. El principal problema a raíz de este microorganismo es el número de cepas resistentes a diferentes antibióticos. Esta resistencia está asociada con cambios en las concentraciones de lípidos de membrana en *S. aureus*. El análisis de lípidos para estas bacterias es posible mediante GC-MS con un proceso de derivatización previo para la formación de ésteres metílicos de ácidos grasos (FAME, por sus siglas en inglés). En este trabajo se ha optimizado y validado un protocolo que implica el uso de BF₃/MeONa en el análisis de lípidos de este microorganismo.

La derivatización de los lípidos de *S. aureus* se realizó con BF₃ / MeONa para una reacción de 10 min a una temperatura de 50 ° C y utilizando el agente derivatizante a concentraciones catalíticas. La separación cromatográfica se realizó en una columna FAME con una rampa de temperatura de 30 minutos. La optimización del método de derivatización se realizó con ocho ácidos grasos libres y dos cardiolipinas de cadenas C14 y C18. Se encontraron buenos valores de repetibilidad, límites de detección y cuantificación para el método optimizado.

La linealidad del método validado estuvo entre 25 a 5000 mg / L, con LOD de 5 ppm y 25 ppm como LOQ. Se observó una buena separación cromatográfica en un estándar de 37 FAME en solo 28 minutos. Una comparación de ocho cepas de *S. aureus* mostró cambios en las concentraciones de FAME para cepas sensibles y resistentes a antibióticos como la meticilina y la daptomicina. Anti-iso FAME C15 se identificó como el principal producto de derivatización de los extractos de *S. aureus*. Además, el anti-iso C15 se deriva de la estafiloxantina, el carotenoide que produce el color característico de la bacteria y está relacionado con la resistencia microbiana a los antibióticos. Se encontraron condiciones suaves en el método de derivatización empleando BF₃ / MeONa en comparación con las informadas en la literatura.

REFERENCIAS:

1. Topolewska, A.; Czarnowska, K.; Halí, Ł. P.; Stepnowski, P. Evaluation of Four Derivatization Methods for the Analysis of Fatty Acids from Green Leafy Vegetables by Gas Chromatography. *J. Chromatogr. B* 2015, 990, 150–157. <https://doi.org/10.1016/j.jchromb.2015.03.020>.
2. Kristensen, M.; Christensen, P.; Christensen, J. H. Optimization and Validation of a Derivatization Method with Boron Trifluoride in Ethanol for Analysis of Aromatic Carboxylic Acids in Water. *J. Chromatogr. A* 2019, 1601, 21–26. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2019.05.003>.
3. López, G.-D.; Suesca, E.; Álvarez-Rivera, G.; Rosato, A. E.; Ibáñez, E.; Cifuentes, A.; Leidy, C.; Carazzone, C. Carotenogenesis of *Staphylococcus Aureus*: New Insights and Impact on Membrane Biophysical Properties. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) - Molecular and Cell Biology of Lipids* 2021, 1866 (8), 158941. <https://doi.org/10.1016/j.bbalip.2021.158941>.



INTERNAL STANDARD FOR HMF MONITORING IN HONEY

Cristian A. Godoy, Marcela Boroski

Federal University of Latin American Integration (UNILA), 6731 Tancredo Neves Av., Foz do Iguaçu, PR,
 85867-970, Brazil.

marcelaboroski@yahoo.com.br

Keywords: HPLC DAD Furfural FDCA.

The use of an internal standard (IS) in chromatographic methods has the advantage of reducing oscillations in the detection system, by compensating the change of the analytical signal for the analyzed compound. This work aimed at studying an IS for HMF and furfural monitoring in honey samples. Six compounds were evaluated by HPLC-DAD analysis using a C18 column an isocratic elution mode of acetonitrile and water (20:80), in order to be used as IS for the method. First caffeine was considered due to its molecular similarity with the analytes, but during analysis it was present into some honey samples. Then, butylated hydroxytoluene (BHT) was studied, although it showed crystallization in the mobile phase. Three food dyes, named azorubine, erythrosine and twilight yello, were evaluated, but they overlapped the peaks of the analytes, no matter how changed the mobile phase condition were. It was noticed that 2,5-furandicarboxylic acid (FDCA) showed good separation of the analytes, thus, it can be used as an internal standard. This compound is an oxidation product of 5-hydroxymethylfurfural (HMF) and its production requires extremely specific conditions, which makes it naturally absent in samples of honeys. To guarantee the use of the FDCA as an internal standard, it was necessary to study its behavior under the already established chromatographic conditions.

References:

1. Yaroshenko DV, Kartsova LA (2014) Matrix Effect and Methods for Its Elimination in Bioanalytical Methods Using Chromatography–Mass Spectrometry. *Journal of Analytical Chemistry* 69(4):311-317.
2. Rout PK, Nannaware AD, Prakash O, Kalra A, Rajasekharan R (2016) Synthesis of hydroxymethylfurfural from cellulose using green processes: A promising biochemical and biofuel feedstock. *Chemical Engineering Science* 142:318–346.
3. Collins CH, Braga GL, Bonato PS (2006) *Fundamentals of Chromatography*. Publisher of Unicamp, Campinas.



Evaluación instrumental para la determinación de residuos de antibióticos en músculo e hígado de pollo por cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas de alta resolución-Orbitrap.

Natalia Caro, Julio Cesar España, Jairo Arturo Guerrero Dallos

Laboratorio de Análisis de Residuos de Plaguicidas (LARP), Departamento de Química, Universidad Nacional de Colombia, Ciudad Universitaria Carrera 30 Calle 45-05, Bogotá, Colombia.

jaguerrero@unal.edu.co

El consumo de aves de corral se ha incrementado en los últimos años en Colombia y como consecuencia, algunos productores han hecho uso de antibióticos como promotores de crecimiento. Ante esta problemática de salud pública, la Organización Mundial de la Salud ha establecido un conjunto de directrices que restringen el uso de antibióticos en animales de consumo humano, debido al riesgo potencial de resistencia antimicrobiana. Por este motivo es necesario desarrollar metodologías que faciliten un sistema de control y vigilancia sobre estas sustancias. El presente trabajo consta del montaje y evaluación instrumental por UHPLC-HRMS-Orbitrap de un método analítico que permita la determinación de cinco macrólidos y lincomicina en músculo e hígado de pollo.

Se usó una columna con fase estacionaria en fase reversa C8, (100 mm x 4,6 mm x 5,0 µm) para la evaluación instrumental donde se analizaron los seis antibióticos de forma individual y en mezcla, tanto en solvente como en los extractos de las matrices blanco de hígado y músculo de pollo. En los diferentes experimentos se trabajó a tres concentraciones: 1, 10 y 100 µg/L. La extracción y limpieza de las muestras se realizó mediante el método QuEChERS expuesto en Bandeira, 2017. Se encontró que los parámetros de mayor influencia sobre la sensibilidad y forma de los picos cromatográficos corresponden a la composición del inyectable, los gases auxiliares de la fuente de ionización y el método de adquisición del espectrómetro de masas.

La composición del inyectable fue ACN/H₂O (9:1). Con esta composición se minimizó el efecto fisicoquímico de diferencia de viscosidades entre la fase móvil y el solvente del inyectable y, además, se facilitó la solubilidad de los analitos en la fase móvil. Los gases auxiliares, orientados a la nebulización, desolvatación y la temperatura del vaporizador fueron parámetros claves en la configuración de la fuente de ionización. En cuanto a los parámetros de adquisición en el espectrómetro de masas-Orbitrap se empleó el método de adquisición PRM (*Parallel Reaction Monitoring*) el cual permite aislar iones precursores y dar información completa de su fragmentación con un elevado nivel de sensibilidad. La selectividad y sensibilidad del método fueron alcanzadas mediante una resolución de 70000 FWHM que permitió diferenciar los analitos con una exactitud menor a 5 ppm. En la misma medida, el valor seleccionado del parámetro AGC (*Automatic Gain Control*), que hace referencia a la acumulación de los iones en la C-Trap, dio lugar a un incremento significativo en la intensidad de las señales de interés.

Referencias:

1. Bandeira, N. Ribeiro, L. Rizzetti, T. (2017). Evaluation of QuEChERS sample preparation for determination of avermectins residues in ovine muscle by HPLC-FD and UHPLC-MS/MS. Laboratorio de Análisis de Residuos de Plaguicidas, Departamento de Química, Universidad Federal de Santa Maria, Brasil.



COMUNICACIONES PÓSTER II SPAE

SLQAE-2

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DE ACEITES ESENCIALES Y EXTRACTOS HIDROETANÓLICOS OBTENIDOS A PARTIR DE BIOMASA RESIDUAL POST DESTILACIÓN DE *Turnera 695ifusa*, COLECTADA EN SANTANDER, COLOMBIA

Félix C. Muñoz, Sheylla T. Reyes, Karen J. Ramírez, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander, Carrera 27, Calle 9, Edificio 45, Bucaramanga, Colombia

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Turnera 695ifusa*, aceite esencial, extractos, biomasa residual.

Introducción: *T. 695ifusa* es un pequeño arbusto que pertenece a la familia Turneraceae, crece en partes tropicales de América y se conoce comúnmente como damiana, tiene flor amarilla. Se usa en la medicina tradicional como afrodisiaco; y estudios previos mostraron que sus aceites esenciales y extractos presentan varias actividades biológicas [1-2].

Métodos: Tres tipos del material vegetal de *T. 695ifusa* (TD) fueron recolectados en diferentes zonas de Santander, Colombia. La identificación taxonómica de plantas se llevó a cabo en el Herbario Nacional de Colombia. Hojas y tallos se sometieron a destilación por arrastre con vapor. La biomasa post-destilación se usó para obtener extractos hidroetanólicos.

Resultados y conclusiones: Mediante destilación por arrastre con vapor se obtuvieron los siguientes rendimientos de extracción para tres accesiones de *T. 695ifusa* recolectadas: 0.2, 0.3 y 0.5% (p/p). La caracterización de los AE se llevó a cabo por GC/MS. Se utilizaron dos columnas con fases estacionarias polar y no polar. Los compuestos se identificaron con base en sus espectros de masas (EI, 70 eV) comparados con las bases de datos (Adams, 2007; NIST, 2017), sus índices de retención lineales y usando algunos compuestos patrón. Los componentes mayoritarios identificados fueron aristolocheno (17.8-23.8%) y β -selineno (5-6.5%), valores similares a los reportados por Bueno *et al.* [3]. La caracterización química de los extractos vegetales se realizó mediante cromatografía líquida con detector de arreglo de diodos (HPLC- DAD) y LC/MS. Se detectaron 21 compuestos polifenólicos, los cuales dan un valor adicional al material vegetal post- destilado de *T. diffusa*.

Referencias:

1. Urbizu, A.; Castillo, O; Martínez, G & Torres, J. Natural variability of essential oil and antioxidants in the medicinal plant *Turnera diffusa*. *Asian. Pac. J. Trop. Med.* **2017**, 10 (2), 121-125.
2. Zhao, J; Pawar, R; Ali, Z & Khan, I. Phytochemical investigation of *Turnera diffusa*. *Nat. Prod. J.* **2016**, 48, 289-292.
3. Bueno, J; Escobar, P; Martínez, J; Leal, S; Stashenko, E. Composition of three essential oils, and their mammalian cell toxicity and antimycobacterial activity against drug resistant-tuberculosis and nontuberculous mycobacteria strains. *Nat. Prod. Commun.* **2011**, 6 (11), 1743-1748.



ANÁLISIS DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA POR GC/MS DE ACEITES ESENCIALES DE *Turnera pumilea* Y *Chromolaena moritziana*, RECOLECTADAS EN SANTANDER, COLOMBIA

Sheylla T. Reyes, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Turnera pumilea*, *Chromolaena moritziana*, aceite esencial, GC/MS.

Introducción: *Turnera pumilea* (Turneraceae) y *Chromolaena moritziana* (Asteraceae) son plantas nativas de Colombia. Existen estudios sobre su uso en la medicina tradicional, en infusiones como agente antibacteriano (1) como antifúngicos y antimicrobianos (2). Los estudios de la composición química de los aceites esenciales (AE) de ambas especies son limitados.

Métodos: Los AE se obtuvieron de las partes aéreas de las especies de estudio mediante hidrodestilación asistida por radiación de microondas. El material vegetal se obtuvo mediante el contrato de acceso a recursos genéticos y productos derivados con fines de bioprospección N° 270 del Ministerio del Medio Ambiente y Desarrollo Sostenible. El análisis de los AE se realizó en un cromatógrafo de gases GC 7890 (*Agilent Technologies*) acoplado a un detector selectivo de masas AT 5975C (ionización con electrones, 70 eV). Se utilizaron dos columnas con diferentes fases estacionarias: polar (DB-WAX) y apolar (DB-5MS). Los componentes se identificaron tentativamente comparando sus índices de retención lineales con los reportados en la literatura y los espectros de masas con los de bibliotecas espectrales (ADAMS, NIST, Wiley).

Resultados y conclusiones: El rendimiento de extracción fue de 0,01% en *T. pumilea* y 0,06% en *C. moritziana*. Se detectaron 18 compuestos en el AE de *T. pumilea* (área relativa > 0,5%). Los componentes mayoritarios identificados en el AE de *T. pumilea* fueron *trans*- β -cariofileno (13,8 %), selina-3(11)-dieno (12,4 %), γ -cadineno (10,9 %), germacreno D (9,9 %) y *n*-nonanal (6,8 %). En el AE de *C. moritziana* se detectaron 24 compuestos (área relativa > 0,5%); se identificaron en el AE de *C. moritziana* los compuestos principales germacreno D (13,0 %) y *trans*- β -cariofileno (2,9 %).

Referencias:

1. Szewczyk, K.; Zidorn, C. Ethnobotany, phytochemistry, and bioactivity of the genus *Turnera* (Passifloraceae) with a focus on damiana—*Turnera diffusa*. *J Ethnopharmacol.* **2014**, 152(3), 424-443.
2. Báez, D.; de los Ríos, C.; Crescente, O.; Caserta, A. Antibacterial and chemical evaluation of *Chromolaena moritziana*. *J Ethnopharmacol.* **1998**, 59(3), 203-206.



CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *PLECTRANTHUS AMBOINICUS*, UN PRODUCTO FORESTAL NO MADERABLE CULTIVADO EN LA SELVA PLUVIAL CENTRAL DEL CHOCÓ, COLOMBIA

Nayive Pino.

Universidad Tecnológica del Chocó

nayivepino@gmail.com

Palabras clave: Composición química, orégano, carvacrol

Introducción: Las comunidades rurales chocoanas obtienen del entorno muchos productos que utilizan para su sustento, constituyendo los llamados servicios ecosistémicos de provisión, sin verdadero aprovechamiento, generalmente con economía basada en extracción de oro y madera, causando graves daños ecológicos; los aceites esenciales hacen parte de dichos servicios, 697 categoría productos forestales no maderables, caracterizarlos da alto valor agregado a la flora.

Métodos: La extracción de los aceites esenciales se realiza por hidrodestilación convencional asistida en una manta de calentamiento. Los procedimientos para determinación de la composición química se realiza bajo la técnica cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masas (GC-MS), efectuados en el laboratorio de cromatografía del Cibimol de la UIS

Resultados y conclusiones: Los resultados obtenidos por GC-MS del aceite esencial de *Plectranthus amboinicus* conocido como orégano, reportan 47 componentes químicos, destacando al carvacrol (48.2%) como mayoritario, seguido por *trans*-Cariofileno, *trans*- α Bergamoteno, *p*-Cimeno, γ -Terpineno, α -Humuleno y Oxido de Cariofileno, que representan el 81.77% del total registrado (Tabla 1) y los compuestos restantes corresponden al 18.23%. De este modo, su alto porcentaje en masa de carvacrol lo convierte en posible fuente natural de este fenol, que le otorga múltiples propiedades biológicas.

Tabla 1. Identificación por GC-MS y cantidad relativa (%) del aceite esencial de *Plectranthus amboinicus*

Compuesto	I_k (exp.)		Área Relativa (%)
	DB-5MS	I_k (lit.)	
Carvacrol	1303	1299	48.26
<i>trans</i> -Cariofileno	1437		9.60
<i>trans</i> - α -Bergamoteno	1443	1435	5.87
<i>p</i> -Cimeno	1030	1025	5.22
γ -Terpineno	1063	1060	5.01
α -Humuleno	1472	1455	4.33
Óxido de Cariofileno	1600	1583	3.48

Convenciones: I_k (exp.): índice de Kovats experimental. I_k (lit.): índice de kovats literario. DB-5MS: columna polar

Referencias:

1. Stashenko, E.E.; Jaramillo, B. E. y Martínez, J.R.. Comparación de la composición química y de la actividad antioxidante *in vitro* de los metabolitos secundarios volátiles de plantas de la familia Verbenaceae, *Rev. Acad. Colomb. Cienc.*, 2003, 27, 579-598



OBTENCIÓN Y FRACCIONAMIENTO DEL ACEITE ESENCIAL DE *Cymbopogon nardus* (POACEAE) MEDIANTE DESTILACIÓN POR ARRASTRE CON VAPOR

Karen J. Ramírez, Diego C. Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko*

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander (UIS).

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Cymbopogon nardus*, aceite esencial, fraccionamiento, GC/MS.

Introducción: *Cymbopogon nardus* (familia Poaceae) es una planta aromática, originaria de India y Sri Lanka, cultivada en áreas tropicales y subtropicales. Su aceite esencial (AE), es de interés comercial debido a su actividad repelente de insectos y aplicación en tratamientos para el reumatismo, problemas menstruales, fiebre y parásitos intestinales (1).

Métodos: El AE de *Cymbopogon nardus* se obtuvo por destilación por arrastre con vapor en un alambique de acero inoxidable de 0,1 m³. Tres niveles de densidad de carga y flujo de vapor fueron evaluados. La altura del lecho (0,7 m) y el tiempo de destilación (1,5 h) fueron constantes.

Resultados y conclusiones: El condensado fue colectado cada 5 y 10 min durante el tiempo de destilación. El rendimiento se calculó como la masa total de AE obtenido sobre la masa de material vegetal tratado. Los rendimientos obtenidos en el presente trabajo (0,37-0,55%) fueron similares a los reportados por Chong *et al.* (2). El rendimiento más alto se obtuvo con las siguientes condiciones: 240 kg/m³ (densidad de carga) y 200 mL/min (flujo de vapor). El AE se caracterizó por GC/MS y los componentes mayoritarios en las fracciones se cuantificaron por GC/FID. La composición del AE fue similar a la reportada por Rastuti *et al.* (3). Los compuestos mayoritarios fueron citronelal (12-72%), citronelol (9-36%), geraniol (0,2-15%) y elemol (1-17%). Un análisis de componentes principales (PCA) se realizó para los compuestos mayoritarios en las 12 fracciones de AE y se determinó su agrupación en cuatro fracciones diferentes.

Referencias:

1. Kaur, H.; Bhardwaj, U.; Kaur, R. *Cymbopogon nardus* essential oil: a comprehensive review on its chemistry and bioactivity. *J. Essent. Oil. Res* [Online]. **2021**. DOI: 10.1080/10412905.2021.1871976. (accessed may 06, 2021).
2. Chong, D.; Latip, J.; Aishah, S.; Sastrohamidjojo, H. Optimal extraction and evaluation on the oil content of citronella oil extracted from *Cymbopogon nardus*. *Malaysian J. Anal. Sci.* **2015**, 19(1), 71-76.
3. Rastuti, U.; Diastuti, H.; Chasani, M.; Purwati; Hidayatullah, R. Chemical composition and antioxidant activities of citronella essential oil *Cymbopogon nardus* (L.) rendle fractions. *AIP Conf. Proc.* **2020**, 2237(020035), 1-10.



DETERMINACIÓN DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Leonurus japonicus* RECOLECTADA EN SANTANDER, COLOMBIA

Steffhanny Luna, Sheylla Reyes, Cristian Oliveros, Robert González, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko*

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Leonurus japonicus*, aceite esencial, GC/MS.

Introducción: *Leonurus japonicus* Houtt (Lamiaceae) es una planta herbácea con flores, nativa de Asia, conocida en la medicina tradicional china como yimūcǎo. Estudios farmacológicos han demostrado su actividad cardioprotectora, antioxidante, anti cancerígena, antiinflamatoria y, especialmente, en afecciones ginecológicas (1).

Métodos: El material vegetal se recolectó en San Vicente de Chucurí, Santander-Colombia. La identificación taxonómica de la planta se realizó en el Herbario-UIS. Se tomaron las partes aéreas de la planta y se sometieron a hidrodestilación asistida por microondas (MWHM) para obtener aceite esencial (AE).

Resultados y conclusiones: El rendimiento de extracción del AE fue del 0.03 % en peso. La caracterización del AE se realizó mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. Se utilizaron dos columnas con diferentes fases estacionarias polar (DB-WAX) y no polar (DB-5MS). Los componentes se identificaron por comparación de sus espectros de masas (EI, 70 eV) con los reportados en bases de datos espectrales (ADAMS, NIST, Willey), y por comparación de sus índices de retención lineales con los reportados en la literatura (2). Los principales componentes encontrados en el AE de *Leonurus japonicus* fueron *trans*- β -cariofileno (14,2%), óxido de cariofileno (13,4%), α humuleno (11,8%) y α -pineno (10,7%). La composición química encontrada en el AE de plantas de Santander, Colombia, difieren parcialmente, con el obtenido por Xiong y colaboradores (3), donde encontraron como compuestos principales fitona (19%), fitol (13,8%), óxido de cariofileno (11,5%) y el *trans*- β -cariofileno (9,9%).

Referencias:

1. Shang, X.; Pan, H.; Wang, X.; He, H.; Li, M. *Leonurus Japonicus* Houtt.: Ethnopharmacology, phytochemistry and pharmacology of an important traditional 699hinese medicine. *J. Ethnopharmacol.* **2014**, *152* (1), 14–32.
2. Babushok, V.; Linstrom, P.; y Zenkevich, I. Retention indices for frequently reported compounds of plant essential oils. *J. Phys. Chem. Ref. Data.* **2011**, *40*, 1-47. 3. Xiong, L.; Peng, C.; Zhou, Q. M.; Wan, F.; Xie, X. F.; Guo, L.; Li, X. H.; He, C. J.; Dai, O. Chemical composition and antibacterial activity of essential oils from different parts of *Leonurus japonicus* Houtt. *Molecules* **2013**, *18* (1), 963–973.



CARACTERIZACIÓN QUÍMICA POR GC/MS DEL ACEITE ESENCIAL DE *Lippia hirsuta* L. F.

Laisha Burgos-Díaz, Cristian Oliveros, Sheylla Reyes, Camilo Durán, Jairo René Martínez, Elena E. Stashenko¹ y Robert González Mina²

¹Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander. ²Universidad Nacional de Colombia sede Palmira

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Lippia hirsuta*, aceite esencial, GC/MS.

Introducción: *Lippia hirsuta* (Verbenaceae) es un arbusto aromático nativo de Colombia, conocido como “salvio blanco” (1). La infusión de hojas y tallos es utilizada en medicina popular para tratar inflamaciones, crisis nerviosas y dolores generales (2). No se han reportado estudios sobre la composición química de su aceite esencial (AE).

Métodos: El AE de *L. hirsuta* se obtuvo mediante hidrodestilación asistida por radiación de microondas. El material vegetal se recolectó en San Andrés, Santander y se obtuvo mediante el Contrato de acceso a recursos genéticos y productos derivados con fines de bioprospección N° 270 entre el MinAmbiente y la UIS. El análisis del AE se llevó a cabo por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC/MS) usando una columna apolar, DB-5MS, con fase estacionaria de 5%-fenil-poli (dimetilsiloxano), y una columna polar, DB-WAX, con fase estacionaria de poli(etilenglicol). Los compuestos se identificaron por comparación de sus espectros de masas e índices de retención lineales (LRI), en ambas columnas, calculados con base en la serie homóloga de *n* alcanos C₆-C₂₅, con diferentes bases espectrales (NIST, Adams y Wiley) y datos de literatura científica (3). Para la identificación confirmatoria de los compuestos se emplearon sustancias patrón.

Resultados y conclusiones: El AE de *L. hirsuta* tuvo un rendimiento de 0.034% (p/p). Se identificaron tentativamente, 34 compuestos en el AE en cantidad relativa >0.1%. Los hidrocarburos sesquiterpénicos germacreno D (26.3%), (*E*)- β -cariofileno, (24.9%), α -humuleno (10.4%), β -elemeno (5.3%) y β -bourboneno (3.4%) fueron los compuestos mayoritarios del AE. Estos compuestos se emplean en la industria farmacéutica, e.g., como antiinflamatorios no esteroideos, antimicrobianos, antitumorales, y en la industria de sabores y fragancias.

Referencias:

1. Aymard, G. Catálogo de plantas y líquenes de Colombia. Instituto de Ciencias Naturales, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá. **2015**. Consultado en: <http://catalogoplantastocolombia.unal.edu.co>. Fecha: 09 de mayo de 2021.
2. Rueda, M.; y Torres, M. Etnobotánica y usos de las plantas de la comunidad rural de Sogamoso, Boyacá, Colombia. *RIAA*. **2017**, 8, 187-206.
3. Babushok, V.; Linstrom, P.; y Zenkevich, I. Retention indices for frequently reported compounds of plant essential oils. *J. Phys. Chem. Ref. Data*. **2011**, 40, 1-47.



SLQAE-79

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA POR GC/MS DEL ACEITE ESENCIAL DE *Ambrosia cumanensis* Kunth, RECOLECTADA EN SANTANDER, COLOMBIA

Félix C. Muñoz, Sheylla T. Reyes, Karen J. Ramírez, Johanna C. Rosero, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander, Carrera 27, Calle 9, Edificio 45, Bucaramanga, Colombia

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Ambrosia cumanensis*, aceite esencial (AE), destilación, GC/MS.

Introducción: *Ambrosia cumanensis* Kunth es una planta perenne, muy aromática, de hasta 2 m de altura. Pertenece a la familia Asteraceae, es originaria de Centroamérica y se conoce comúnmente como Artemisa. En la medicina tradicional se usa como antiinflamatorio, antiparasitario, purgante y para el tratamiento de afecciones renales (1).

Métodos: El material vegetal se recolectó en Santander, Colombia, bajo el contrato de acceso a recursos genéticos y productos derivados con fines de bioprospección N° 270 del Ministerio de Medio Ambiente y Desarrollo Sostenible. El AE se obtuvo por destilación por arrastre con vapor en un destilador de 0.1 m³. La caracterización del aceite esencial se llevó a cabo mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC/MS).

Se utilizaron dos columnas con diferentes fases estacionarias, polar (DB-WAX) y apolar (DB-5MS). Los componentes se identificaron comparando sus índices de retención lineales (LRI) con los reportados en la literatura (2), los espectros de masas, con los de las bibliotecas espectrales (ADAMS, NIST, Wiley), se usaron también algunas sustancias de referencia certificadas.

Resultados y conclusiones: El AE de *Ambrosia cumanensis* se obtuvo con un rendimiento de 0.01% (p/p). Se identificaron 30 componentes con cantidades relativas mayores de 0.1%. Los compuestos mayoritarios identificados en el AE fueron γ -curcumeno (24.6%), *trans*- β farneseno (7.5%), *trans*- β -cariofileno (6%), β -pineno (5.2%), biciclogermacreno (4.8%) y germacreno D (4.7%). Los compuestos mayoritarios han sido reportados en la literatura por Ciccio y Chaverri en el 2015, y Guillen y colaboradores en 2019 (1,3), pero difieren de los identificados en este estudio.

Referencias:

1. Guillén, C; Palermo, J; Caballero, V; Hernández, L; Meneses, E; Patiño, L. Estudios químicos de *Ambrosia cumanensis* Kunth en Panamá. *Tecnociencia*. **2019**, 21 (2), 53-67.
2. Babushok, V.; Linstrom, P.; y Zenkevich, I. Retention indices for frequently reported compounds of plant essential oils. *J. Phys. Chem. Ref. Data*. **2011**, 40, 1-47. 3. Ciccio, J; Chaverri, C. Essential oil composition of *Ambrosia cumanensis* (Asteraceae) from Costa Rica. *American Journal of Essential Oils and Natural Products*. **2015**, 3 (2), 15- 21.



SLQAE-91

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA POR GC/MS DEL ACEITE ESENCIAL DE *Lantana canescens* CULTIVADA EN COLOMBIA.

Julián Arias, Karen Ramírez, Cristian Oliveros, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Lantana canescens*, aceite esencial, GC/MS, potencial agroindustrial.

Introducción: Las especies del género *Lantana* son prácticamente inmunes al ataque de herbívoros y son conocidas por atraer variedad de abejas, mariposas y pájaros (1). Tienen el potencial para controlar plagas y promover polinización en cultivos. En la medicina alternativa, sus principios activos son usados por sus efectos analgésico, emenagogo, diaforético y antiirreumático (2).

Métodos: *L. canescens* fue cosechada de cultivos experimentales del Complejo Agroindustrial Piloto CENIVAM. La identificación taxonómica se realizó en el Herbario de la Universidad Industrial de Santander. El aceite esencial (AE), se obtuvo de hojas y tallos mediante hidrodestilación asistida por la radiación de microondas. La caracterización del AE se realizó por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas GC/MS en columnas polar DB-WAX y apolar DB-5MS (60 m).

Resultados y conclusiones: El rendimiento de extracción del aceite esencial fue de 0.1% (p/p). Se identificaron 52 compuestos (área GC relativa > 0,1%). De estos *trans* β -cariofileno (15,8%), γ -terpineno (7,7%), limoneno (7,6%), germacreno D (7,4%), *p* cimeno (7,3%) y α -humuleno (5.1%) representaron *ca.* el 51% del área cromatográfica total. *trans*- β -Cariofileno y germacreno D, los sesquiterpenos más abundantes, son considerados como constituyentes comunes de las fragancias florales y amaderadas que se encuentran en muchos géneros de plantas (3). Estos dos sesquiterpenos, podrían explicar por sí solos varias propiedades atribuidas a la *L. canescens*; el primero ha demostrado ejercer efectos significativos antiinflamatorios en ratones, y el segundo actúa como feromona de insectos polinizadores. Estos resultados alientan a profundizar el estudio de la planta con investigaciones conducentes a desarrollar aplicaciones de aprovechamiento agroindustrial.

Referencias:

1. Parrish, S. B.; Qian, R.; Deng, Z. Genome size and karyotype studies in five species of *Lantana* (Verbenaceae). *Hort Science* **2021**, *56* (3), 352–356.
2. Peralta-Bohórquez, A. F.; Quijano-Célis, C.; Gaviria, M.; Vanegas-López, C.; Pino, J. A. Essential Oil from Leaves of *Lantana canescens* and *L. Lopez-Palacii* Grown in Colombia. *Nat. Prod. Commun.* **2011**, *6* (2), 247–249.
3. Pino, J. A.; Quijano-Celis, C. E.; Peralta-Bohórquez, A. F. Qualitative and quantitative analyses of flower scent in *Lantana canescens* Kunth. *JEOBP.* **2011**, *14* (1), 30–37.



SLQAE-92

CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL Y DEL EXTRACTO HIDROETANÓLICO DE *Salvia aratocensis* (Fam. Lamiaceae)

Lady J. Sierra, Anderson Paipa-Pérez, Yuri Córdoba-Campo, Jairo R. Martínez-Morales, Elena E. Stashenko.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Salvia aratocensis*, GC/MS, LC/MS.

Introducción: *Salvia aratocensis* (familia Lamiaceae), crece en la Cordillera Oriental en los departamentos de Santander y Boyacá, Colombia (1). El propósito de este trabajo fue determinar la composición química de los metabolitos secundarios presentes en el aceite esencial (AE) y el extracto hidroetanólico de *S. aratocensis*, determinar su actividad antioxidante, usando el ensayo ORAC (*Oxygen Radical Absorbance Capacity*).

Métodos: El material vegetal se recolectó en parcelas experimentales del centro de investigación CENIVAM (Bucaramanga, Colombia). El aceite esencial se obtuvo por hidrodestilación asistida por la radiación de microondas (MWH) y se analizó por GC/MS. El extracto hidroetanólico se analizó por LC/MS. La actividad antioxidante se evaluó por el método ORAC.

Resultados y conclusiones: El rendimiento del AE de *S. aratocensis* fue de 0.23%. Los siguientes fueron los compuestos mayoritarios identificados por GC/MS en el AE: (*E*)-calameneno (8%), α -cadineno (8%), germacreno D (33%), α -humuleno (10%) y (*E*)- β -cariofileno (20%). El rendimiento del extracto hidroetanólico de *S. aratocensis* fue de 3.8%; en él, se identificaron los compuestos fenólicos, salvigenina, genisteína, cirsimarina y kaempferol. La actividad antioxidante del extracto hidroetanólico de *S. aratocensis* (890 ± 38 $\mu\text{mol Trolox}^{\text{®}}$ /g muestra) fue mayor que la reportada para BHT (460 ± 9 $\mu\text{mol Trolox}^{\text{®}}$ /g muestra) y α -tocoferol (550 ± 13 $\mu\text{mol Trolox}^{\text{®}}$ /g muestra). *S. aratocensis* es una especie vegetal promisorio debido a que en la composición química de su extracto hidroetanólico se encuentran compuestos fenólicos, salvigenina, genisteína, cirsimarina y kaempferol, responsables por su actividad antioxidante mucho más alta que la de antioxidantes comerciales, BHT y α -tocoferol.

Referencias:

1. Fernández, A. Estudios en *Labiatae* de Colombia IV. Novedades en *Salvia* y sinopsis de las secciones *Angulatae* y *Purpureae* **2003**, 25, 235-281.



COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LOS ACEITES ESENCIALES DE PLANTAS DE *Wedelia calycina*, QUE CRECEN EN SANTANDER, COLOMBIA

Silvia M. Porras¹, Cristian Oliveros¹, Sheylla Reyes¹, Camilo Durán¹, Jairo R. Martínez¹, Elena E. Stashenko^{1,*}, Robert T. Gonzáles²

¹Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander. ²Universidad Nacional de Colombia, sede Palmira

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Wedelia calycina*, aceite esencial, GC/MS, PCA.

Introducción: Las plantas del género *Wedelia* spp. son arbustos florales pertenecientes a la familia Asteraceae, la cual tiene más de 143 especies distribuidas en Colombia, México, Brasil y la Guayana Francesa (1). La medicina popular suele emplear las especies de este género para controlar problemas cutáneos e infecciones bacterianas (2).

Metodología: Se utilizaron hojas y tallos de tres accesiones de *Wedelia calycina* recolectadas en Zapatoca y Bucaramanga, Santander (Contrato de acceso a recursos genéticos y productos derivados-bioprospección N° 270: Ministerio del Medio Ambiente y Desarrollo Sostenible). Los aceites esenciales (AE) se obtuvieron por hidrodestilación asistida por la radiación de microondas (MWH) en un aparato tipo Clevenger.

Resultados y conclusiones: La caracterización de los AE se llevó a cabo mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. Se emplearon dos columnas, con diferentes fases estacionarias (polar y no polar). Los compuestos fueron identificados tentativamente, al comparar sus espectros de masas (EI, 70 eV), con aquellos reportados en bases de datos espectrales (ADAMS, NIST, Wiley), y sus índices de retención lineales con los reportados en la literatura (3). Los compuestos mayoritarios encontrados fueron α -pineno (4-28%), sabineno (3-5%) *trans*- β -cariofileno (3-14%), germacreno D (14%), carotol (13%), óxido de cariofileno (6-7%) y espatulenol (6-7%). El análisis de componentes principales (PCA) realizado a los componentes de los AE, mostró la existencia de dos tipos de *W. calycina*, lo cual puede deberse a las diferencias en las condiciones ambientales en donde crecieron las plantas, o a sus estados fenológicos diferentes.

Referencias:

1. Das, M.; Rebecca, L.; Sharmila, S.; Sharmila, D.; Kowsalya, E. Phytochemical analysis of *Wedelia* sp. *Drug Invent. Today*. **2019**, 11, 5, 1-2.
2. Ahmed, B.; Idris, S.; Taha, R.; Mustafa, M.; Marikar, F. Phytochemical, pharmacological and tissue culture applications of *Wedelia* spp. A review. *J. Agric. Sci. Technol.* **2019**, 11, 2, 123-132.
3. Babushok, V. I.; Linstrom, P. J.; Zenkevich, I. G. Retention indices for frequently reported compounds of plant essential oils. *J. Phys. Chem. Ref. Data*. **2011**, 40, 4, 043101-0431047.



CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Ambrosia peruviana*, AISLADO POR HIDRODESTILACIÓN ASISTIDA POR RADIACIÓN MICROONDAS

Angie K. Romero, Lady J. Sierra, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras claves: *Ambrosia peruviana*, aceite esencial, GC/MS.

Introducción: *Ambrosia peruviana* (familia Asteraceae), conocida como altamisa, es una planta aromática originaria del Perú y cultivada en varios países de América Latina. Se utiliza tradicionalmente en medicina popular como agente antibacteriano, antiparasitario, emoliente, analgésico, insecticida y para el tratamiento de infecciones y cólicos menstruales (1,2).

Métodos: El material vegetal se recolectó de parcelas experimentales del centro de investigación CENIVAM. El aceite esencial (AE) se obtuvo por hidrodestilación asistida por la radiación de microondas. El análisis del AE se realizó por GC/MS, en columnas DB-5MS [5%-fenil-poli(metilsiloxano), 60 m x 0.25 mm (d.i.) x 0.25 (d_i)] y DB-WAX [poli(etilenglicol), 60 m x 0.25 mm (d.i.) x 0.25 (d_i)].

Resultados y conclusiones: El rendimiento de extracción del AE fue bajo (0.08 ± 0.04%). En el AE de *A. peruviana* se detectaron como compuestos mayoritarios el *ar*-curcumeno (24,6%), β-bisaboleno (17,7%), γ-curcumeno (13,8%), fitol (5,2%), espatulenol (4,8%), germacreno D (3,4%) y acetato de nerilo (3,0%). Esta composición química difiere de la reportada por Yáñez *et al.* (3) para la especie cultivada en Venezuela: γ-curcumeno (23,9%), *ar*-curcumeno (14,0%), acetato de bornilo (10,3%) y alcanfor (5,0%); los autores consideraron estas sustancias como posibles responsables de la actividad antibacteriana del AE de *A. peruviana*. Las diferencias en la composición química del AE pueden deberse a las condiciones agronómicas del cultivo, tales como altitud, nutrientes, presencia de microorganismos en el suelo y clima de la región.

Referencias:

1. Gupta, M. Plantas medicinales Iberoamericanas. *Programa Iberoamericano de Ciencia y Tecnología para el desarrollo. Subprograma de Química Fina Farmacéutica*. 1ª Edición, Santafé de Bogotá, Colombia. **1995**, 616.
2. Suarez, J. Medicina tradicional en los corregimientos de Medellín, Historias de vidas y plantas. Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia. **2012**, 167.
3. Yáñez, C.; Rios, N.; Mora, F.; Rojas, L.; Díaz, T.; Velasco, J.; Rios, N.; Melendez, P. Composición química y actividad antibacteriana del aceite esencial de *Ambrosia peruviana* Willd. de los Llanos Venezolanos. *Rev. Peru Biol.* **2011**, 18, 149-151.



ANÁLISIS POR GC/MS DE ACEITES ESENCIALES DE *Piper eriopodon* Y *Piper dilatatifolium*, COLECTADAS EN SANTANDER, COLOMBIA

Nelson G. Martínez-Avellaneda, Angie K. Romero, Lady J. Sierra, Jairo R. Martínez Morales, Elena E. Stashenko.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Piper* spp., aceite esencial, GC/MS.

Introducción: *Piper eriopodon* y *Piper dilatatifolium* son especies vegetales colombianas de la familia Piperaceae (1). El aceite esencial (AE) de las plantas del género *Piper* spp. ha mostrado actividad citotóxica, en células cancerígenas de pulmón, próstata, y mama, y actividad antiproliferativa en células de cáncer de cérvix (2,3).

Métodos: El material vegetal (hojas, tallos) fue recolectado en Zapatoca, Santander, Colombia. El aceite esencial (AE) se obtuvo en un equipo de hidrodestilación asistida por la radiación de microondas (MWHD) tipo Clevenger, con un depósito de destilación Dean Stark. El análisis de los AE se realizó por GC/MS, se usaron columnas apolar DB-5MS y polar DB-WAX, ambas de 60 m, modo de inyección *split* 1:30, MSD (EI, 70 eV). La identificación tentativa de los compuestos se realizó con base en sus índices de retención lineales y por comparación de espectros de masas con los de las bases de datos espectrales (Adams, NIST, Wiley).

Resultados y conclusiones: En la composición química del AE de *P. eriopodon* se encontraron principalmente α -pineno (28.3%), β -pineno (22.1%), prelunularin (10.6%) y (*E*)- β -ocimeno (5.8%). El rendimiento del AE de *P. eriopodon* (0.09%, p/p) fue menor que el del AE de *P. dilatatifolium* (0.51%, p/p). Los compuestos principales en el AE de *P. dilatatifolium* fueron: α -felandreno (25.2%), 1,8-cineol (10.1%), β -pineno (8.4%) y α -pineno (7.7%). Los monoterpenos fueron los compuestos más abundantes en los AE de *P. eriopodon* (α -pineno y β -pineno) y *P. dilatatifolium* (α -felandreno).

Referencias:

1. Bernal, R.; S.R. Gradstein.; M. Celis. Catálogo de plantas y líquenes de Colombia, Instituto de Ciencias Naturales, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá. **2019**, <http://catalogoplantasdecolombia.unal.edu.co>
2. Muñoz Cendales, D. R. Estudio fitoquímico de la especie vegetal *Piper eriopodon* y determinación de su actividad citotóxica. Tesis Doctoral. Universidad Nacional de Colombia, **2020**.
3. Velandia, S. A., Flechas, M. C.; Stashenko, E.; Ocaziones, R. E. Propuesta para seleccionar aceites esenciales de plantas de Colombia para investigación con base en su citotoxicidad. *Vitae*. **2016**, 23, 18-29.



COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Hyptis colombiana* (LAMIACEAE) POR GC/MS

Sheila B. Beltrán, Angie K. Romero, Lady J. Sierra, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Hyptis colombiana*, aceite esencial, GC/MS.

Introducción: *Hyptis colombiana* (familia Lamiaceae) es un arbusto originario de los Andes Colombianos y Venezolanos (1,2). Las plantas del género *Hyptis* se utilizan tradicionalmente en medicina popular para el tratamiento de trastornos digestivos, trastornos menstruales, enfermedades respiratorias, entre otros (3).

Métodos: El material vegetal fue recolectado de parcelas experimentales en el centro de investigación CENIVAM (Bucaramanga, Colombia). El aceite esencial (AE) se obtuvo en un equipo de hidrodestilación asistida por microondas (MWH) tipo Clevenger. El análisis el AE se realizó por GC/MS en columnas apolar (DB-5MS) y polar (DB-WAX), ambas de 60 m x 0.25 mm (d.i.) x 0.25 µm (d_f).

Resultados y conclusiones: El rendimiento de aceite esencial fue de 0.09% (p/p). La identificación del AE se basó en la comparación de los espectros de masas de sus componentes con los de las bases de datos (ADAMS, NIST y Wiley). Los principales compuestos identificados fueron (*E*)-β-cariofileno (33.8%), germacreno D (22.3%) y óxido de cariofileno (13.8%). Esta composición es similar a la del AE de *H. colombiana*

obtenido en Venezuela: (*E*)-β-cariofileno (29.5%), germacreno D (22.2%), germacreno B (5.6%) y óxido de cariofileno (3.5%) (2). Las cantidades de cada compuesto en los AE de plantas de Colombia y Venezuela difieren posiblemente por las condiciones climáticas y del cultivo. Flores *et al.* (2) indicaron que estos compuestos pueden tener actividad antimicrobiana, según los ensayos previos que se realizaron.

Referencias:

1. Ayers, T.; Boufford, D. Index to the vascular plant types collected by H. H. Smith near Santa Marta, Colombia. *Brittonia*. **1988**, 40(4), 400 -432.
2. Flores, M.; Rojas, L.; Aparicio, R.; Lucena, M. E.; Usubillaga, A. Essential oil composition and antibacterial activity of *Hyptis colombiana* from the Venezuelan Andes. *Nat. Prod. Commun.* **2015**, 10(10), 1751-1752.
3. McNeil, M.; Petrea, F.; Porter, R. Essential oils from the *Hyptis* genus - a review (1909- 2009). *Nat. Prod. Commun.* **2011**, 6(11), 1775 -1796.



ESTUDIO DE LA COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LOS ACEITE ESENCIALES DE ESPECIES DE *Hyptis* spp., RECOLECTADAS EN SANTANDER-COLOMBIA.

Cristian A. Oliveros, Diego C. Durán, Robert T. González, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Hyptis*, aceite esencial, GC/MS.

Introducción: El género *Hyptis* (Lamiaceae) contiene alrededor de 400 especies, distribuidas en América, África occidental, Oceanía (islas Fiji) y el sur de Asia (India) (1). Las especies de este género tienen alta importancia económica porque son una fuente de aceites esenciales con actividad biológica y, también, son usadas para decorar jardines y en aplicaciones culinarias (2).

Métodos: Cinco especies del género *Hyptis* (*H. dilatata*, *Hyptis* sp., *Hyptis* sp. aff. *H. colombiana*, *H. suaveolens* e *H. pectinata*) se recolectaron en el departamento de Santander, en los municipios de Bucaramanga, San Vicente de Chucurí, Betulia, Zapatoca, Guaca y Málaga. Los aceites esenciales (AE) se obtuvieron por hidrodestilación asistida por la radiación de microondas (MWH) y por arrastre con vapor (AV), de todas las partes de la planta (hojas, tallos, flores y frutos). La composición química de los AE se determinó mediante GC/MS, usando como criterios de identificación los índices de retención lineales y la comparación de los espectros de masas obtenidos experimentalmente con los reportados en las bases de datos espectrales (Adams y NIST) y en la literatura.

Resultados y conclusiones: Los AE obtenidos fueron ricos en hidrocarburos sesquiterpénicos y sesquiterpenos oxigenados, destacándose los compuestos *trans*- β cariofileno, germacreno D y óxido de cariofileno. La composición de los AE de *H. dilatata* de plantas recolectadas en Bucaramanga y en Betulia fueron diferentes y muestran la posible existencia de quimiotipos *trans*- β -cariofileno (20,0% y 7,9%, respectivamente) y germacreno D (0,2% y 16,2%, respectivamente). Para *Hyptis* sp. aff. *H. colombiana*, los AE obtenidos de plantas recolectadas en Zapatoca y en Guaca tuvieron componentes mayoritarios similares, *viz*, *trans*- β -cariofileno (20,3% y 17,2%), germacreno D (20,5% y 13,8%) y óxido decariofileno (11,7% y 5,8%). El compuesto mayoritario en *H. suaveolens* fue 1,8-cineol (18,4%) y en *H. pectinata*, *trans*- β -cariofileno (32,5%). El presente estudio mostró que el departamento de Santander-Colombia cuenta con varias especies de *Hyptis*, que difieren en la composición química de sus aceites esenciales.

Referencias:

1. Tchoumboungang, F.; Amvam, PHZ.; Fekam, FB.; Nyegue, MA.; Bessièrè, JM.; Menut, C. Aromatic plants of tropical Central Africa. XLVII. Comparative study of the essential oils of four *Hyptis* species from Cameroon: *H. lanceolata* Poit., *H. pectinata* (L.) Poit., *H. spicigera* Lam. And *H. suaveolens* Poit. *Flavour and Fragrance Journal*. **2005**, 20, 340-343.
2. Santos, PO.; Costa, MJC.; Alves, JAB.; Nascimento, PFC.; Melo, DLFM.; Barbosa Jr, AM.; Trindade, RC.; Blank, MFA.; Arrigori-Blank, MF.; Alves, PB.; Nascimento, MPF. Chemical composition and antimicrobial activity of the essential oil of *Hyptis pectinata* (L.) Poit. *Química Nova*. **2008**, 31 (7), 1648-1652.



COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LOS ACEITES ESENCIALES DE *Calea peruviana* (ASTERACEAE) y *Lantana aff. colombiana* López-Pal. (VERBENACEAE).

Johanna C. Rosero¹, Cristian Oliveros¹, Karen Ramírez¹, Camilo Durán¹, Robert T. Gonzáles², Jairo R. Martínez¹, Elena E. Stashenko^{1,*}

¹ Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Investigación en Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander, Carrera 27, Calle 9, Edificio 45, Bucaramanga, Colombia. ² Universidad Nacional de Colombia, Sede Palmira.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Calea peruviana*, *Lantana aff. colombiana*, aceite esencial, GC/MS. **Introducción:**

El género *Calea* se compone de alrededor 262 especies distribuidas en diferentes regiones tropicales de América. Se ha reportado la actividad anti-inflamatoria de algunas de estas especies (1). La especie *Lantana aff. colombiana*, nativa de Colombia, ha sido empleada en ensayos de citotoxicidad para determinar su posible actividad *in vitro* frente a diferentes líneas celulares (2,3).

Métodos: El material vegetal utilizado se obtuvo por medio del contrato de acceso a recursos genéticos y productos derivados con fines de bioprospección N° 270 del Ministerio del Medio Ambiente y Desarrollo Sostenible. Los aceites esenciales (AE) se destilaron por arrastre con vapor (AV) y por destilación asistida por microondas (MWHD). Los AE se caracterizaron mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC/MS). La separación se llevó a cabo en columnas polar recubierta con poli(etilenglicol) (DB-WAX) y apolar 5%-Ph-PDMS (DB5-MS). La identificación tentativa de los compuestos se realizó por medio de los índices de retención lineales (IRL) y por comparación de sus espectros de masas comparados con los reportados en bases de datos espectrales como Wiley, NIST y Adams.

Resultados y conclusiones: Los rendimientos de extracción de los aceites esenciales fueron 0.01% (p/p) para ambas especies. Se detectaron 27 compuestos en la especie *Calea peruviana* y 52 compuestos en *Lantana aff. colombiana* en cantidades relativas por encima del 0,1 %. En el AE de *Calea peruviana* se identificaron como componentes mayoritarios germacreno D (13%), *trans*- β -cariofileno (8,7%), γ -curcumeno (6%) y β -selineno (4,1%). En la especie *Lantana aff. colombiana* se identificaron mayoritariamente limoneno (18%), β -elemeno (10%), sabineno (5,6%) y *trans*- β -cariofileno (8%).

Referencias:

1. Gómez, M. Determinación de actividad anti-inflamatoria de sesquiterpenlactonas aisladas de *Calea peruviana* y *Calea prunifolia*. Tesis de Maestría en Farmacología, Universidad Nacional de Colombia. Bogotá. 2010.
2. Bernal, R.; Gradstein, S.; Celis, M. (Eds.). Catálogo de plantas y líquenes de Colombia. Instituto de Ciencias Naturales, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá. 2015.
3. Velandia C.; Flechas M.; Stashenko E.; Ocazonez R. Propuesta para seleccionar aceites esenciales de plantas de Colombia para investigación con base en su citotoxicidad. *Revista de la Facultad de Ciencias Farmacéuticas y Alimentarias*. 2016, 23(1), 18-29.



GCxGC and LC-MS study of secondary metabolites isolated from *Cannabis* sp.

AF González, CA Oliveros, JR Martínez, EE Stashenko

Research Center for Biomolecules-CIBIMOL, Chromatography and Mass Spectrometry Research Center CROM-MASS, Research Center of Excellence CENIVAM, Industrial University of Santander, Carrera 27, Calle 9, Edificio 45, Bucaramanga, Colombia.

elena@tucan.uis.edu.co

Keywords: Cannabinoids, Cannabis, essential oil, solid-liquid extraction, GC/MS, LC/MS.

Introduction: The *Cannabis* plant and marijuana products, hashish and its oil, have been used as medicinal agents. *Cannabis* is very complex in its chemistry due to the vast number of its constituents and their possible interaction with one another. The best known are THC, CBD and CBN, and their precursor carboxylic acids [1-4].

Methods: The SPME fiber was exposed to the compounds emitted by inflorescences. *Cannabis* essential oil in inflorescences was obtained by hydrodistillation assisted by microwave radiation, the analyses were performed on a gas chromatograph. The solid-liquid extracts of the hydrodistillation plant residue were performed on an UHPLC-ESI-Orbitrap-HRMS.

Results and conclusions: 44 Different chemical substances were isolated by HS-SPME and essential oil. Non-terpenic oxygenated compounds and sesquiterpenes were the predominant class (inflorescences). The major components of the inflorescences volatile fractions of cannabis were terpinolene (34%), mircene (12%), limonene (10%), and *trans*- β -caryophyllene (9%). THC, CDB and CBN were found in the post distillation residue of cannabis inflorescences, and their precursor carboxylic acids (THCA, CBDA, CBNA) in traces.

References:

1. MAHMOUD, A.; ELSOHLYA, B and DESMOND, S. Life Sciences. **2005**, 78, 539–548.
2. WHITING, P.; WOLFF, R.; DESHPANDE, S.; DI NISIO M.; DUFFY, S.; HERNANDEZ, A.; KEURENTJES, J.; LANG, S.; MISSO, K.; RYDER, S.; SCHMIDLKOFER, S.; WESTWOOD, M. and KLEIJNEN, J. Journal of the American Medical Association. **2015**, 313, 2456-2473.
3. PRAGST, F. Analytical and Bioanalytical Chemistry. **2007**, 388, 1393-1414. [4] RAHARJO, T. and VERPOORTE, R. Phytochemical Analysis. **2004**, 15, 79-94.



Biocompatibility In Vivo Studies of Chitosan-Rue Essential Oil Biofilms

Carlos David Grande-Tovar¹, Carlos Humberto Valencia², José Herminul Mina Hernandez³

¹ Grupo de investigación de Fotoquímica y Fotobiología, Facultad de Ciencias, Universidad del Atlántico, Carrera 30 Número 8-49, Puerto Colombia 081008, Colombia. ² Escuela de Odontología, Grupo biomateriales dentales, Universidad del Valle, Calle 4B No. 36-00, 76001 Cali, Colombia. ³ Escuela de Ingeniería de Materiales, Facultad de Ingeniería, Universidad del Valle, Calle 13 No. 100-00, Santiago de Cali 760032, Colombia.

carlosgrande@mail.uniatlantico.edu.co

Palabras clave: biocompatibilidad; chitosan films; Ruta graveolens essential oil; scaffolds.

Introduction: Biocomposite materials for designing scaffolds with the capacity to promote cell adhesion, proliferation, and function differentiation are getting an utmost importance worldwide [1]. CS films were incorporated with Ruta graveolens essential oil (RGEO), obtaining porous biofilms as evidenced by the physical-chemical characterization and subdermal implantations at 30 days in Wistar rats.

Methods: CS+RGEO film-forming solutions were prepared and characterized elsewhere [2]. Biofilms were characterized physically (DRX, SEM, color, thickness, water vapor permeability), mechanically (tensile strength and Young Modulus), thermally (TGA and DSC), chemically (FTIR) characterized [3]. The nanocomposite scaffold's biocompatibility was evaluated after 30 days of subdermally implanted Wistar rats.

Results and conclusions: Preparation using the drop-casting method of biofilm composites of CS and RGEO was successfully demonstrated by chemical, mechanical, and thermal characterization. CS+RGEO film-forming solutions did not present cytotoxic reactions in erythrocytes. The biofilms obtained were subdermally implanted in Wistar rats for 30 days, exhibiting healthy resorption of the materials, especially those with lower RGEO content. However, RGEO in higher concentrations (> 0.5%) produced abundant inflammatory infiltrate, higher porosity, cracking of the films, higher immune response, and lower thermal and mechanical properties. These results are impressive, demonstrating the application of the CS+RGEO for cell adhesion and proliferation, preferable at low RGEO concentrations (< 1.0%).

References

1. Stratton, S.; Shelke, N.B.; Hoshino, K.; Rudraiah, S.; Kumbar, S.G. Bioactive polymeric scaffolds for tissue engineering. *Bioact. Mater.* **2016**, *1*, 93–108.
2. Grande Tovar, C.D.; Delgado-Ospina, J.; Navia Porras, D.P.; Peralta-Ruiz, Y.; Cordero, A.P.; Castro, J.I.; Valencia, C.; Noé, M.; Mina, J.H.; Chaves López, C. Colletotrichum Gloesporioides Inhibition In Situ by Chitosan-Ruta graveolens Essential Oil Coatings: Effect on Microbiological, Physicochemical, and Organoleptic Properties of Guava (Psidium guajava L.) during Room Temperature Storage. *Biomolecules* **2019**, *9*, 399.
3. Grande Tovar, D.C.; et al. Synthesis, Characterization, and Histological Evaluation of Chitosan-Ruta Graveolens Essential Oil Films. *Mol.* **2020**, *25*.



ESTUDIO DEL ACEITE ESENCIAL OBTENIDO DE *Elaphandra quinquenervis* RECOLECTADA EN SANTANDER, COLOMBIA.

Josafat Tarazona, Cristian Oliveros, Juan Camilo Henríquez, Camilo Durán, Jairo René Martínez, Robert T. González M, Elena E. Stashenko.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Elaphandra quinquenervis*, aceite esencial, GC/MS.

Introducción: *Elaphandra quinquenervis*, conocida comúnmente como navidad, es una hierba de la familia Asteraceae. Es nativa de Colombia, cultivada en la región de los Andes, en los departamentos de Antioquia, Caldas, Cauca, Chocó, Cundinamarca, Huila, Nariño, Quindío, Risaralda, Santander, Tolima y Valle del Cauca, en alturas de 1150-3000 m sobre el nivel del mar (1).

Métodos: El aceite esencial (AE) de *E. quinquenervis* fue obtenido mediante la técnica de hidrodestilación asistida por microondas (MWH) y analizado mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas GC/MS. La destilación se realizó usando un equipo tipo Clevenger con trampa *Dean-Stark*, en 4 ciclos de 15 min. El análisis químico se realizó por GC/MS empleando dos columnas: polar (DB-WAX) y apolar (DB-5MS). Se identificaron tentativamente 32 compuestos (área relativa de GC > 0,1%), por comparación de sus espectros de masas (EI, 70eV) con los de bases de datos espectrales (Adams, Wiley, y NIST) y por comparación de sus índices de retención lineales con los reportados en la literatura (2).

Resultados y conclusiones: El rendimiento de destilación del AE fue de 0.2% (p/p). Se identificaron 32 componentes en cantidades relativas mayores de 0.1%. Los compuestos mayoritarios identificados fueron germacreno D (21,2%), β -pineno (21,1%), sabineno (9,8%), α -pineno (6,9%), *trans*- β -cariofileno (5,2%), limoneno (4,6%), β -cubeneno (3,6%), α -humuleno (2,6%), valenceno (2,6%) y δ -amorfeno (2,6%). Este trabajo constituye el primer reporte de la composición química del AE de la especie *E. quinquenervis*.

Referencias:

1. Ávila, F.; Funk, V.; Díaz, M.; Díaz, S.; Vargas, O. *Elaphandra quinquenervis* (S.F. Blake) H. Rob. Catálogo de plantas y líquenes de Colombia. Instituto de Ciencias Naturales, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá. <http://catalogoplantasdecolombia.unal.edu.co>. 2015.
2. Babushok, V.; Linstrom, P.; y Zenkevich, I. Retention indices for frequently reported compounds of plant essential oils. *J. Phys. Chem. Ref. Data*. **2011**, 40, 1-47.



Caracterización química y actividad antioxidante de los aceites esenciales de *Tagetes filifolia* y su híbrido natural

Juan C. Henríquez¹, Rober T. Gonzalez², Jairo R. Martínez¹, Elena E. Stashenko^{1*}

¹Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

²Universidad Nacional de Colombia, Sede Palmira.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: aceite esencial, *Tagetes filifolia*, actividad antioxidante.

Introducción: *Tagetes filifolia* (Asteraceae) es una especie vegetal tipo arbusto, que se encuentra distribuida desde México hasta Bolivia, entre los 3300 y 3800 m.s.n.m. En Colombia se emplea como tónico, diaforético, emenagogo y antihelmíntico (1).

Métodos: Se obtuvieron los aceites esenciales (AE) a partir las partes aéreas de plantas, por medio de hidrodestilación asistida por la radiación de microondas, con un horno de 1100 W, en un aparato Clevenger conectado a una trampa Dean-Stark (2). La composición química de los AE fue establecida usando las técnicas GC/MS y GC/FID, espectros de masas, índices de retención lineales y algunos compuestos-patrón. La actividad antioxidante de los aceites esenciales se evaluó por el ensayo de decoloración del β caroteno.

Resultados y discusión: Los AE de *T. filifolia* y *T. caracasana X T. filifolia*, presentaron rendimientos de destilación de 0,1 y 0,2% (p/p), respectivamente. En el AE de *T. filifolia* los componentes mayoritarios fueron el *trans*-anetol (74,3%), estragol (19%) y biciclogermacreno (1,4%). El componente mayoritario en el AE de *T. caracasana X T. filifolia* fue piperitonona (21,4%), seguido de terpinoleno (19%) y piperitona (14,9%). El AE de *T. filifolia* inhibió la oxidación del β -caroteno en un 4,6% mientras que, *T. caracasana X T. filifolia* inhibió la oxidación en un 19,6%.

Referencias

1. De Feo, V.; Della, G.; Urrunaga, E.; Urrunaga, R.; Senatore, F. Composition of the essential oil of *Tagetes filifolia* Lag. *Flavour Fragr. J.*, **1998**, 13(3), 145–147.
2. Stashenko, E.; Jaramillo, B.; Martínez, J. Comparison of different extraction methods for the analysis of volatile secondary metabolites of *Lippia alba* (Mill.) NE Brown, grown in Colombia, and evaluation of its in vitro antioxidant activity. *J. Chromatogr. A*, **2004**, 1025(1), 93-103.



CARACTERIZACIÓN QUÍMICA POR GC/MS DE ACEITES ESENCIALES DE *Heterosperma pinnatum* Y *Hypericum* sp., RECOLECTADAS EN SANTANDER, COLOMBIA

Sebastian Ortiz B., Juan C. Henríquez, Sheylla T. Reyes, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Heterosperma pinnatum*, *Hypericum* sp, aceite esencial, GC/MS.

Introducción: *Heterosperma pinnatum* es una hierba de la familia Asteraceae, nativa del continente americano y distribuida entre el norte de México y Venezuela. *Hypericum* sp. es un arbusto de la familia Hypericaceae, nativa del continente americano y distribuida entre Costa Rica y Colombia (1,2).

Métodos: El material vegetal fue obtenido a través del Ministerio del Medio Ambiente y Desarrollo Sostenible: Contrato de acceso a recursos genéticos y productos derivados con fines de bioprospección N° 270. Los aceites esenciales (AE) se obtuvieron por hidrodestilación asistida por la radiación microondas (MWHD) y caracterizados por GC/MS, usando columnas capilares polar y no polar.

Resultados y conclusiones: La identificación tentativa de los componentes presentes en los AE se basó en la coincidencia de sus espectros de masas (EI, 70 eV, coincidencia > 90%), utilizando bases de datos espectrales (ADAMS, NIST, Wiley), y en los índices de retención lineales, obtenidos en columnas DB-WAX y DB-5MS y reportados en la literatura científica. Los componentes mayoritarios fueron limoneno (68.8%), α

felandreno (4.4%) y sabineno (3.9%), para el AE de *Heterosperma pinnatum*; α -pineno (28.1%), triciclono (16.4%), limoneno (10.4%), β -pineno (9.5%) y *trans*- β -cariofileno (6.2%) para el AE de *Hypericum* sp. Los rendimientos de extracción fueron del 0.1% y 0.3% (p/p) para *Heterosperma pinnatum* e *Hypericum* sp, respectivamente. Otros especímenes del género *Hypericum* han revelado propiedades farmacológicamente interesantes como antidepresivos, antioxidantes y antimicrobianos (3), lo que justifica el estudio de metabolitos secundarios de estas plantas.

Referencias:

1. Lizarazu, M.; Freire, S. Taxonomic Revision of *Heterosperma* (Asteraceae: Coreopsidae). *Annals* **2019**, 104 (4), 633–663.
2. Bernal, R.; Gradstein, S.; Celis, M. *Catálogo de plantas y líquenes de Colombia*; Universidad Nacional de Colombia: Bogotá, **2016**; Vol. I.
3. Guedes, A.; Franklin, G.; Fernandes, M. *Hypericum* sp.: Essential Oil Composition and Biological Activities. *Phytochem Rev* **2012**, 11 (1), 127–152.



EXTRACCIÓN Y COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL Y DEL EXTRACTO DE *Satureja viminea* (LAMIACEAE).

Sheila B. Beltrán, Diana L. Manrique, Lady J. Sierra, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Satureja viminea*, aceite esencial, GC/MS, extracto.

Introducción: *Satureja viminea* (familia Lamiaceae) es una planta aromática distribuida en Jamaica, Cuba, Costa Rica y Colombia (1). *S. viminea* se utiliza en medicina popular para aliviar los dolores abdominales y se considera que tiene propiedades astringentes y antibacterianas (2).

Métodos: El material vegetal se recolectó en parcelas experimentales de CENIVAM (Bucaramanga, Colombia). El aceite esencial (AE) se obtuvo por hidrodestilación asistida por la radiación de microondas (MWHM) y se analizó por GC/MS. El extracto hidroetanólico se analizó por HPLC/DAD y se determinó su actividad antioxidante por el método ORAC.

Resultados y conclusiones: El rendimiento del AE fue de 0.55 % p/p. Los compuestos principales identificados por GC/MS fueron *p*-menta-3-en-8-ol (21-58%), pulegona (10- 16%), ϵ - β -cariofileno (6,5-11,7%) y (*Z*)-pulegol (5,5-29,7%). La composición química del AE de *S. viminea* reportada por Vila *et al.* (3) y Stashenko *et al.* (4), presentó similitud en los componentes mayoritarios: *p*-ment-3-en-8-ol (40.0% y 51.66%), pulegona (35.3% y 17.83%) y ϵ - β -cariofileno (3.6% y 4.68%), respectivamente (3,4). En el extracto se identificaron por HPLC/DAD ácido rosmarínico, kaempferol y naringenina. El extracto de *S. viminea* tuvo un valor de Trolox[®] de 6400 \pm 240 μ mol, superior a los de BHT (470 \pm 13) y α -tocoferol (550 \pm 13) según el ensayo ORAC.

Referencias:

1. Missouri Botanical Garden. <https://www.tropicos.org/name/> (Consultado: 08 de abril de 2021).
2. Suárez, A.; Ehandi, M.A.; Ulate, G.; Ciccio, J. Pharmacological activity of the essential oil of *Satureja viminea* (Lamiaceae). *Rev. Biol. Trop.* **2003**, 51(1), 247-252.
3. Vila, R.; Iglesias, J.; Salvador, C. Essential oil of *Satureja viminea* L. from Costa Rica. *J. Essent. Oil Res.* **2000**, 12, 279-282.
4. Stashenko, E.; Gutiérrez, D.; Martínez, J.; Manrique, D. Análisis por GC/FID y GC/MS de la composición química y estudio de la actividad antioxidante de los metabolitos secundarios volátiles, aislados por diferentes técnicas, de *Satureja viminea* L. cultivada en Colombia. *Scientia Chromatographica.* **2017**, 9(1), 25-39.



ESTUDIO DE LA CALIDAD DE ACEITES ESENCIALES AISLADOS DE PLANTAS DEL GÉNERO *Cymbopogon* EN SANTANDER, COLOMBIA

Angie K. Romero, Diego C. Durán, Sandra Pérez, Karen Ramírez, Lady J. Sierra, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras claves: *Cymbopogon martinii*, *Cymbopogon nardus*, aceite esencial, GC/MS.

Introducción: El aceite esencial (AE) de palmarrosa (*Cymbopogon martinii*, fam. Poaceae), se conoce por su alto contenido de geraniol y se usa como antimicrobiano, repelente de insectos, antiséptico y diurético (1). La citronela (*C. nardus*, fam. Poaceae) se utiliza en la medicina popular para el tratamiento del reumatismo y diferentes problemas digestivos y menstruales y como repelente de insectos (2).

Métodos: Los AE se obtuvieron por destilación por arrastre con vapor. Las propiedades físico-químicas de los AE se evaluaron según las normas ISO 1242, 709, 279, 280 y 592. La identificación de los compuestos presentes en los AE se realizó por GC/MS en columnas DB-5MS [5%-fenil-poli(metilsiloxano), 60 m x 0.25 mm (d.i.) x 0.25 (d_i)] y DB WAX [poli-(etilenglicol), 60 m x 0.25 mm (d.i.) x 0.25 (d_i)].

Resultados y conclusiones: En el AE de *C. martinii* se identificaron como componentes mayoritarios el geraniol (84.1%), acetato de geraniol (8.1%) y linalool (2.3%). En el AE de *C. nardus* se identificaron citronelal (41.1%), geraniol (16.8%) y citronelol (15.7%). Los rendimientos de extracción obtenidos para *C. nardus* y *C. martinii* fueron de 0.75% y 0.33% respectivamente. Las propiedades fisicoquímicas de los AE de palmarrosa y citronela obtenidos se encontraron dentro de los rangos de aceptación establecidos por estándares internacionales de calidad. La variación en la composición química se debió a diferencias en condiciones geoclimáticas y de cultivo de las parcelas experimentales, pero todos los AE cumplieron con las normas internacionales ISO 4727 para el AE de *C. martinii* e ISO 3848 para el AE de *C. nardus*.

Referencias:

1. Prashar, A.; Hili, P.; Veness, R.; Evans, C. Antimicrobial action of palmarosa oil (*Cymbopogon martinii*) on *Saccharomyces cerevisiae*. *Phytochemistry*. **2003**, 63(5), 569-575.
2. Abena, A.; Gbenou, J.; Yayi, E.; Moudachirou, M.; Ongoka, R.; Ouamba, J.; Silou, T. Comparative chemical and analgesic properties of essential oils of *Cymbopogon nardus* (L) Rendle of Benin and Congo. *Afr. J. Tradit. Complement Altern Med*. **2007**, 4(2), 267- 272.



SLQAE-402

COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Baccharis trinervis*, DE SANTANDER, COLOMBIA.

Javier F. Rojas, Cristian A. Oliveros, Sheylla Reyes, Diego C. Durán, Jairo R. Martínez, Elena. E Stashenko, Robert T. González M.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras Claves: *Baccharis trinervis*, AE, GC/MS.

Introducción: *Baccharis trinervis* es un arbusto de la familia Asteraceae, nativo de regiones tropicales y subtropicales de Suramérica, incluyendo Colombia y Brasil. Posee hojas elípticas, inflorescencias verdes y fruto seco café. Se utiliza en medicina tradicional para prevención de diversas enfermedades (1).

Metodos: El material vegetal fue recolectado en Zapatoca, Santander, Colombia, bajo el Contrato N° 270 de acceso a recursos genéticos y productos derivados con fines de bioprospección MinAmbiente-UIS. El aceite esencial (AE) se obtuvo de partes aéreas mediante hidrodestilación asistida por la radiación de microondas (MWHD) en un aparato tipo Clevenger.

Resultados y Conclusiones: La caracterización del AE se llevó a cabo en un cromatógrafo de gases acoplado a un espectrómetro de masas. Se utilizó una columna con fase estacionaria apolar (DB-5MS). Los componentes individuales se identificaron tentativamente, relacionando los espectros de masas obtenidos (EI, 70 eV) con los de bases de datos espectrales (ADAMS, NIST, Wiley), y comparando sus tiempos de retención lineales con los reportados en la literatura científica (2). Se identificaron 57 compuestos en el AE en cantidad relativa >0.1%. Los componentes mayoritarios encontrados en el AE de *B. trinervis* fueron germacreno D (13.4%) y óxido de cariofileno (9.9%). El rendimiento de extracción del AE fue relativamente bajo (0.07% p/p). Los componentes encontrados en el aceite difieren de los reportados en plantas recolectadas en Brasil, en las cuales se identificaron como componentes mayoritarios del AE β -felandreno (27.8%) y sabineno (13.3%) (3).

Referencias:

1. Jaramillo, V.; Trindade, C.; Lima, E.; ...; y Henriques, J. Chemical characterization and cytotoxic, genotoxic, and mutagenic properties of *Baccharis trinervis* (Lam, Persoon) from Colombia and Brazil. *J. Ethnopharmacol.* 2018, 213, 210-220.
2. Babushok, V.; Linstrom, P.; y Zenkevich, I. Retention indices for frequently reported compounds of plant essential oils. *J. Phys. Chem. Ref. Data.* 2011, 40, 1-47.
3. Sobrinho, A.; de Souza, E.; Rocha, M.; Albuquerque, M.; ...; y Morais, S.; dos Santos Fontenelle, R. Chemical composition, antioxidant, antifungal and hemolytic activities of essential oil from *Baccharis trinervis* (Lam.) Pers. (Asteraceae). *Ind Crops Prod.* 2016 84, 108-115.



COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Tagetes filifolia*, RECOLECTADA EN SANTANDER, COLOMBIA

David Vega, Cristian Oliveros, Juan C. Henríquez, Camilo Durán, Robert T. González, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Tagetes filifolia*, *trans*-anetol, aceite esencial, GC/MS.

Introducción: *Tagetes filifolia* es una hierba de la familia Asteraceae, originaria de América tropical. Su distribución geográfica abarca desde el norte de México hasta las zonas meridionales de Chile. Tiene hojas pinnadas, envolturas fusiformes, flores amarillas, con aquenios lineales y se usa comúnmente en Ecuador para aliviar el cólico menstrual (1).

Métodos: El material vegetal (hojas y tallos) se recolectó en Guaca, Santander, Colombia. La identificación taxonómica fue realizada en el Herbario de la Universidad Industrial de Santander. El aceite esencial (AE) se obtuvo por hidrodestilación asistida por la radiación de microondas. La caracterización del aceite esencial se llevó a cabo mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas GC/MS. Se emplearon dos columnas, una polar (DB-WAX) y otra apolar (DB-5MS). Los constituyentes del AE se identificaron tentativamente comparando sus espectros de masas (EI, 70 eV) con los de bibliotecas espectrales (ADAMS, NIST, Wiley) y por comparación de sus índices de retención lineales con los reportados en la literatura (2).

Resultados y conclusiones: El rendimiento de extracción del aceite esencial fue de 0,11% (p/p). Se identificaron 12 compuestos (área relativa $\geq 0,1\%$). Los principales componentes encontrados en el AE fueron estragol (19,8%) y *trans*-anetol (74,3%). El compuesto mayoritario, *trans*-anetol, difiere del AE obtenido de la misma planta cultivada en Perú, donde fue reportado el *cis*-anetol (68,2%) como compuesto principal (3).

Referencias:

1. Tene, V.; Malagón, O.; Finzi, P.; Vidari, G.; Armijos, C.; Zaragoza, T. An ethnobotanical survey of medicinal plants used in Loja and Zamora-Chinchipe, Ecuador. *J Ethnopharmacol.* **2007**, 111(1), 63-81.
2. Babushok, V.; Linstrom, P.; y Zenkevich, I. Retention indices for frequently reported compounds of plant essential oils. *J. Phys. Chem. Ref. Data.* **2011**, 40, 1-47.
3. De Feo, V.; Della, G.; Urrunaga, E.; Urrunaga, R.; Senatore, F. Composition of the essential oil of *Tagetes filifolia* Lag. *Flavour Fragr J.* **1998**, 13(3), 145-147.



COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Ageratina* aff. *popayanensis*, RECOLECTADA EN SANTANDER, COLOMBIA

María F. Estupiñán, Cristian Oliveros, Sheylla Reyes, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko, Robert T. González M

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Ageratina* aff. *popayanensis*, aceite esencial, GC/MS.

Introducción: *Ageratina* aff. *popayanensis*, comúnmente conocida como chilco negro, es un arbusto de la familia Asteraceae, endémico de Colombia. Se distribuye geográficamente en la región de los Andes. Tiene hojas simples opuestas, elípticas, y presenta flores color blanco a amarillo dispuestas en una inflorescencia. El aceite esencial de esta planta se caracteriza por su capacidad citotóxica (1).

Métodos: El material vegetal (hojas y tallos) se recolectó en Betulia, Santander, Colombia. La identificación taxonómica se realizó en el Herbario de la Universidad Industrial de Santander. El aceite esencial (AE) se obtuvo mediante hidrodestilación asistida por la radiación microondas. La caracterización del AE se llevó a cabo mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas GC/MS. Se emplearon dos columnas, una polar (DB-WAX) y otra apolar (DB-5MS). Los constituyentes del AE se identificaron tentativamente comparando sus espectros de masas (EI, 70 eV) con los reportados en bibliotecas espectrales (ADAMS, NIST), y los índices de retención lineales con los reportados en la literatura (2).

Resultados y conclusiones: El rendimiento de extracción del AE fue de 0.3% (p/p). Se identificaron 15 compuestos en el AE con una abundancia relativa mayor de 0,1%. Los constituyentes mayoritarios del AE fueron los monoterpenos α -pineno (33,5%), canfeno (13%) y β - pineno (8,6%). De estos compuestos, el α -pineno se destaca en la producción de compuestos naturales con aplicaciones farmacéuticas (3).

Referencias:

1. Velandia, S.A.; Flechas, M.C.; Stashenko, E.E.; Ocazonez, R.E. Proposal to select essential oils from colombian plants for research based on their cytotoxicity. *Vitae* **2016**, *23*, 18-29.
2. Rojas, J.P.; Perea, J.A.; Ortiz, C.C. Compounds with potential pharmacological application obtained by geraniol and pinene biotransformation. *Salud UIS* **2009**, *41*, 251- 258.
3. Babushok, V.; Linstrom, P.; y Zenkevich, I. Retention indices for frequently reported compounds of plant essential oils. *J. Phys. Chem. Ref. Data.* **2011**, *40*, 1-47.



SLQAE-430

Actividad antifúngica de aceites esenciales sobre el crecimiento de *Botrytis 720hippin* ATCC 36634

Jesús D. Rueda-Villabona¹, Clara I. Sánchez¹, Jairo R. Martínez², Elena E. Stashenko².

¹Escuela de Microbiología, Laboratorio de Hongos, Universidad Industrial de Santander, ²Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: aceites esenciales, antifúngico, *B. 720hippin*

Introducción: *B. 720hippin* fitopatógeno necrotrofico que ataca más de 500 especies de cultivos en el mundo, ocasiona pérdidas económicas que superan los \$10 mil millones de dólares. Aunque existen fungicidas controladores, estos no son cien por ciento satisfactorios. Los aceites esenciales se han convertido en una alternativa natural para tratar este fitopatógeno (1).

Métodos: La actividad antifúngica de los aceites esenciales (Códigos CENIVAM V1CN, V2CM, V3LO, V4SW, V5CAR y V6PC) se evaluó mediante la determinación del crecimiento de *B. 720hippin* por el método de dilución en placa y exposición de volátiles (2, 3).

Resultados y discusión: Se observó un efecto fungicida de los aceites esenciales V1CN, V2CM, V3LO y V5CAR, y un efecto fungistático de V4SW y V6PC sobre *B. 720hippin* por las dos metodologías empleadas.

Referencias

1. Hua, L.; Zhanquan, Z.; Boqiang, L.; Guozheng, Q.; 720hipping, T. Pathogenic mechanisms and control strategies of *Botrytis cinerea* causing post-harvest decay in fruits and vegetables. *FQS*, **2018**, 2(3), 111-119.
2. de Oliveira Filho, J.; da Cruz Silva, G.; de Aguiar, A.; Cipriano, L.; de Azeredo, H; Junior, S.; Ferreira, M. Chemical composition and antifungal activity of essential oils and their combinations against *Botrytis cinerea* in strawberries. *J. Food Meas. Charact.*, **2021**, 15(2), 1815-1825.
3. Yun, J.; Fan, X.; Li, X. Inactivation of Salmonella enterica serovar *Typhimurium* and quality maintenance of cherry tomatoes treated with gaseous essential oils. *J. Food Sci*, **2013**, 78(3), M458-M464.



COMPOSICIÓN QUÍMICA Y ACTIVIDAD BIOLÓGICA DE ACEITES ESENCIALES Y TERPENOS

Manuela Loaiza Oliva, Carolina Zapata Zapata, Maria Cecilia Martínez Pabón, Elena Stashenko, Ana Cecilia Mesa Arango.

Grupo de Investigación en Patología Oral, Periodoncia y Cirugía Alveólo-Dentaria. Universidad de Antioquia, Medellín 050010, Colombia.

manuela.loaiza@udea.edu.co

Palabras Claves: Aceites-esenciales, terpenos, actividad biológica.

Introducción: Las infecciones por hongos resistentes son un problema de salud, lo que hace necesario la búsqueda de nuevos antifúngicos¹. Los aceites esenciales (AE) pueden ser fuente de moléculas con actividad antifúngica². En este trabajo se presentan resultados de la composición química y de la actividad biológica de Aes y terpenos.

721étodos: La composición química de los Aes se realizó por GC/MS. Se usaron terpenos comerciales. La actividad antifúngica se evaluó con nueve cepas y ocho aislados clínicos de especies de *Candida* siguiendo el protocolo estándar M27-Ed4 CLSI 3. La citotoxicidad se evaluó en la línea celular HaCaT.

Resultados y Conclusiones: El análisis de Aes reveló predominio de timol, carvacrol, trans- β -cariofileno y p-cimeno. Las levaduras mostraron diferentes perfiles de sensibilidad a los antifúngicos anfotericina, itraconazol y fluconazol (MG: 0.23, 0.15 y FLZ 4.0 $\mu\text{g}/\text{mL}$). La actividad de los Aes fue especie dependiente; las CMI's variaron entre 64 y 256 $\mu\text{g}/\text{mL}$. Los terpenos timol y limoneno fueron activos con todas las levaduras (CMI entre 8-128 $\mu\text{g}/\text{mL}$) mientras que p-cimeno fue activo con levaduras poco sensibles o resistentes a los antifúngicos (MG CMI: 207.9 $\mu\text{g}/\text{mL}$). Limoneno fue el compuesto menos citotóxico (rango IS: 6-50) seguido del AE de *Lippia origanoides* quimiotipo timol (rango IS: 3-14).

La actividad antifúngica observada, unida a los altos valores de IS, ponen en evidencian el posible potencial de Aes y terpenos en el desarrollo de productos contra especies de *Candida* spp, en particular para cepas poco sensibles o resistentes como *C. auris* y *C. tropicalis* ATCC 200956.

Referencias:

1. Lone, S. A.; Ahmad, A. *Candida auris*-the Growing Menace to Global Health. *Mycoses* 2019, 62 (8), 620– 637. <https://doi.org/10.1111/myc.12904>.
2. Tariq, S.; Wani, S.; Rasool, W.; Shafi, K.; Bhat, M. A.; Prabhakar, A.; Shalla, A. H.; Rather, M. A. A Comprehensive Review of the Antibacterial, Antifungal and Antiviral Potential of Essential Oils and Their Chemical Constituents against Drug-Resistant Microbial Pathogens. *Microb. Pathog.* 2019, 134: 103580. <https://doi.org/10.1016/j.micpath.2019.103580>.
3. CLSI. Reference Method for Broth Dilution Antifungal Susceptibility Testing of Yeast M27, 4th ed.; 2017.



SLQAE-572

COMPOSICIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *Tagetes caracasana* CULTIVADA EN SANTANDER, COLOMBIA

Michael Santos, Sandra Pérez, Luis Zaraza, Camilo Durán, Jairo R. Martínez, Elena E. Stashenko.

Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander.

elena@tucan.uis.edu.co

Palabras clave: *Tagetes caracasana*, aceite esencial, GC/MS.

Introducción: *Tagetes caracasana* pertenece a la familia Asteraceae, conocida vernáculamente como clavelina, es nativa de América del sur, se distribuye geográficamente en Colombia, Ecuador y Venezuela. Tiene flores de color amarillo y se usa en infusión en la medicina tradicional (1).

Métodos: El material vegetal (228 kg) se cosechó en un cultivo experimental de la sede UIS-Barbosa, Santander. El aceite esencial (AE) se obtuvo por arrastre con vapor, en un alambique de 1 m³, y una caldera de 6 BHP (@80 psi), un flujo de vapor de 800 mL/min y un tiempo de destilación de 2 h. La caracterización del AE se llevó a cabo mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas GC/MS. Se emplearon dos columnas, una polar (DB-WAX) y otra, apolar (DB-5MS). Los constituyentes del AE se identificaron tentativamente comparando sus espectros de masas (EI, 70 eV) con los de las bibliotecas espectrales ADAMS, NIST, Wiley, y por comparación de sus índices de retención lineales con los reportados en la literatura (2).

Resultados y conclusiones: El rendimiento de extracción del aceite esencial fue de 0,2% (p/p). Se identificaron 28 compuestos (área relativa $\geq 0,1\%$). Los principales componentes encontrados en el AE fueron *cis*- β -ocimeno (2.3%), dihidrotagetona (7.4%), *cis*-tagetona (7.2%), *cis*-ocimenona (7.1%), *trans*-ocimenona (16.9%), óxido de piperitenona (2.1%) y *trans*- β -cariofileno (1%). La composición química del AE de *T. caracasana* cultivada en Barbosa, Santander, Colombia, fue similar a la reportada de plantas recolectadas en Venezuela (3).

Referencias:

1. Fernández, J.; Chacón, M. Especies vegetales aromáticas de La Provincia de Sumapaz y la cuenca del Río Chicamocha en Colombia. Primera Ed. Bogotá, Cundinamarca: Universidad Nacional de Colombia. 2012. p85.
2. Babushok, V.; Linstrom, P.; y Zenkevich, I. Retention indices for frequently reported compounds of plant essential oils. *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 2011, 40, 1-47.
3. Armas, K; Rojas, J; Rojas, L; Morales, A. Comparative study of the chemical composition of essential oils of five *Tagetes* species collected in Venezuela. *Nat. Prod. Commun.* 2012, 7: 1225–26.



CARACTERIZACIÓN QUÍMICA DEL ACEITE ESENCIAL DE *PLECTRANTHUS AMBOINICUS* (LOUR) SPRENG, UN PRODUCTO FORESTAL NO MADERABLE CULTIVADO EN LA SELVA PLUVIAL CENTRAL DEL CHOCÓ, COLOMBIA

Nayive Pino Benítez¹, Gloria Prado Pino¹

¹University Technological of Chocó, research group natural products. ¹Universidad Tecnológica del Chocó, grupo investigación productos naturales

nayivepino@gmail.com

Palabras clave: Composición química, orégano, carvacrol.

Introducción: Las comunidades chocoanas obtienen del entorno productos que utilizan para su sustento, constituyéndose los servicios ecosistémicos de provisión, con economía basada en extracción de oro y madera, causando daños ecológicos; los aceites esenciales hacen parte de dichos servicios, 723 categoría productos forestales no maderables, caracterizarlos da valor agregado a la flora.

Métodos: La destilación del aceite esencial se realiza por hidrodestilación convencional asistida en manta de calentamiento. Los procedimientos para determinar la composición química se realiza bajo la técnica cromatografía de gases acoplado a espectrometría de masas -GC-MS (Stashenko *et al.*, 2003), efectuado en el laboratorio del CIBIMOL (Universidad Industrial de Santander).

Resultados y conclusiones: Los resultados obtenidos por GC-MS del aceite esencial de *Plectranthus amboinicus* conocido como orégano, reportan 47 componentes químicos, destacando al carvacrol (48.2%) como mayoritario, seguido por *trans*-Cariofileno, *trans*- α Bergamoteno, *p*-Cimeno, γ -Terpineno, α -Humuleno y óxido de Cariofileno, que representan el 81.77% del total registrado (Tabla 1) y los compuestos restantes corresponden al 18.23%. De este modo, su alto porcentaje en masa de carvacrol lo convierte en posible fuente natural de este fenol, que le otorga múltiples propiedades biológicas.

Tabla 1. Identificación por GC-MS y cantidad relativa (%) del aceite esencial de *Plectranthus amboinicus*

Compuesto	I _k (exp.)		Área Relativa (%)
	DB-5MS	I _k (lit.)	
Carvacrol	1303	1299	48.26
<i>trans</i> -Cariofileno	1437		9.60
<i>trans</i> - α -Bergamoteno	1443	1435	5.87
<i>p</i> -Cimeno	1030	1025	5.22
γ -Terpineno	1063	1060	5.01
α Humuleno	1472	1455	4.33
Óxido de Cariofileno	1600	1583	3.48

Convenciones: **IK (exp.):** índice de Kovats experimental. **IK (lit.):** índice de kovats literario. **DB-5MS:** columna polar

REFERENCIAS:

1. Stashenko, E.E.; Jaramillo, B. E. y Martínez, J.R.. Comparación de la composición química y de la actividad antioxidante *in vitro* de los metabolitos secundarios volátiles de plantas de la familia Verbenaceae, *Rev. Acad. Colomb. Cienc.*, 2003, 27, 579-598



SLQAE-605

ENCAPSULACIÓN DE FITOPLAGUICIDAS A BASE EN ACEITES ESENCIALES DE *SATUREJA MONTANA* Y *RUTA GRAVEOLENS* EN MATRICES BIOPOLIMERICAS.

DUVAN FERNANDO CASTILLO GOMEZ, MARTHA PAEZ, RUBEN SANCHEZ, KELLY GOMEZ, BRAYAN HENRIQUEZ.

UNIVERSIDAD DEL VALLE

duvan.castillo@correounivalle.edu.co

PALABRAS CLAVES: Fitoplaguicidas, encapsulación, biopolímeros.

Los aceites esenciales son compuestos químicos que se extraen de las plantas, que se caracterizan por ser hidrófobos y altamente volátiles. Estos han sido ampliamente utilizados en la industria farmacéutica, alimentaria y agrícola, destacando sus usos como aromatizantes, antioxidantes y bioplaguicidas. Se ha demostrado que los aceites esenciales de Ruda (*Ruta graveolens*) y *Satureja Montana* tienen actividad nematocida contra el nematodo *Meloidogyne spp.* Esta clase de nematodo afecta cultivos de hortalizas en el mediterráneo y en climas tropicales como los cultivos de maíz, tomates entre otros. Sin embargo, la actividad biológica de este tipo de extractos puede perderse por volatilización de sus componentes activos o por degradación por altas temperaturas o luz ultravioleta, lo que dificulta su aplicación. Con el objetivo de una posible aplicación en agricultura de los aceites esenciales de Ruda (*Ruta graveolens*) y *Satureja Montana*, los aceites esenciales se encapsularon en matrices poliméricas de Quitosano y Alginato. De esta forma, se busca obtener un efecto nematocida tangible y más duradero durante la liberación lenta de sus principios activos, reduciendo la aplicación de estos de forma constante y la necesidad de mayores dosis.

REFERENCIAS:

1. Bioactivity of *Ruta graveolens* and *Satureja montana* Essential Oils on *Solanum tuberosum* Hairy Roots and *Solanum tuberosum* Hairy Roots with *Meloidogyne chitwoodi* Co-cultures Jorge M. S. Faria, Ana M.
2. Rodrigues, Inês Sena, Cristina Moiteiro, Richard N. Bennett, Manuel Mota, and A. Cristina Figueiredo *Journal of Agricultural and Food Chemistry* 2016 64 (40), 7452-7458 DOI: 10.1021/acs.jafc.6b03279.
3. Yuan Li, Chunhua Wu, Tiantian Wu, Liping Wang, Shiguo Chen, Tian Ding, Yaqin Hu, Preparation and characterization of citrus essential oils loaded in chitosan microcapsules by using different emulsifiers, *Journal of Food Engineering*, Volume 217, 2018, Pages 108-114, ISSN 0260-8774, <https://doi.org/10.1016/j.jfoodeng.2017.08.026>.



APROVECHAMIENTO DE LA ALBAHACA DULCE (*Ocimum basilicum* L. cv. 'Genovese') TIPO EXPORTACIÓN MEDIANTE OBTENCIÓN DE SU ACEITE ESENCIAL A PARTIR DE LA BIOMASA DE DESECHO POSTCOSECHA

Lina M. Valencia¹, Cristian A. Oliveros¹, Diego C. Durán¹, Karen J. Ramírez¹, Nelson G. Martínez¹, Jairo R. Martínez¹, Jairo Guerrero², Elena E. Stashenko¹

¹ Centro de Investigación en Biomoléculas-CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas-CROM-MASS, Centro de Investigación CENIVAM, Universidad Industrial de Santander. ² Especies San José SAS

elena@tucan.uis.edu.co

PALABRAS CLAVE: *Ocimum basilicum* L. cv. 'Genovese', aceite esencial, GC/MS.

INTRODUCCIÓN: La albahaca dulce (*Ocimum basilicum* L.) es una planta aromática introducida, cultivada comercialmente en Colombia con un valor económico alto. Su biomasa se usa principalmente en culinaria y como fuente de aceites esenciales (AE) (1, 2). Las hojas frescas de albahaca genovesa (*O. basilicum* L. cv. 'Genovese') tienen una alta demanda por su sabor y buena presentación visual (3). Sin embargo, parte de la biomasa que se "desecha" por no cumplir los criterios de calidad de exportación, se puede usar para obtener su AE.

MÉTODOS: Las hojas de albahaca genovesa desechadas en postcosecha por la Empresa Puerto Vallarta del material vegetal (MV) fresco y seco, se usaron para obtener los AE por arrastre con vapor en equipos de 1 m³ y 0.1 m³ de capacidad, respectivamente. La composición química de los AE se determinó mediante GC/MS, usando como criterios de identificación los índices de retención lineales y la comparación de los espectros de masas obtenidos experimentalmente con los reportados en las bases de datos espectrales (Adams y NIST) y en la literatura.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: El rendimiento del AE del MV seco fue notablemente superior (0.58%) al de la planta fresca (0.007%). Los AE fueron ricos en monoterpenos oxigenados (> 70%) e hidrocarburos sesquiterpénicos (> 10%). Se destacan los compuestos mayoritarios en común: estragol, linalol y 1,8-cineol. El AE de la planta fresca presentó mayor contenido de estragol comparado con el AE de la planta seca (55.8% y 43.0%), pero menor contenido de linalol (13.9% y 19.7%) y 1,8-cineol (5.2% y 7.9%), respectivamente. El presente estudio mostró que el estado del MV influye sobre la composición química de su AE, pero también, que el desecho postcosecha de la albahaca dulce puede ser aprovechado y dar valor adicional de sus cultivos comerciales.

REFERENCIAS:

1. Varga, F.; Carović-Stanko, K.; Ristić, M.; Grdiša, M.; Liber, Z.; Šatović, Z. Morphological and biochemical intraspecific characterization of *Ocimum basilicum* L. *Industrial Crops & Products*. **2017**, 109, 611-618.
2. Milenković, L.; Stanojević, J.; Cvetković, D.; Stanojević, L.; Lalević, D.; Šunić, L.; Fallik, E.; Ilić, Z.C. New technology in basil production with high essential oil yield and quality. *Industrial Crops & Products*. **2019**, 140, 111718.
3. Bekhradi, F.; Luna, M.C.; Delshad, M.; Jordan, M.J.; Sotomayor, J.A.; Martínez Conesa, C.; Gil, M.I. Effect of deficit irrigation on the postharvest quality of different genotypes of basil including purple and green Iranian cultivars and a Genovese variety. *Postharvest Biology and Technology*. **2015**, 100, 127-135.



SLQAE-770

COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LOS ACEITES ESENCIALES DE HOJAS Y FLORES DE *Piper aduncum* y *P. marginatum*

Rogerio A. Saavedra B.¹, Robert T. González M.², Jairo R. Martínez¹, Elena E. Stashenko¹

Centro de Investigación en Biomoléculas – CIBIMOL, Centro de Cromatografía y Espectrometría de Masas – CROM-MASS, Centro de Investigación de Excelencia CENIVAM, Universidad Industrial de Santander. ²Grupo de Investigación en Orquídeas y Ecología, Universidad Nacional de Colombia.

elena@tucan.uis.edu.co

PALABRAS CLAVE: *Piper*, fenilpropanoides, aceite esencial, GC/MS.

INTRODUCCIÓN: Las especies del género *Piper* se distribuyen en climas tropicales y subtropicales; han sido utilizadas en la etnomedicina por poseer actividad antiparasitaria, antimicrobiana, insecticida y antitumoral (1). Dentro de los metabolitos secundarios que constituyen los aceites esenciales de *P. marginatum* y *P. aduncum* se han detectado fenilpropanoides como dilapiol y miristicina (2).

MÉTODOS: Los AE se obtuvieron de material fresco de *P. aduncum* y *P. marginatum* en estado de floración. Las hojas e infrutescencias se destilaron por separado, por hidrodestilación asistida por microondas y su caracterización se realizó por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN: El AE de *P. aduncum* tuvo un contenido alto de 1,8-cineol (13%), piperitona (11%) y *trans*- β -ocimeno. El AE obtenido de las hojas se compuso principalmente de hidrocarburos monoterpénicos (38%), y el de infrutescencias de monoterpenos oxigenados (59%). En el AE de *P. marginatum*, la 3,4-metilendioxiopropiofenona (17%) y el γ -terpineno (14%) fueron los compuestos mayoritarios. El AE obtenido de las hojas tuvo un contenido alto de hidrocarburos monoterpénicos (43%); el de las infrutescencias se compuso mayoritariamente de fenilpropanoides (71%). Para las dos especies, se detectó una proporción mayor de compuestos oxigenados en los AE de inflorescencias que en los de hojas.

REFERENCIAS:

1. Durofil, A.; Radice, M.; Blanco-Salas, J.; Ruiz-Téllez, T. *Piper aduncum* essential oil: a promising insecticide, acaricide and antiparasitic. A review. *Parasite*, **2021**, 28, 42, 1-19.
2. Macêdo, G. C.; Fonseca, M. Y. N.; Caldeira, A. D.; Pinto, S.; Pacienza-Lima, W.; Goncalves, M. P.; Sartoratto, A.; Nascimento, M.; Guedes, C.; Rossi-Bergmann, B.; Ferreira, K. C. Leishmanicidal activity of *Piper marginatum* Jacq. from Santarém-PA against *Leshmania amazonensis*. *Exp. Parasitol.*, **2020**, 210, 107847, 1-7.



COMUNICACIONES PÓSTER IV C2B2

CIENCIAS ÓMICAS & BIOINFORMÁTICA

ILOC2-490

PAN-GENOME AND PHYLOGENOMIC ANALYSES OF THE PRODUCER OF XANTHAN GUM *XANTHOMONAS CAMPESTRIS*

Alejandra Betancur Sánchez, Carlos Caicedo-Montoya, Rigoberto Ríos-Estepa.
Universidad de Antioquia.

abetancurs@unal.edu.co

KEY-WORDS: Comparative genomics, *Xanthomonas campestris*, Biosynthetic gene cluster, Xanthan gum.

INTRODUCTION: *Xanthomonas campestris* is a bacterium known as a pathogenic agent that infects plant tissues. At industrial level, it is used in the production of xanthan gum, an extracellular polysaccharide with important properties in the food sector, because of its capacity to increase the viscosity of aqueous solutions.

METHODS: We characterized the pan-genome of this species by sequence similarity comparisons and domains content of the protein sequences. Production of secondary metabolites by *Xanthomonas campestris* strains was determined by AntiSMASH¹. Phylogenomics relationship through Average Nucleotide Identity (ANI) calculation and CAZymes distribution was established using JspeciesWS² and dbCAN2³, respectively.

RESULTS AND CONCLUSIONS: In this research we performed a comparative genomic analysis among strains of *Xanthomonas campestris* using all the complete genome assemblies available in Refseq for this microorganism. Comparative genomic studies allowed us to predict if differences in gene content among strains of the same species are responsible for different phenotypes. Our analysis revealed that *Xanthomonas campestris* has a core genome of 2997 genes and 1206 unique genes which supports an open pan-genome estimation; this species also has the capacity to produce multiple secondary metabolites such as xanthoferrin, xanthomonadin, bacteriocins and lasso-peptides. Interestingly, the genes *gumD*, *gumH*, *gumI* y *gumK*, which are entailed in xanthan gum production, are conserved among the analyzed strains. Outcomes from this study greatly contribute to the understanding of genomic diversity and the mechanisms involved in plant tissue infection and secondary metabolite production of *Xanthomonas campestris* strains.

REFERENCES:

1. Medema, M. H.; Blin, K.; Cimermancic, P.; De Jager, V.; Zakrzewski, P.; Fischbach, M. A.; Weber, T.; Takano, E.; Breitling, Nucleic Acids Res. 2011, 39 (SUPPL. 2), 339–346. <https://doi.org/10.1093/nar/gkr466>.
2. Richter, M.; Rosselló-Móra, R.; Oliver Glöckner, F.; Peplies, J. Bioinformatics 2016, 32 (6), 929–931. <https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btv681>.
3. Zhang, H.; Yohe, T.; Huang, L.; Entwistle, S.; Wu, P.; Yang, Z.; Busk, P. K.; Xu, Y.; Yin, Y. Nucleic Acids Res. 2018, 46 (W1), W95–W101. <https://doi.org/10.1093/nar/gky418>.



MOLECULAR HUMAN TARGETS OF BIOACTIVE ALKALOID-TYPE COMPOUNDS FROM TABERNAEMONTANA CYMOSE JACQ.

Andres Felipe Oliveros Diaz, Yina Pájaro González, Jesús Olivero Verbel, Fredyc Díaz Castillo.
Universidad de Cartagena.

aoliverosd@unicartagena.edu.co

KEY WORDS: Indole alkaloid; drug discovery; AutoDock Vina; STRING; signalling pathway.

INTRODUCTION: Plants have the ability to produce a wide diversity of molecules through their metabolism; These molecules have been used to treat diseases and eliminate pests for centuries. Drug discovery is a time-consuming and expensive process, as a solution, the application of computational approaches and bioinformatics tools has boomed due to the volume of information that can be handled and the proper results obtained regarding to therapeutic targets for the molecules evaluated. The present work aims to discover the molecular human targets of bioactive alkaloids present in *Tabernaemontana cymosa* extract and its potential medicinal use¹, using molecular docking approach and analysis of Protein-Protein Interaction (PPIs) networks through databases such as STRING and KEGG Pathway². **Methods:** Ethanol extract was obtained from 690 grams plant material using maceration, resulting extract was filtered and concentrated with a rotary evaporator at 45 °C. The identification of alkaloid from *T. cymosa* was performed using High-Performance Liquid Chromatography coupled to Mass Spectrometry. Identified molecules were chosen for computational calculations and their 3D data were downloaded from the PubChem® database. They were subsequently optimized with Gaussian 09 program and resulting geometries were converted (.MOL2) format using the Open Babel 2.3.1 software. The crystallographic structures of 951 human proteins obtained from the Protein Data Bank database and were optimized using Sybyl-X 2.0 Suite software³. Molecular Docking calculations of indole alkaloids and 951 human targets were carried out in the AutoDock Vina 1.0 software⁴. The STRING database was used to find physical and functional associations between the proteins, on the other hand, we obtained the probable mechanisms of action for indole alkaloids and the selection of signaling pathways networks through KEGG database.

RESULTS AND CONCLUSIONS: A total of 23 indole alkaloid were identified from the ethanolic extract of *Tabernaemontana cymosa* (yield of 10.85%). Results indicate that 5-oxocoronaridine and voacangine 7-hydroxyndolenine obtained the best affinity scores for most of the evaluated targets, on the contrary, rupicoline, voacangine and isovoacangine molecules presented green zones that indicate a lack of affinity with human targets. PPIs analysis resulted in the identification of AKT1 as the principal node of the association network, additionally we determined that eight inhibited proteins by 5-oxocoronaridine are involve in PI3K/Akt/mTOR signaling pathways, which is associated with tumoral processes. Through the applied computational tools, we were able to identify indole alkaloid targets, such as the PI3K/Akt/mTOR signaling pathway and CNS protective proteins. The 5-oxocoronaridine, voacangine-7-hydroxyndolenine and voacristine molecules presented the best theoretical affinity score with respect to human targets, highlighting those involved in carcinogenic processes, which makes them promising molecules for the development of oncological treatments.

REFERENCES:

1. Fuentes, D. D. C. C.; Buendía, Y. C. O.; Mateus, L. C. O.; Díaz, R. D. S.; Castillo, F. D.; Ospina, L. A. F. Extractos del Caribe Colombiano con actividad antiproliferativa frente a líneas celulares de cáncer de pulmón. *Revista Cubana de Farmacia* 2019, 51 (4).
2. Kanehisa, M.; Goto, S. KEGG: Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes. *Nucleic Acids Res* 2000, 28 (1), 27–30.
3. Montes-Grajales, D.; Olivero-Verbel, J. Structure-Based Identification of Endocrine Disrupting Pesticides Targeting Breast Cancer Proteins. *Toxicology* 2020, 439, 152459. <https://doi.org/10.1016/j.tox.2020.152459>.
4. (4) Trott, O.; Olson, A. J. AutoDock Vina: Improving the Speed and Accuracy of Docking with a New Scoring Function, Efficient Optimization and Multithreading. *J Comput Chem* 2010, 31 (2), 455–461. <https://doi.org/10.1002/jcc.21334>.



SLCO2-579

IDENTIFICACIÓN DE CHLAMYDIA TRACHOMATIS SEROVAR L2 EN LA POBLACIÓN DE HSH Y USO POTENCIAL DE PÉPTIDOS ANTIMICROBIANOS CONTRA ESTE PATÓGENO.

Martha Gómez Jiménez¹, Laura Rubio¹, Johan Alcántara¹, Natalia Castellanos¹, Daniel Galeano¹, Ruth Mélida Sánchez Mora¹, Gabriela Arévalo Pinzón¹.

2. Grupo de Biotecnología y Genética, Universidad Colegio Mayor de Cundinamarca, Facultad de Ciencias de la Salud.

marthagomez@unicolmayor.edu.co

PALABRAS CLAVE: HSH, Chlamydia trachomatis, ITS, Péptidos antimicrobianos.

INTRODUCCIÓN: *Chlamydia trachomatis* es uno de los patógenos comúnmente diagnosticados en enfermedades de transmisión sexual¹. Sin embargo, en Colombia existen pocos reportes de la prevalencia de este patógeno en la población de HSH. Este proyecto presenta datos de la prevalencia de *C. trachomatis* en HSH y alternativas para combatir este patógeno.

MÉTODOS: i) Implementar actividades de apropiación social con la comunidad de hombres que tienen sexo con hombres. ii) Identificar molecularmente la presencia de *C. trachomatis* serovar L2 en hisopados anorrectales provenientes de hombres que tienen sexo con hombres. iii) Determinar la actividad antimicrobiana del péptido 23688 y sus derivados utilizando como modelo de infección la línea celular Hep-2.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Actividades de apropiación social del conocimiento permitieron la interacción de jóvenes talento con la población de hombres que tienen sexo con hombres. A partir de estas visitas y la implementación de talleres, se diseñaron herramientas informáticas para un mayor acceso a la información relacionada con las enfermedades de transmisión sexual y en especial a la que produce *C. trachomatis* denominada linfogranuloma venéreo². Con estas intervenciones se tuvo acceso a un número importante de muestras para la implementación de la PCR y determinación de la frecuencia de *C. trachomatis* serovar L2. Los resultados preliminares con los cebadores KL1-KL2 y KL5-KL6 muestran la presencia de *C. trachomatis* en la población de HSH. Se logró el establecimiento de la *C. trachomatis* en células Hep2 para evaluar péptidos antimicrobianos contra este patógeno. Los resultados preliminares muestran la relevancia de diseñar estudios para esta bacteria que tanto afecta a la población colombiana.

REFERENCIAS:

1. Elwell, C.; Mirrashidi, K.; Engel, J., Chlamydia cell biology and pathogenesis. *Nat Rev Microbiol* **2016**, *14* (6), 385-400.
2. Ferreira, R.; Borges, V.; Borrego, M. J.; Gomes, J. P., Global survey of Mrna levels and decay rates of Chlamydia trachomatis trachoma and lymphogranuloma venereum biovars. *Heliyon* **2017**, *3* (7), e00364.



SLOC2-260

ESTUDIO METABOLÓMICO DE LA REEXPRESIÓN DE INTERFERÓN KAPPA EN CÉLULAS TUMORALES DE CUELLO UTERINO INFECTADAS CON VIRUS DEL PAPILOMA HUMANO

Leidy Tatiana Sierra Guevara, William Fernando Hidalgo Bucheli, Bladimiro Rincon Orozco, Brigitte Ofelia Peña López.
Universidad Industrial de Santander.

leidy.sierra3@correo.uis.edu.co

PALABRAS CLAVE: CCU, VPHs-AR, Interferón-kappa, Metabolómica.

Los Virus de Papiloma Humano de alto riesgo (VPHs-AR) por medio de sus oncogenes E6 y E7 apagan la respuesta inmune de los queratinocitos, mediante silenciamiento epigenético del interferón kappa (IFN-k); propiciando la infección crónica del virus, que termina desencadenando cáncer de cuello uterino (CCU). Para comprender las alteraciones metabólicas causadas por VPHs-AR en la expresión del IFN-k, esta investigación realiza un análisis metabolómico en líneas celulares tumorales de cuello uterino, transducidas con un vector que contiene el gen codificante IFN- κ . Las muestras se analizan mediante UHPLC-Orbitrap-MS y los datos se procesan con herramientas quimiométricas.

La reexpresión del IFN-k en las células tumorales de CCU se realizará mediante la transducción con un vector lentiviral que contiene el gen codificante para el IFN-k. Luego de evaluar la proliferación celular por medio del proceso de selección, se procederá con el análisis metabólico no dirigido, que involucra la extracción de metabolitos, procesamiento de muestras por UHPLC-Orbitrap-MS y el tratamiento de datos en Metaboanalyst 5.0; permitiendo explorar la modulación sobre el flujo de fuentes de carbono, lípidos y aminos biogénicas, involucradas en la producción de biomoléculas necesarias para el ensamblaje, propagación y mantenimiento de la infección viral. Finalmente, este estudio podría facilitar la búsqueda de nuevos compuestos antivirales para crear terapias más efectivas basadas en el bloqueo de procesos inmunometabólicos específicos.

REFERENCIAS:

1. Rincón, B.; Halec, G.; Rosenberger, S.; Muschik, D.; Nindl, I.; Bachmann, A.; Ritter, T. M.; Dondog, B.; Ly, R.; Bosch, F. X.; Zawatzky, R.; Rosl, F. Epigenetic Silencing of Interferon- in Human Papillomavirus Type 16-Positive Cells. *Cancer Res.* 2009, **69**, 8718-8725.
2. Stanley, M. Pathology and epidemiology of HPV infection in females. *Gynecologic Oncology*, 2010, **117**, 5-10.
3. (3) Borgogna, J. C.; Shardell, M. D.; Santori, E. K.; Nelson, T. M.; Rath, J.; Glover, E.D.; Ravel J.; Gravitt, P.; Yeoman, C. J.; Brotman, R. M. The vaginal metabolome and microbiota of cervical HPV-positive and HPV negative women: a cross-sectional analysis. *BJOG*. 2019, **127**, 182-192.



ESTUDIO FILOGENÉTICO Y FUNCIONAL DE LA ENZIMA A 1,6 - MANOSILTRANSFERASA. NUEVOS HALLAZGOS.

Johanna Ramírez Pineda¹, Luis Eduardo Peña¹, Alexander Rodríguez-Lopez^{2,3}

¹ Licenciatura en Química, Facultad de Ciencias y Educación, Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Bogotá D.C., Colombia. ² Departamento de Biología Molecular e Inmunología, Fundación Instituto de Inmunología de Colombia (FIDIC). Bogotá D.C., Colombia. ³ Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Pontificia Universidad Javeriana, Bogotá D.C., Colombia.

yjramirezp@correo.udistrital.edu.co

Palabras Clave: Glicosiltransferasa, filogenia, glicosilación, motivo.

La adición de moléculas de carbohidratos a una proteína, es un proceso conocido como glicosilación. Se trata de una modificación postraducciona que tiene varias funciones asociadas. Las glicosiltransferasas, son las proteínas encargadas de adicionar las moléculas de carbohidratos para la formación de estas glicosilaciones. El gen OCH1, codifica para la proteína α 1,6 - manosiltransferasa, enzima encargada de agregar el primer residuo de manosa en posición α 1,6 en Golgi, para dar inicio a la elongación de la cadena tipo manano. Esta glicosilación es usual en levaduras, e incluso es de gran importancia para el mantenimiento de su membrana. Por esta razón, la proteína codificada por el gen OCH1 es de gran interés para diversos estudios biomoleculares, sin embargo, se desconocen varios aspectos importantes de esta, comenzando por sus relaciones evolutivas y la función que cumple en diferentes organismos.

En este trabajo se desarrolló un análisis filogenético de la proteína α 1,6 - manosiltransferasa, presente principalmente en hongos, para identificar aspectos importantes de su función en relación a su evolución. Para ello, la metodología comprendió en primer lugar, de la búsqueda en UniProt, de la proteína α 1,6 - manosiltransferasa (OCH1) de la levadura *Komagataella phaffii*; seguido de un BLAST en NCBI, en donde se seleccionaron 136 secuencias. Después se incorporan 63 secuencias más de glicosiltransferasas de la familia 32, a la cual pertenece esta proteína, seleccionadas de la base de datos CAZY para un total de 199 (pertenecientes a hongos, levaduras, bacterias, animales y plantas) con las cuales se realizó un alineamiento en el programa Clustal Omega y un curado manual en BioEdit. Por último, se utilizó el programa MEGAX para realizar los árboles bajo los métodos de **Máxima verosimilitud** y **Máxima parsimonia**. Como resultado se encontraron relaciones evolutivas entre esta manosiltransferasa y otras glicosiltransferasas homólogas que conservan el motivo D-x-D, descrito como el sitio activo de estas proteínas. Adicionalmente se identifica un motivo altamente conservado (GG-x-Y) en todas las 199 secuencias analizadas, el cual antecede el motivo D-x-D. Adicional a este hallazgo, se encontró que la agrupación por clados permitía observar otros motivos conservados que sugieren la especialización funcional de la proteína, en los diferentes grupos taxonómicos.

Referencias:

1. Rokas, A. (2011). Phylogenetic Analysis of Protein Sequence Data Using the Randomized Accelerated Maximum Likelihood (RAXML) Program. *Current Protocols in Molecular Biology*, 96(1), 19.11.11-19.11.14. doi:<https://doi.org/10.1002/0471142727.mb1911s96>
2. Wang, Y., Gong, X., Chang, S.-H., Liu, B., Song, M., Huang, H.-H., & Wu, J. (2007). A *Pichia pastoris* with α -1,6-mannosyltransferase Deletion and Its Use in the Expression of HSA/GM-CSF Chimera. *Chinese Journal of Biotechnology*, 23(5), 907-914. doi:[https://doi.org/10.1016/S1872-2075\(07\)60056-9](https://doi.org/10.1016/S1872-2075(07)60056-9)



SLOC2-417

VALIDACIÓN CUÁNTICA DE RESIDUOS DE AMINOÁCIDOS NO ESTÁNDARES MODIFICADOS POR PRODUCTOS FINALES DE PEROXIDACIÓN LIPÍDICA.

Camila Cabarcas-Herrera, Rafael Pineda-Alemán, Erika Rodríguez-Cavallo, Darío Méndez-Cuadro.
Grupo de Investigación en Química Analítica y Biomedicina - Campus de San Pablo – Laboratorio 101. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales. Universidad de Cartagena, Cartagena de Indias – Colombia.

erodriguezc1@unicartagena.edu.co - dmendezc@unicartagena.edu.co.

Palabras Clave: Carbonilación, Validación, QM ALEs.

INTRODUCCIÓN: Los residuos de aminoácidos no estándares modificados y optimizados son utilizados como punto de partida en MD [1]. Hasta el momento no está claro la importancia y/o relevancia del método computacional al optimizar estos nuevos residuos modificados.

METODOLOGÍA: Optimización de residuos de aminoácidos modificados con B3LYP/6-31G y M062X/6-31G en Gaussian16 [2]. Búsqueda de conformeros con el software Avogadro 1.2.0. Nueva optimización de los 5 conformeros de menor energía con B3LYP/6-31G y M062X/6-31G. Comparación energética.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Las estructuras de los residuos de aminoácidos modificados con los productos finales de peroxidación lipídica, fueron satisfactoriamente optimizados y validados mediante métodos de QM. Observando que en nuestras condiciones de ensayo la optimización con el funcional B3LYP resultó ser particularmente ventajoso porque permitió la obtención de energías más bajas y a menor costo computacional que aquellos obtenidos con el funcional M062X.

REFERENCIAS:

1. A. Alviz-Amador *et al.*, «Development and benchmark to obtain AMBER parameters dataset for non-standard amino acids modified with 4-hydroxy-2-nonenal», *Data Brief*, vol. 21, pp. 2581-2589, dic. 2018, doi: 10.1016/j.dib.2018.11.102.
2. M. J. Frisch *et al.*, «Gaussian 16», *Revis. A*, vol. 3, 2016.



SLOC2-418

Análisis del efecto de variaciones en la longitud de las cadenas carbonadas de glicerosfolípidos saturados y monoinsaturados sobre el comportamiento elástico y de fase de bicapas lipídicas mediante Dinámica Molecular.

María Clara Quintero^{1,2} Jorge David², Luis A. Gómez¹.

¹Grupo CIBIOP, ²Maestría en Física Aplicada, Escuela de Ciencias, Universidad EAFIT.

mcquinterg@eafit.edu.co

PALABRAS CLAVES: Dinámica Molecular, Bicapa Lipídica, Comportamiento de Fase, Propiedades Elásticas.

INTRODUCCIÓN: Las bicapas lipídicas constituyen la unidad estructural fundamental de las membranas biológicas, las cuales están involucradas en numerosos procesos celulares indispensables para la vida. Por tanto, el estudio de la estructura y dinámica de estos sistemas ha ganado gran interés en los últimos años mediante métodos experimentales y computacionales.

MÉTODOS: A través de CHARMM-GUI se ensamblaron sistemas monocomponentes de lípidos saturados y monoinsaturados con longitudes de cadena carbonada entre 10 y 16 carbonos, mediante Dinámica Molecular con Gromacs y el campo de Fuerzas CHARMM-36, se evaluó el comportamiento elástico de tales sistemas a 323.15 K y el comportamiento de fase para un sistema saturado (DSPC) y uno insaturado (DEPC).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Se evaluaron 11 bicapas monocomponentes de glicerosfolípidos saturados y monoinsaturados, con longitud de cadena carbonada entre 10 y 18 carbonos a 323.15 K. Se calcularon las propiedades estructurales: área por lípido, parámetro de orden y espesor de la bicapa y propiedades elásticas: módulo de compresibilidad y módulo de rigidez. Se pudo observar la tendencia que se presenta para las propiedades obtenidas, a partir de la influencia de la longitud de la cadena para sistemas saturados y monoinsaturados. Finalmente, se simuló el comportamiento de fase de una bicapa de cadena carbonada saturada y una bicapa con una insaturación, donde se pudo comparar el valor simulado y el valor experimental.

REFERENCIAS:

1. Khakbaz, P., Klauda, J. B. (2018). Investigation of phase transitions of saturated phosphocholine lipid bilayers via molecular dynamics simulations. *Biochim. Biophys. Acta, Biomembr.* 1860(8), 1489-1501.
2. O.G. Mouritsen, A. Boothroyd, R. Harris, N. Jan, T. Lookman, L. MacDonald, D.A. Pink, M.J. Zuckermann, Computer simulation of the main gel–fluid phase transition of lipid bilayers, *J. Chem. Phys.* 79 (1983) 2027–2041. LeekumjornLeekumjorn, S., Sum, A. K. (2007). Molecular studies of the gel to liquid-crystalline phase transition for fully hydrated DPPC and DPPE bilayers. *Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-Biomembranes*, 1768(2), 354-365.



SLOC2-476

Identificación de genes relacionados con la producción de proteínas alergénicas en aislamientos de *Aspergillus* spp.

Maria Camila Zuleta^{1,2}, Eder Andrés Vélez^{1,2}, Ángela María Lopez¹, Oscar Mauricio Gómez^{1,2*}, Elizabeth Misas Rivas¹, Liliana Jiménez Zapata^{1,2}, Álvaro León Rúa^{1,2}, Orville Hernández Ruiz^{1,2}.

¹Unidad de Biología Celular y Molecular; Corporación para Investigaciones Biológicas (CIB); Medellín, Colombia. ²Grupo de Investigación MICROBA, Escuela de Microbiología; Universidad de Antioquia; Medellín, Colombia.

mariac.zuleta@udea.edu.co

PALABRAS CLAVES: Alérgenos, *Aspergillus*, Gen, Secuencia.

INTRODUCCIÓN: *Aspergillus* spp. Es un hongo que expresa proteínas con capacidad alergénica¹. Actualmente han sido oficialmente reconocidos 30 alérgenos², la mayoría de ellos en *A. fumigatus*; en las otras especies el conocimiento es limitado³. El objetivo fue identificar genes relacionados con la producción de proteínas alergénicas en aislamientos *Aspergillus* spp.

MÉTODOS: Se secuenciaron 21 aislamientos de *Aspergillus* spp. Obtenidos de muestras de aire con tecnología illumina a una profundidad superior a 50X. Las secuencias crudas fueron ensambladas de novo con SPAdes y posteriormente, por homología de secuencias con BLAST se identificaron los ortólogos de los 30 genes asociados a alérgenos.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Asp3, Asp12, Asp22 y Asp23 descritos como alérgenos en *A. fumigatus* y Asp36 descrito en *A. terreus* fueron identificados en los 21 genomas analizados. El 50% de los genes asociados a *A. fumigatus* se encuentran en *A. flavi* y *A. tamari*; el 36 % en *A. terreus* y el 27% en *A. niger*.

Asp1 solo se encontró en *A. fumigatus* y Asp17 en *A. fumigatus*, *A. tamari* y en *Aspergillus* sección *Clavati*.

Asp13 descrito en *A. versicolor*, fue encontrado en solo 2 aislamientos: *A. amoenus* y *A. nidulans*; y *A. tritici* mostró el menor número de genes asociados a alérgenos (27%).

La identificación de estos genes es el primer paso para conocer la biología alergénica, ahora se realizarán ensayos de RT-qPCR para evaluar sus niveles de expresión.

REFERENCIAS:

1. Li, E.; Knight, J. M.; Wu, Y.; Luong, A.; Rodriguez, A.; Kheradmand, F.; Corry, D. B. Airway Mycosis in Allergic Airway Disease. In *Advances in Immunology*; Alt, F. B. T.-A. in I., Ed.; Academic Press, 2019; Vol. 142, pp 85–140. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/bs.ai.2019.05.002>.
2. WHO/IUIS Allergen Nomenclature Home Page <http://www.allergen.org/index.php> (accessed May 15, 2021).
3. Fraczek, M. G.; Bowyer, P. Genomics of Fungal Allergens. *Fungal Genom Biol* **2013**, 3 (2), 114. <https://doi.org/10.4172/2165-8056.1000e114>.



SLOC2-510

EN BUSCA DE POLI ADP-RIBOSIL POLIMERASAS (PARP) EN *LEISHMANIA* SSP: UN ACERCAMIENTO *IN-SILICO*.

Luis David Ramírez, Luis Ernesto Contreras, María Helena Ramírez.

Laboratorio de investigaciones básicas en bioquímica (LIBBIQ) Facultad de Ciencias -Universidad Nacional de Colombia Sede Bogotá.

luisdarae@gmail.com

PALABRAS CLAVE: PARP, Leshmania, NAD+.

Las poli (ADP-ribosil) polimerasas (PARP) son enzimas reguladoras postraduccionales, que transfieren múltiples unidades de ADP-ribosa a proteínas aceptoras, empleando para ello la hidrólisis del NAD⁺. Su actividad es relevante en diversos sistemas de reparación de ADN; Las PARPs, han sido ampliamente estudiadas en organismos pluricelulares, por el contrario, en eucariotas unicelulares su estudio ha sido limitado. La Leishmaniasis es una enfermedad de alta incidencia en la salud pública, incrementada en los últimos años por el cambio climático, lo cual favorece la prevalencia y amplia la distribución del flebotomiano transmisor del parásito, Leishmania. A la fecha no se ha identificado PARP en este protozoo. Los tratamientos quimioterapéuticos poco efectivos hacen necesario identificar blancos terapéuticos a partir de un conocimiento racional de este organismo.

En este estudio se realizó un acercamiento empleando herramientas computacionales, para identificar candidatos a PARP en Leishmania (LbPARP). A partir de PARP previamente identificadas en las bases de datos del Centro Nacional para la Información Biotecnológica (NCBI). Inicialmente se realizaron alineamientos de secuencias proteicas usando el programa ClustalΩ y MAFFT. comparándolas con sus ortólogos humanos entre otros, se identificaron secuencias características de esta familia de proteínas. Adicionalmente se hicieron predicciones de la estructura terciaria con la secuencia identificada en el genoma de Leishmania, empleando el modelado por homología en SWISS-MODEL, tomando como plantillas las PARP-1 y PARP-2 de *Homo sapiens*. Posteriormente se realizó la superposición del modelo teórico con las plantillas mediante el programa de visualización de Chimera. Se identificaron en el candidato aminoácidos cruciales del C-terminal para la acción enzimática de las PARP como la His862, Gly863 y Tyr896, presentes en las PARPs de las especies reportadas del género *Leishmania*. No obstante, con los dos algoritmos empleados las especies de *Leishmania* no presentan el Glu988, el cual forma parte de la triada catalítica H-Y-E en humanos. La superposición del modelo obtenido de LbPARP con las HsPARP-1 y HsPARP-2 presentaron RMSDs de 0,653 Å y 0,401 Å respectivamente. Las validaciones de las estructuras obtenidas se hicieron con el plot de Ramachandran, de 89,37% para el modelo que tomó como plantilla la hsPARP-1 y 82,37% para hsPARP-2.

Los hallazgos bioinformáticos obtenidos establecen el punto de partida para abordar por primera vez, la caracterización experimental de los candidatos identificados para la PARP en Leishmania, patógeno de interés en salud pública actual.

REFERENCIAS:

1. Fernández Villamil, S. H.; Baltanás, R.; Alonso, G. D.; Vilchez Larrea, S. C.; Torres, H. N.; Flawiá, M. M. TcPARP: A DNA Damage-Dependent Poly(ADP-Ribose) Polymerase from Trypanosoma Cruzi. Int. J. Parasitol. 2008, 38 (3-4), 277-287.
2. Fernández Villamil, S. H.; Vilchez Larrea, S. C. Poly(ADP-Ribose) Metabolism in Human Parasitic Protozoa. Acta Trop. 2020, 208 (105499), 105499.
3. Alessova, E. E.; Lavrik, O. I. Poly(ADP-Ribosyl)ation by PARP1: Reaction Mechanism and Regulatory Proteins. Nucleic Acids Res. 2019, 47 (8), 3811-3827.



Evidencia de cambios epigenéticos en variantes morfológicas de *Bacillus tequilensis* EA-CB0015.

Camilo García-Botero¹, Tatiana Z. Cuellar-Gaviria², Yaleska Villegas-Escobar¹

¹Departamento de Ciencias Biológicas, Grupo de investigación CIBIOP, Universidad EAFIT, Medellín, Colombia,

²Department of Microbiology, The Ohio State University, Columbus, OH, USA

vvilleg2@eafit.edu.co

PALABRAS CLAVE: Epigenética, metiloma, *Bacillus*, restricción-modificación. *Bacillus tequilensis*

EA-CB0015

ha demostrado una rápida y recurrente emergencia de variantes morfológicas carentes de rasgos de multicelularidad. Análisis de expresión diferencial de genes han apuntado a que el sistema de restricción y modificación está sobre expresado en una variante, conduciéndonos a preguntarnos si ocurrían metilaciones diferenciales en las variantes. Las bacterias fueron cultivadas en TSA y posteriormente se extrajo su ADN para secuenciarlo por SMRT en la plataforma de PacBio. Sus genomas fueron ensamblados y se predijeron las metilaciones, así como los motivos usando la suite de SMRT. Se realizó un análisis de homología del sistema restricción y modificación.

B. tequilensis EA-CB0015 presenta un nuevo sistema de restricción-modificación (RM) de tipo I cuya subunidad de especificidad (S) parece no tener un homólogo cercano. Las metilaciones (m4C y m6A) aumentan en las variantes y aunque el nuevo motivo bipartita ^{m6}ACCN₆TTTA/TAA^{m6}AN₆GGT aparece en todas las variantes metilado y puede estar asociado al nuevo sistema RM, este no se metila diferencialmente. La intersección de las metilaciones comunes en todas las variantes (y ausentes en la silvestre) indica que múltiples genes (81) asociados a la esporulación, síntesis de pared celular, síntesis de peptidoglucano, quimiotaxis, incorporación de sideróforos, formación de biopelícula, competencia, respuesta al estrés, genes asociados al metabolismo de biosíntesis, etc., están mostrando todos al menos un tipo de demetilación (^{m4}C o ^{m6}A). Estos resultados sugieren que existe una relación entre las metilaciones y la emergencia del fenotipo observado en las variantes, evidencia importante que permitirá predecir eventualmente si el fenómeno es reversible.

REFERENCIAS:

1. Cuellar-Gaviria, T. Z. The Unrestrained Loss of Social Traits of *Bacillus Tequilensis* EA-CB0015 Compromises Its Success as a Biological Control Agent, Universidad EAFIT, Medellín, 2021.
2. Vandebussche, I.; Sass, A.; van Nieuwerburgh, F.; Pinto-Carbó, M.; Mannweiler, O.; Eberl, L.; Coenye, T. Detection of Cytosine Methylation in *Burkholderia Cenocepacia* by Single-Molecule Real-Time Sequencing and Whole-Genome Bisulfite Sequencing. *Microbiology* 2021. <https://doi.org/10.1099/mic.0.001027>.
3. Beaulaurier, J.; Schadt, E. E.; Fang, G. Deciphering Bacterial Epigenomes Using Modern Sequencing Technologies. *Nature Reviews Genetics* 2019, 20 (3), 157–172. <https://doi.org/10.1038/s41576-018-0081-3>.



Diseño y evaluación de una formulación para la extracción y preservación de RNA

Andrea Carolina Barragán-Cárdenas, David Alejandro López-González, Valentina Guevara, Andrés Correa-Sánchez, Sebastián Arcila-Barrera, Adriana Umaña-Pérez, Mauricio Urquiza.
Universidad Nacional de Colombia

abarraganc@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Lisis celular, expresión génica, estabilidad del RNA.

INTRODUCCIÓN:

Muchas metodologías contemplan la purificación del RNA obtenido mediante lisis celular antes de poder ser usado en detección génica por PCR¹. Reportamos la formulación de un buffer de lisis/preservación que mantiene la integridad del RNA y es compatible con la PCR, eliminando la necesidad de purificación de los ácidos nucleicos.

METODOLOGÍA:

El diseño del buffer de lisis/preservación se basó en la información acerca de métodos de lisis celular, estabilidad de RNA en solución acuosa y requerimientos enzimáticos. La evaluación de la eficacia de la formulación se realizó mediante ensayos de qPCR y verificación de la integridad del RNA en gel de agarosa.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

Los ensayos de integridad del RNA muestran una protección a la degradación del RNA en muestras extraídas de células en cultivo tratadas con la formulación aquí presentada. El valor de Ct de 18s y β -actina se desplaza cinco unidades, en las muestras tratadas con la formulación diseñada por efecto de la dilución de la muestra. Reportamos el diseño de una solución que lisa la célula, preserva el RNA, y de manera notable, es compatible con las etapas posteriores de PCR.

REFERENCIAS:

1. Najafi, M. RNA Preservation and Stabilization. *Biochem Physiol* **2014**, 3, 1. <https://doi.org/10.4172/2168-9652.1000126>.



MICROORGANISMOS Y BIOTECNOLOGÍA

ILPC2-480

GENETICIN RESISTANCE ACQUIRED IN THE HUMAN PATHOGEN *Paracoccidioides* spp. BY MEANS PLASMID pCas9

Susana Torres^{1,2}, Oscar Mauricio Gómez^{1,2,3}, Angela María Lopez¹, Diana Patricia Tamayo¹, Orville Hernández^{1,2}, Juan Gmo McEwen^{1,4}.

¹ Cellular and Molecular Biology Unit; Corporación para Investigaciones Biológicas (CIB); Medellín, Colombia. ² MICROBA Research Group, School of Microbiology; Universidad de Antioquia; Medellín, Colombia. ³ GenomaCES, Universidad CES. Medellín, Colombia. ⁴ School of Medicine; Universidad de Antioquia; Medellín, Colombia.

sutorresmo@gmail.com

KEY-WORDS: *Paracoccidioides*, Geneticin G418, KanMX, selection marker

ABSTRACT: *Paracoccidioides* spp. is a thermo-dimorphic fungal human pathogen¹. The genetic manipulation with CRISPR/Cas9 technology for a functional analysis of its genes requires the use of suitable selection markers². We evaluated the susceptibility to Geneticin G418 antibiotic and the effectiveness of KanMX gene as a selectable marker in this pathogenic fungal.

METHODS: Susceptibility of *P. restrepiensis* ATCC60855 to G418 was determined by inhibiting yeast growth in BHI Medium with 1% glucose and dilutions of G418. A transformation protocol by electroporation was performed in individual cells with pCAS, following the recommendations of Wang2018³. Transformants cells were selected on BHI+G418 and confirmed by PCR assays.

RESULTS AND CONCLUSIONS: Our findings showed the minimal inhibitory concentration of geneticin in the *Paracoccidioides* strain ATCC60855 was 25 µg/mL. An electroporation protocol was established for efficient and stable transformation of *Paracoccidioides* yeast using 2µg of circular plasmid, getting 100 ± 25 UFC. Finally, we evaluated the mitotic stability after 3 consecutive cultures in the presence of G418 and we demonstrated the usefulness of the KanMX cassette for the selection of transformants in this fungus, and we proved their maintenance in the cells by PCR analysis. Due to trouble for use another marker selection like Hygromycin B, a big size gene, we propose the use of KanMX cassette and geneticin as a new selection marker for genetic modification strategies in the pathogen *Paracoccidioides* spp. including selection of mutants achieved implementing CRISPR/Cas9 technology.

REFERENCES:

1. Restrepo, A.; Tobón, A. M.; Gonzalez, A. *Paracoccidioides brasiliensis*. In *Mandell, Douglas, and Bennett's Principles and Practice of Infectious Diseases*; Elsevier: Philadelphia, 2020; p 321.
2. Jinek, M.; Chylinski, K.; Fonfara, I.; Hauer, M.; Doudna, J. A.; Charpentier, E. A Programmable Dual-RNA – Guided. *Science* (80-.). **2012**, 337 (August), 816–822.
3. Wang, P. Two Distinct Approaches for CRISPR-Cas9_Mediated Gene Editing in *Cryptococcus Neoformans* and Related Species. *mSphere* **2018**, 3 (3), 1– 9.



AISLAMIENTO Y DISCRIMINACIÓN MOLECULAR DE MICROORGANISMOS QUE INDUCEN LA PRECIPITACIÓN DE CARBONATO DE CADMIO DE UNA REGIÓN CACAOTERA DE COLOMBIA.

Juan Camilo Diez Marulanda, Pedro Filipe de Brito Brandão.
Universidad Nacional de Colombia.

jcdiezm@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: MICP, Cadmio(II), Biorremediación, Ureasa.

INTRODUCCIÓN: Recientemente, se ha propuesto el uso de bacterias ureolíticas por el método de precipitación de carbonatos inducida por microorganismos (MICP) como medida para remediar suelos contaminados con cadmio(II). El objetivo de este trabajo fue recuperar y caracterizar microorganismos MICP resistentes a Cd(II) presentes en suelos de Carmen del Chucurí, Santander.

MÉTODOS: i) Muestreo de suelo en El Carmen de Chucurí, Santander. ii) Aislamiento de microorganismos MICP y resistentes a cadmio(II). iii) Tinción de Gram. iv) Test ureasa cualitativo (TSB con urea/rojo fenol como indicador de cambio de pH). v) Discriminación molecular por SSCP. vi) Análisis de cristales por DRX y estereoscopia.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: A partir de muestras de suelo de cuatro diferentes fincas del municipio de El Carmen del Chucurí, Santander, se recuperaron 42 microorganismos entre los cuales hay aislados resistentes a cadmio(II) y capaces de realizar el proceso de MICP. Los microorganismos aislados mostraron una alta diversidad morfológica. Asimismo, 13 de ellos fueron reconocidos como bacterias Gram-positivas y 29 Gram-negativas. De 13 aislados ureasa-positivos, se pudieron discriminar 9 por análisis SSCP, sugiriendo que se recuperaron diferentes microorganismos MICP tolerantes a cadmio(II) de las muestras ambientales. El análisis por DRX mostró que los cristales precipitados por los aislados corresponden a calcita (carbonato de calcio). Por esta técnica no se encontró evidencia de la coprecipitación e inmovilización del cadmio(II) en la calcita.

REFERENCIAS:

1. Zhao, Y.; Yao, J.; Yuan, Z.; Wang, T.; Zhang, Y.; Wang, F. Bioremediation of Cd by strain GZ-22 isolated from mine soil based on biosorption and microbially induced carbonate precipitation. *Environ. Sci. Pollut. Res. Int.* 2017, 24, 372-380
2. Tamayo-Figueroa, D.; Castillo, E.; Brandão, P.F.B. Metal and metalloid immobilization by microbiologically induced carbonates precipitation. *World J. Microbiol. Biotechnol.* 2019, 35, 1-10.



Acilación enzimática de almidones de arroz usando aceite de semillas de gulupa como donador de ácido.
Alvaro Esteban Aldana Porras, Diego Fernando Montoya Yepes, Ángel Arturo Jiménez Rodríguez, Jonh Jairo Méndez Arteaga, Walter Murillo Arango.
Universidad del Tolima

wmurillo@ut.edu.co

PALABRAS CLAVES: Biotecnología, química verde, catálisis

El uso de subproductos de cadenas como arroz y pasifloras dentro de la química verde, permite mejorar los procesos de economía circular y genera valor agregado. Consecuentemente, se planteó obtener almidón modificado mediante el uso de un sistema con aceite fijo de Gulupa como donador de ácido y lipasas como catalizadores. Se empleó aceite de semillas de *Passiflora edulis* Sims. F. *edulis* y lipasa B de *Candida antarctica* para modificar almidón de arroz variedad Clearfield, Oryzica 1 y F60. Se determinaron propiedades funcionales, cristalinidad, forma, potencial Z, tamaño y la velocidad de degradación por ataque enzimático de polímeros nativos y modificados. El perfil de ácidos grasos de los almidones modificados (verificado por cromatografía de gases) cambia según la variedad de arroz, modificando las proporciones de los ácidos C14, C16 y C18 principalmente. Los almidones Clearfield, F60 y Oryzica 1 modificados aumentaron el contenido de ácidos grasos en 85%, 23% y 73%, respectivamente, obteniendo materiales con diferentes propiedades funcionales. Todos los polímeros presentaron carga superficial entre -41,6 y -58,9 mV. Además, en el tamaño, superficie y forma de los gránulos, los almidones nativos tienen una estructura dodecaédrica, sin embargo, los gránulos de los diferentes materiales modificados tienen una forma irregular. La velocidad de degradación se modifica dependiendo de la variedad de arroz, siendo más lenta en la variedad F60. Estos cambios impactan directamente la aplicabilidad de los materiales obtenidos, sus características presentan potenciales usos industriales, además, el proceso de modificación sin solvente del almidón genera ventajas económicas y ambientales.

REFERENCIAS:

1. Acevedo, L., Nieto, L., Sanchez, L. T., Pinzon, M. I., & Villa, C. Development of native and modified banana starch nanoparticles as vehicles for curcumin. *Internat. J. biological macromol.* 2018, 111, 498-504.
2. Montoya, D., Barbosa, L. O., Méndez, J., & Murillo, W. Morphological, Structural, and Functional Evaluation of Rice Starch Acylated in a System Catalyzed by the B-Lipase of *Candida antarctica*. *Starch-Stärke.* 2020, 72, 11-12.
3. Ahmad, M., Mudgil, P., Gani, A., Hamed, F., Masoodi, F. A., & Maqsood, S. Nano-encapsulation of catechin in starch nanoparticles: Characterization, release behavior and bioactivity retention during simulated in-vitro digestion. *Food chem.* 2019, 270, 95-104.



OPTIMIZACIÓN DEL MÉTODO DE MICRODILUCIÓN EN PLACA PARA EVALUAR LA ACTIVIDAD ANTIBACTERIANA *IN VITRO* UTILIZANDO MICROVOLÚMENES

Juliana Franco-Castrillón¹, Lily Johana Toro Segovia¹, Diana Carolina Henao¹, Germán Alberto Téllez¹, Jhon Carlos Castaño Osorio¹.

¹GYMOL, Centro de investigaciones biomédicas de la Universidad del Quindío.

julianafrancoastrillon@gmail.com

PALABRAS CLAVE: Microdilución, MIC, Resazurina, Fluorometría.

Buscar nuevas sustancias antimicrobianas es necesario debido a la creciente resistencia a los antimicrobianos (RAM). No obstante, estas investigaciones suelen ser costosas y laboriosas, por lo tanto es necesario desarrollar nuevas técnicas experimentales. Así, en este trabajo se optimizaron las condiciones para evaluar la actividad antibacteriana *in vitro* utilizando microvolúmenes. Se realizaron microdiluciones en placa con resazurina de ampicilina frente a *E. coli* (DH10B, ATCC25922) y se estudiaron 4 variables: concentración de resazurina, tiempo de incubación, método de lectura (espectrofotometría, fluorometría) y volumen final de microdilución (100, 50, 40, 25, 10µL). Se validó la técnica testeando péptidos antimicrobianos. El volumen final de evaluación en la técnica de microdilución en placa con resazurina puede reducirse de 100µL a 50 µL en placas de 96 pozos y a 25µL en placas de 384 pozos sin esperar grandes variaciones en la Concentración Mínima Inhibitoria (MIC) del compuesto (ampicilina). La resazurina se comportó mejor a 44µM. Las mediciones deben tomarse después de incubar la placa con resazurina 90 minutos y la fluorometría fue más fácil de analizar, más sensible, estable, selectiva y precisa que la espectrofotometría, sin embargo, ambos métodos pueden ser usados para evaluar la actividad antibacteriana cuantitativamente. Finalmente, se validó la técnica optimizada probando la actividad antibacteriana de péptidos antimicrobianos, el volumen de evaluación para estas microdiluciones se logró disminuir de 50µL a 25µL sin observar variaciones en la MIC de los péptidos, al disminuir el volumen de la microdilución también disminuyeron considerablemente los costos de evaluación para estos compuestos.

REFERENCIAS:

1. Wiegand, I.; Hilpert, K.; Hancock, R. E. W. Agar and Broth Dilution Methods to Determine the Minimal Inhibitory Concentration (MIC) of Antimicrobial Substances. *Nat. Protoc.* 2008, 3 (2), 163–175. <https://doi.org/10.1038/nprot.2007.521>.
2. Balouiri, M.; Sadiki, M.; Ibsouda, S. K. Methods for *in Vitro* Evaluating Antimicrobial Activity: A Review. *J. Pharm. Anal.* 2016, 6 (2), 71–79.
3. Ali-Vehmas, T.; Louhi, M.; Sandholm, M. Automation of the Resazurin Reduction Test Using Fluorometry of Microtitration Trays. *J. Vet. Med. Ser. B* 1991, 38 (1-10), 358– 372.



LA PROTEÍNA DEL CUELLO DE LAS ROPTRIAS 4 (RON4) DE *PLASMODIUM FALCIPARUM* CONTIENE REGIONES DE UNIÓN A ERITROCITOS Y HEPATOCITOS HUMANOS.

Fredy Alexander Pulido Quevedo^{1,2}, Gabriela Arévalo Pinzón³, Manuel Alfonso Patarro^{2,4,5}.

¹Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Medicina, Programa Maestría en Bioquímica, Bogotá, Colombia. ²Fundación Instituto de Inmunología de Colombia (FIDIC), Bogotá, Colombia. ³ Universidad Antonio Nariño, Facultad de Ciencias, Departamento de Biología, Bogotá, Colombia. ⁴ Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Medicina, Bogotá, Colombia. ⁵ Universidad Santo Tomás, División de Ciencias de la Salud, Bogotá, Colombia.

fpulido@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Malaria, hospedero-patógeno, *Plasmodium falciparum*.

INTRODUCCIÓN: *PfRON4* es una proteína que participa en el proceso de invasión tanto en el estadio de merozoito¹ como en esporozoito², demostrando su importancia como antígeno candidato a vacuna. Sin embargo, no se conocen las regiones claves de este antígeno durante el proceso de invasión a células hospederas.

MÉTODOS

i) Síntesis de péptidos derivados de la región conservada de *PfRON4*. ii) Ensayos de interacción entre péptidos de RON4 y eritrocitos y HepG2. iii) Ensayos de inhibición de la invasión de la cepa FCB2 de *Plasmodium falciparum* con péptidos de alta capacidad de unión (HABPs).

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

Se sintetizaron 35 péptidos de 20 residuos de longitud derivados de la región conservada de la proteína *PfRON4*. Cinco péptidos (42477, 42479, 42480, 42505 y 42513) presentaron actividades de unión a eritrocitos superiores al 2% con kD en el rango nanomolar, mientras que dos péptidos (42477 y 42480) se unieron específicamente a la membrana de HepG2 con kD en el rango micromolar. La unión de los péptidos a eritrocitos fue sensible al tratamiento enzimático con tripsina y quimiotripsina. La unión de los péptidos a las células hepáticas fue sensible al tratamiento enzimático con las enzimas Heparinasa I condroitinasa ABC. Los resultados de este trabajo describen por primera vez las regiones específicas de unión de un antígeno que ha sido mostrado por ser crítico en el proceso de interacción del parásito a sus células hospederas y sugieren el uso de estas regiones como blancos de acción terapéuticos multifase.

REFERENCIAS:

1. Weiss, G. E.; Gilson, P. R.; Taechalerpaisarn, T.; Tham, W.-H.; de Jong, N. W.; Harvey, K. L.; Fowkes, F. J.; Barlow, P. N.; Rayner, J. C.; Wright, G. J. J. P. P., Revealing the sequence and resulting cellular morphology of receptor-ligand interactions during *Plasmodium falciparum* invasion of erythrocytes. **2015**, *11* (2), e1004670.
2. Nozaki, M.; Baba, M.; Tachibana, M.; Tokunaga, N.; Torii, M.; Ishino, T. J. M., Detection of the rhoptry neck protein complex in *Plasmodium* sporozoites and its contribution to sporozoite invasion of salivary glands. **2020**, *5* (4).



Producción nacional de un kit One Step con las enzimas recombinantes MMLV Retrotranscriptasa y una Tth ADN polimerasa para uso en la técnica RT-PCR.

Paula Andrea Pedroza¹, Isaura Patricia Torres¹, Óscar Mauricio Gómez¹, Rubén Manrique¹, Juan Esteban Gallo¹
GenomaCES Biotechnologies, Laboratorio especializado en Biología Molecular de la Universidad CES, Medellín,
Colombia.

ppedroza@ces.edu.co

PALABRAS CLAVE: Retrotranscriptasa, ADN polimerasa, RT-PCR.

Introducción: La reacción en cadena de la polimerasa con transcripción inversa en tiempo real (RT-PCR) es utilizada para analizar la expresión génica y la amplificación del ADN^{1,2} a partir de ARN. El objetivo de este trabajo fue establecer un protocolo escalable de producción de un kit One Step para RT-PCR.

Metodología: Se obtuvieron clones de *E. coli* productores de las enzimas MMLV-Retrotranscriptasa y TthADN polimerasa. Se realizaron fermentaciones en 500 mL de medio LB. La purificación se hizo mediante cromatografía de afinidad. La pureza fue evaluada por SDS-PAGE. Las proteínas fueron cuantificadas, mezcladas y su actividad fue medida.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Se obtuvieron clones de *E. coli* capaces de expresar MMLV-Retrotranscriptasa y Tth ADN polimerasa de manera soluble y separada. Se estableció un protocolo de purificación en condiciones no desnaturizantes, obteniendo proteínas de una pureza $\geq 95\%$ visible en SDS PAGE. Se recuperaron 260000 U de MMLV-Retrotranscriptasa y 10500 U de Tth ADN polimerasa a partir de la biomasa recolectada. Los ensayos de RT-PCR en tiempo real, usando la preparación *in house* mostraron altos valores de eficiencia, precisión y reproducibilidad con genes diana, los cuales también fueron comparables a los obtenidos con un kit comercial. El kit One Step fue probado con muestras de pacientes de COVID19, logrando detectar la presencia del virus en muestras positivas. En conclusión, logramos producir de manera exitosa un kit One Step RT-PCR el cual es de uso rápido y posee una alta sensibilidad en la detección de ARN.

REFERENCIAS:

1. Wacker, M. J.; Godard, M. P. Analysis of One-Step and Two-Step Real-Time RT-PCR Using SuperScript III. *J. Biomol. Tech. JBT* **2005**, *16* (3), 266–271.
2. Bao, J.; Li, L.; Wang, Z.; Barrett, T.; Suo, L.; Zhao, W.; Liu, Y.; Liu, C.; Li, J. Development of One-Step Real-Time RT-PCR Assay for Detection and Quantitation of Peste Des Petits Ruminants Virus. *J. Virol. Methods* **2008**, *148* (1–2), 232–236. <https://doi.org/10.1016/j.jviromet.2007.12.003>.



BIOCOMPATIBILY-RELATED PROPERTIES OF CHITOSAN/HEPARIN-CROSSLINKED POLYURETHANES FOR BIOMEDICAL APPLICATIONS

Yomaira Lisnedy Uscategui Maldonado, Luis Eduardo Díaz Barrera, Manuel Fernando Valero Valdivieso, Ericsson Coy-Barrera.
Universidad Militar Nueva Granada

yomairausma@gmail.com

PALABRAS CLAVES: polyurethanes, heparin, chitosan, biomaterials

INTRODUCCIÓN:

Chitosan is a renewable biopolymer having properties such as biocompatibility, biodegradability, antibacterial activity, non-toxicity¹. Heparin is widely used to improve the biomaterial hemocompatibility due to its well-known antithrombin activity². The aim of the present study focused on characterizing the biological properties of synthesized chitosan/heparin-incorporated polyurethanes for possible use as biomaterials.

MÉTODOS:

Polyurethanes were synthesized from castor oil and isophorone diisocyanate, adding chitosan and heparin. Biological properties of resulting polyurethanes were *in-vitro* characterized through antibacterial activity against *Escherichia coli* and methicillin-resistant *Staphylococcus aureus*, and cytotoxicity test using the colorimetric assay-MTT over L-929 (mouse embryonic fibroblast) and human primary dermal fibroblast cell lines.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES:

By using cross-linked polymers, such as polyurethane, better incorporation of heparin or chitosan into the polymer matrix is achieved due to the higher crosslinking degree. Polyurethane functionalization by the addition of natural polymers such as chitosan or heparin can improve biological properties, making them desirable materials for biomedical applications. Degradation in PBS after 90 days presented percentages lower than 1%. Chitosan and heparin additions increased the material degradation percentage. Additionally, synthesized materials promoted lower bacterial growth than negative control (i.e., bacteria without exposure to test polymers), indicating that they have antimicrobial activity. The results showed that these polyurethanes offer a competitive advantage over other materials. Cell viability was found to be higher than 80% indicating that the polyurethane is not toxic³ and be exploited to design biomaterials such as cardiovascular graft in further studies.

REFERENCIAS:

1. Torkaman, S.; Rahmani, H.; Ashori, A.; Najafi, S. H. M. Modification of Chitosan Using Amino Acids for Wound Healing Purposes: A Review. *Carbohydr. Polym.* **2021**, *258* (November 2020), 117675. <https://doi.org/10.1016/j.carbpol.2021.117675>.
2. Wang, J.; Liu, Z.; Qiu, M.; He, C. Heparin-Mimicking Semi-Interpenetrating Composite Membrane with Multiple Excellent Performances for Promising Hemodialysis. *J. Memb. Sci.* **2021**, *618* (May 2020), 118740. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2020.118740>.
3. Shahrousvand, M.; Sadeghi, G. M. M.; Shahrousvand, E.; Ghollasi, M.; Salimi, A. Superficial Physicochemical Properties of Polyurethane Biomaterials as Osteogenic Regulators in Human Mesenchymal Stem Cells Fates. *Colloids Surfaces B Biointerfaces* **2017**, *156*, 292–304. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfb.2017.04.059>.

Estudio del metabolismo de *Limosilactobacillus reuteri* ATCC 53608 en presencia y en ausencia de reuterina como agente tóxico

Sandra Janneth Santos Rocha, Rigoberto Rios Estepa, Fernando Orozco Sanchez, Maritza Ocampo, Sebastian Hernandez. Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellín, Facultad de Ciencias, Medellín Colombia. Carval de Colombia, Cali. Colombia

sajsantosro@unal.edu.co

Limosilactobacillus reuteri es una bacteria acidoláctica heterofermentativa empleada ampliamente por sus propiedades probióticas. Este microorganismo ha despertado gran interés por ser empleado en la producción de compuestos químicos y combustibles ecológicos, a partir de fuentes económicas como el glicerol. La reuterina (3-Hidroxiopropanaldehído, 3-HPA), es un aldehído precursor metabólico de moléculas utilizadas en la síntesis de una diversidad de compuestos, con gran demanda y aplicabilidad en la biosíntesis de ácido 3-hidroxiopropiónico y el 1,3-propanediol, empleados en la formación de polímeros, resinas, plásticos, entre otros. Una de las limitantes que se tiene en la síntesis de reuterina es su toxicidad a nivel celular y su afectación en la actividad enzimática, limitando su producción y generando bajos rendimientos. Así, se han implementado estrategias para disminuir el efecto tóxico y aumentar su producción. El metabolismo de reuterina depende del sistema enzimático codificado en el operón *pdu*. La expresión de los genes asociados constituye una de las áreas de estudio más activas, y con ellas, el rol protagónico que puedan tener moléculas exógenas que actúan como atrapanes de reuterina, evitando así su acumulación y por ende su toxicidad. De esta manera, es importante evaluar el efecto de la adición individual de moléculas atrapanes de reuterina, y la eventual sinergia que pueda existir entre ellas, sobre el metabolismo celular y los genes del operón *pdu* involucrados.

En la presente investigación se pretende estudiar el metabolismo de *L. reuteri* ATCC 53608 en presencia y en ausencia de atrapanes que regulan el efecto tóxico de la reuterina, se determinaron inicialmente las condiciones de producción de biomasa de *L. reuteri* ATCC 53608, alcanzando 8.5 g/L. Igualmente, definió una metodología para la producción de reuterina, donde se estandarizaron variables de cultivo como concentración de glicerol (200 mM), de biomasa (30 g/L) y la generación de un ambiente anaerobio. Una vez definidos y estandarizados los diferentes parámetros de cultivo, se alcanzó una concentración de reuterina máxima de 70 mM. Además, se reporta el efecto del uso de moléculas atrapanes como bisulfito de sodio, carbohidrazida y semicarbazida, y su incidencia en la generación de escenarios metabólicos en los cuales se obtiene la más alta acumulación de reuterina, como metabolito de interés industrial.

Entender los mecanismos de concentración de reuterina en este microorganismo por medio de los atrapanes y cómo afecta su fisiología celular y actividad enzimática; puede abrir las puertas a la exploración de soluciones probióticas para humanos y animales, además de la producción industrial de precursores químicos de alto valor.

REFERENCIAS:

1. Dishisha, T., Pereyra, L. P., Pyo, S.-H., Britton, R. A. (2014). Flux analysis of the *Lactobacillus reuteri* propanediol-utilization pathway for production of 3-hydroxypropionaldehyde, 3-hydroxypropionic acid and 1,3-propanediol from glycerol. *Microbial Cell Factories*, 13(1).
2. Sardari, R. R. R., Dishisha, T., Pyo, S.-H., & Hatti-Kaul, R. (2014). Semicarbazide-functionalized resin as a new scavenger for in situ recovery of 3-hydroxypropionaldehyde during biotransformation of glycerol by *Lactobacillus reuteri*. *Journal of Biotechnology*, 192, 223–230.
3. Stevens, M. J. a., Vollenweider, S., Mertes, P., & Lacroix, C. (2013). Bisulfite as scavenger for enhanced biotechnological production of 3-hydroxypropionaldehyde by *Lactobacillus reuteri*. *Biochemical Engineering Journal*, 79, 239–245.

ESTUDIO DEL METABOLISMO DE *Limosilactobacillus reuteri* ATCC 53608 EN PRESENCIA Y EN AUSENCIA DE REUTERINA COMO AGENTE TÓXICO.

Sandra Janneth Santos Rocha¹, Rigoberto Rios Estepa, Fernando Orozco Sanchez, Maritza Ocampo, Sebastian Hernandez.

¹Universidad Nacional de Colombia, Sede Medellin, Facultad de Ciencias, Medellin Colombia. Carval de Colombia, Cali. Colombia

sajsantosro@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: reuterina, atrapante, probiotico, pdu.

Limosilactobacillus reuteri es una bacteria acidoláctica heterofermentativa empleada ampliamente por sus propiedades probióticas. Este microorganismo ha despertado gran interés por ser empleado en la producción de compuestos químicos y combustibles ecológicos, a partir de fuentes económicas como el glicerol. La reuterina (3-Hidroxiopropanaldehído, 3-HPA), es un aldehído precursor metabólico de moléculas utilizadas en la síntesis de una diversidad de compuestos, con gran demanda y aplicabilidad en la biosíntesis de ácido 3-hidroxi propionico y el 1,3-propanediol, empleados en la formación de polímeros, resinas, plásticos, entre otros. Una de las limitantes que se tiene en la síntesis de reuterina es su toxicidad a nivel celular y su afectación en la actividad enzimática, limitando su producción y generando bajos rendimientos. Así, se han implementado estrategias para disminuir el efecto tóxico y aumentar su producción. El metabolismo de reuterina depende del sistema enzimático codificado en el operón *pdu*. La expresión de los genes asociados constituye una de las áreas de estudio más activas, y con ellas, el rol protagónico que puedan tener moléculas exógenas que actúan como atrapantes de reuterina, evitando así su acumulación y por ende su toxicidad. De esta manera, es importante evaluar el efecto de la adición individual de moléculas atrapantes de reuterina, y la eventual sinergia que pueda existir entre ellas, sobre el metabolismo celular y los genes del operón *pdu* involucrados.

En la presente investigación se pretende estudiar el metabolismo de *L. reuteri* ATCC 53608 en presencia y en ausencia de atrapantes que regulan el efecto tóxico de la reuterina, se determinaron inicialmente las condiciones de producción de biomasa de *L. reuteri* ATCC 53608, alcanzando 8.5 g/L. Igualmente, definió una metodología para la producción de reuterina, donde se estandarizaron variables de cultivo como concentración de glicerol (200 mM), de biomasa (30 g/L) y la generación de un ambiente anaerobio. Una vez definidos y estandarizados los diferentes parámetros de cultivo, se alcanzó una concentración de reuterina máxima de 70 mM. Además, se reporta el efecto del uso de moléculas atrapantes como bisulfito de sodio, carbohidrazida y semicarbazida, y su incidencia en la generación de escenarios metabólicos en los cuales se obtiene la más alta acumulación de reuterina, como metabolito de interés industrial.

Entender los mecanismos de concentración de reuterina en este microorganismo por medio de los atrapantes y cómo afecta su fisiología celular y actividad enzimática; puede abrir las puertas a la exploración de soluciones probióticas para humanos y animales, además de la producción industrial de precursores químicos de alto valor.

REFERENCIAS:

1. Dishisha, T., Pereyra, L. P., Pyo, S.-H., Britton, R. A. (2014). Flux analysis of the *Lactobacillus reuteri* propanediol-utilization pathway for production of 3-hydroxypropionaldehyde, 3-hydroxypropionic acid and 1,3-propanediol from glycerol. *Microbial Cell Factories*, 13(1)
2. Sardari, R. R. R., Dishisha, T., Pyo, S.-H., & Hatti-Kaul, R. (2014). Semicarbazide-functionalized resin as a new scavenger for in situ recovery of 3-hydroxypropionaldehyde during biotransformation of glycerol by *Lactobacillus reuteri*. *Journal of Biotechnology*, 192, 223–230.
3. Stevens, M. J. a., Vollenweider, S., Mertes, P., & Lacroix, C. (2013). Bisulfite as scavenger for enhanced biotechnological production of 3-hydroxypropionaldehyde by *Lactobacillus reuteri*. *Biochemical Engineering Journal*, 79, 239–245.



SLPC2-688

Resistencia y elementos genéticos móviles en aislamientos de *Salmonella Typhimurium* de origen clínico Colombianos.

Nancy Yaneth Flórez-Delgado^{1,2}, Lucy Angeline Montaña¹, José Miguel Villarreal³, Magdalena Wiesner¹.

¹ Grupo de Microbiología, Instituto Nacional de Salud, Avenida calle 26 No. 51-20 - Zona 6 CAN. Bogotá, D.C., Colombia.

² Doctorado en Ciencias de la Salud, Facultad de Medicina, Universidad Antonio Nariño, Calle 58a # 37 – 94, Bogotá, D.C., Colombia.

³ Grupo de investigación en enfermedades infecciosas, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C., Colombia.

nflorez@ins.gov.co

PALABRAS CLAVE: Salmonella, Integrones, Transposones, Plásmidos.

INTRODUCCIÓN.

En el mundo, Salmonella es la causa de ETA y EDA¹. El incremento de su resistencia representa un problema de interés mundial². La emergencia y dispersión de *S. Typhimurium* resistente³, puede explicarse por la adquisición y movilización dentro o entre moléculas de ADN de elementos genéticos móviles. Métodos. Se analizaron 30 aislamientos clínicos de *S. Typhimurium*, 22 de hemocultivo y 8 de fuentes no invasivas. La región que rodea a 9 tipos de integrones de clase 1 (IntI1) previamente identificados se analizó por WGS. La relación filogenética se estableció con análisis de MLST y SNP.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES.

Los aislamientos analizados corresponden a la secuencia tipo ST19. Se obtuvieron varios tipos de integrones de clase 1. Cuatro de ellos están asociados principalmente con hemocultivo y corresponden a variantes de la SGI1 de *S. Typhimurium* DT104, los cuales sugieren un mecanismo de dispersión clonal. El integrón predominante en Colombia, obtenido en aislamientos de todas las fuentes estudiadas, se asoció con el transposón Tn21 y posiblemente es transferido horizontalmente por el plásmido IncA/C. Los resultados muestran que en Colombia la dispersión de los IntI1 y de sus determinantes de resistencia está relacionada con elementos genéticos móviles que contribuirían con la diseminación de las resistencias a los antibióticos entre las cepas *S. Typhimurium*, y muy probablemente entre otras especies bacterianas que circulan en el país..

INSTITUCIONES FINANCIADORAS.

COLCIENCIAS-SIGP 210471250745. Nancy Yaneth Flórez-Delgado es apoyada por el Acuerdo especial de cooperación científica y tecnológica 014/14 de 2014 entre la Universidad Antonio Nariño y el Instituto Nacional de Salud. 10,000 Salmonella Genomes Project.

REFERENCIAS:

1. World Health Organization. WHO estimates of the global burden of foodborne diseases: foodborne disease burden epidemiology reference group 2007-2015, 2015; p. 255.
2. Centers for Disease Control and Prevention. Antibiotic Resistance Threats in the United States (2019 AR Threats Report); U.S. Department of Health and Human Services, CDC, 2019.
3. Wang, X.; Biswas, S.; Paudyal, N.; Pan, H.; Li, X.; Fang, W.; Yue, M. Antibiotic resistance in salmonella typhimurium isolates recovered from the food chain through national antimicrobial resistance monitoring system between 1996 and 2016. *Front. Microbiol.* 2019, 10, 985 DOI: 10.3389/fmicb.2019.00985.



SLPC2-717

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DEL LIGANDO N-BENCILANILINADITIOCARBAMATO (DTC) Y COMPUESTOS DE COORDINACIÓN A PARTIR DE Cu²⁺, Ni²⁺ Y Pd²⁺ CON POSIBLE ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA.

Edwin Florez Lopez, Laura Andrea Rojas Ramirez, Richard Fernando D'vries Arturo, David Morales Morales.
Universidad Santiago de Cali

edwin.florez00@usc.edu.co

PALABRAS CLAVE: Ditiocarbamatos, compuestos de coordinación.

En este trabajo se sintetizaron una serie de compuestos de coordinación a partir del ligando N-bencilanilnaditiocarbamatoy diferentes metales de transición como Cu²⁺, Ni²⁺ y Pd²⁺. Los compuestos obtenidos se caracterizaron por medio de técnicas espectroscópicas como FT IR, RMN ¹H y ¹³C, y espectrometría de masas. A partir de un estudio espectroscópico por medio de ultravioleta visible y a partir del análisis termogravimétrico (TGA/DSC) se propone que el dtc se encuentracordinado al metal de forma bidentada, sugiriendo una geometría cuadrado planar para los iones metálicos Cu²⁺, Ni²⁺ y Pd²⁺ y se propuso las formulas empíricas [Cu(dtc)₂.2.5H₂O] [Ni(dtc)₂.6.5H₂O] y [Pd(dtc)₂], determinando que los dos primeros compuestos presentan moléculas de agua en su estructura. Finalmente se obtuvo una referencia sobre la actividad antimicrobiana de los compuestos de cobre y paladio en solución con la cepa ATCC *E.coli* dónde se obtuvieron resultados positivos inhibiendo el crecimiento de esta bacteria.

REFERENCIAS:

1. Coucouvanis, D. The Chemistry of the Dithioacid and 1, 1-Dithiolate Complexes, 1968-1977. 2007, 26, 301–469.
2. Hogarth, G. Metal-Dithiocarbamate Complexes: Chemistry and Biological Activity. Mini-Reviews Med. Chem. 2012, 12 (12), 1202–1215
3. Ferreira, I. P.; De Lima, G. M.; Paniago, E. B.; Takahashi, J. A.; Pinheiro, C. B. Synthesis, Characterization and Antifungal Activity of New Dithiocarbamate-Based Complexes of Ni(II), Pd(II) and Pt(II). Inorganica Chim. Acta 2014, 423 (PA), 443–449



SLPC2-720

EVALUACIÓN DEL USO DE CASCARILLA DE ARROZ, POLIETILENO Y POLIPROPILENO EN LA PRODUCCIÓN DE POSTES PARA USO AGROPECUARIO

Justein Melissa Baller, Alejandro Ríos Castiblanco.
Universidad de América

alejandro01ing@gmail.com

PALABRAS CLAVES: extrusión, fibra vegetal, polímeros, termoplásticos.

El objetivo de este proyecto fue desarrollar un biomaterial compuesto a partir de plásticos reciclados como polietileno y polipropileno, también haciendo uso de una fibra vegetal (cascarilla de arroz), para la elaboración de un poste de uso agropecuario. Para determinar las propiedades del material se caracterizaron las materias primas utilizadas, para el caso del polipropileno y polietileno se realizaron pruebas de combustión, presencia de halógeno, solubilidad, densidad y espectrofotometría infrarroja. Con respecto a la cascarilla de arroz se realizaron pruebas de humedad, cenizas, densidad y análisis bromatológico. Las propiedades mecánicas fueron evaluadas a través de ensayos de tracción y compresión por medio de las normas ASTM D-638 y D-695 respectivamente, determinando cuál de las proporciones entre los plásticos y la fibra vegetal (10%,30%,40%) presentó las mejores propiedades mecánicas para la elaboración del producto. Se obtuvo un material con buena propiedad mecánica y viable para la fabricación de postes de uso agropecuario utilizandomateriales reciclados y desechos orgánicos.

REFERENCIAS:

1. CENTRO NACIONAL DE CONSERVACIÓN Y RESTAURACIÓN . (2014). Prueba de Beilstein: Examen de Materiales Orgánicos y Poliméricos para Detectar la Presencia de Cloro, con Ejemplos de los Productos Probados. didam, 4.
2. DANE, (2015). Encuesta Ambiental Industrial Resultados consolidados. BOGOTÁ D.C.
3. Jaider, A. S. (2009). Alternativas de aprovechamiento de la cascarilla de arroz en Colombia. SINCELEJO, Colombia: Universidad de Sucre.
4. KIRK R.S., Sawyer, R y Egan H. "Composición y Análisis de Alimentos de Pearson". Segunda edición. Editorial CECSA. México 1996.
5. Mercedes, R. P. (2008). Los materiales plásticos en tecnología industrial I: prácticas de identificación. Revista digital sociedad de la información, 9. Santacoloma-Varón, L. E. (2014). ANÁLISIS DE FORRAJES DE VAN SOEST.



SALUD HUMANA & ANIMAL

ILMC2-693

NANOCARRIERS ENCAPSULATED TRITERPENES TO TREAT OBESITY AND TYPE 2 DIABETES MELLITUS

Elkin Escobar-Chaves^{1,2}, Maritza Fernández², Luis Fernando Echeverri³, Diana Lorena Muñoz⁴, Sergio Acin^{1,4}, Jahir Orozco², Norman Balcázar^{1,4}.

¹Molecular Genetics Group. Universidad de Antioquia. A.A. 1226. Medellín, Colombia. ²Max Planck tandem group in nanobioengineering. Universidad de Antioquia. Medellín 050010, Colombia. ³Group of Organic Natural Product Chemistry, Faculty of Natural and Exact Sciences, Universidad de Antioquia. ⁴Department of physiology and biochemistry, school of medicine. Universidad de Antioquia. A.A. 1226. Medellín, Colombia.

elkin.escobar@udea.edu.co

INTRODUCTION: Obesity, Inflammation, Nanoparticles, Triterpenes 350million people worldwide are estimated to suffer type 2 diabetes mellitus (T2DM) it by the year 2025. This work aimed to develop a polymeric nanocarrier (PN) to transport triterpene-rich fractions orally through the gastrointestinal tract in pre diabetic mice and control the effects of obesity and T2DM to overcome such limitations.

METHODOS: The PN was formulated using polylactic-co-glycolic acid (PLGA) polymer encapsulating triterpenes, were self-assembled by the solvent evaporation method. Size, Z potential, polydispersity index, encapsulation efficiency, load capacity, and drug release kinetics were measured. In-vivo assay in C57BL/6 mouse model, measurement of diabetic condition, metabolic biomarkers were assessed. H GIM was evaluated.

RESULTS AND CONCLUSIONS: We developed a PN with media size of 165nm (P<0.05) ZP of -35,1 and PDI 0,18, 98% EE, and 3,5% LC. The release kinetics show 80% of drug released in the first 6 hours and up to 85% 72 hours after, the human gastrointestinal model (H-GIM) showed a similar and progressive release of triterpenes, lower in the stomach reactor and up to 75% in the intestine. The in-vivo assay demonstrated that the treatment with PN decreased the weight and glucose measured in blood. These PN administrated orally show the potential to decrease the effects of pre-diabetes and obesity in mice and open the way towards to developing new strategies and therapeutic agents using natural products combined with nanobiotechnology to control T2DM and obesity.

REFERENCES:

1. International Diabetes Federation Report, 8Th edition, 2017
2. Guillen, A. Granados, S. Rivas, K. Estrada, O. Echeverri, L. Balcazar, N. Antihyperglycemic Activity of Eucalyptus tereticornis in Insulin-Resistant Cells and a Nutritional Model of Diabetic Mice. Advances in Pharmacological Sciences. 418673. 2015.



SLMC2-100

DISEÑO RACIONAL, SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE COMPUESTOS INHIBIDORES SELECTIVOS DE ACETILCOLINESTERASAS

Lorena Camargo Ayala, Luis Prent-Peñaloza, Margarita Gutierrez.
Universidad Distrital.

loreca17@gmail.com

PALABRAS CLAVE: diseño racional, acetilcolinesterasas, inhibidores, Alzheimer

La enfermedad de Alzheimer (EA) afecta millones de personas llegando a ser incapacitante, tiene efectos sobre la memoria, la capacidad cognitiva y genera deterioro de la capacidad intelectual. Una hipótesis aceptada ha llevado a buscar tratamiento a través de la inhibición de las colinesterasas (ChEs); acetilcolinesterasa (AChE) y butirilcolinesterasa (BChE).

Estudios recientes han analizado compuestos con actividades prometedoras frente a las AChE. En un trabajo previo, nuestro grupo reportó un compuesto que mostró actividad selectiva frente a BChE. Por esta razón, con base en análisis *in-silico* proponemos una serie de nuevos compuestos con potencial actividad frente a las ChEs.

Se ha planteado que las ChEs están involucradas con la disminución de la acetilcolina (ACh). Dentro de este contexto, los inhibidores de BChE han tomado un papel relevante, debido a que se ha definido que en la progresión de la EA la ACh es hidrolizada principalmente por BChE. Algunas características comunes estructurales en compuestos activos sobre ChEs han mostrado que éstos contienen funciones como: aminas, amidas, anillos aromáticos y/o heterociclos. Por otra parte, las herramientas computacionales han permitido sostener y profundizar características moleculares mediante el uso de métodos teóricos que permiten analizar e interpretar resultados experimentales y orientar de forma racional el diseño de nuevos compuestos capaces de interactuar con un receptor. El propósito principal de este estudio es obtener por diseño racional y síntesis orgánica una serie de nuevos compuestos desde sistemas moleculares previamente estudiados en nuestro grupo con el objetivo de potenciar la capacidad de inhibir ChEs.

REFERENCIAS:

1. S.D. Roughley, A.M. Jordan, The medicinal chemist's toolbox: An analysis of reactions used in the pursuit of drug candidates, *J. Med. Chem.* 54 (2011) 3451–3479. <https://doi.org/10.1021/jm200187y>.
2. Zhao, T.; Ding, K. M.; Zhang, L.; Cheng, X. M.; Wang, C. H.; Wang, Z. T. Acetylcholinesterase and Butyrylcholinesterase Inhibitory Activities of β -Carboline and Quinoline Alkaloids Derivatives from the Plants of Genus *Peganum*. *J. Chem.* **2013**, 2013. <https://doi.org/10.1155/2013/717232>.
3. D. Munoz-Torrero, Acetylcholinesterase Inhibitors as Disease-Modifying Therapies for Alzheimers Disease, *Curr. Med. Chem.* 15 (2008) 2433–2455. <https://doi.org/10.2174/092986708785909067>.
4. Laboratorio de Síntesis Orgánica y Actividad Biológica de la Universidad de Talca. Proyectos Fondecyt 1200531 y Beca Nacional de Doctorado ANID 2019 Folio N ° 21190020.



SLMC2-406

Identificación de metabolitos de plantas medicinales como adyuvantes en la terapia del hepatocarcinoma celular mediante análisis *in silico* empleando como diana terapéutica la mitocondria.

Liseth Paola T. Bohórquez, Luis C. Vesga, Stelia C. Mendez-Sanchez.

Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología, Universidad Industrial de Santander, Vicerrectoría de investigación y extensión UIS, Ministerio de ciencia Tecnología e innovación.

liseth2162165@correo.uis.edu.co

PALABRAS CLAVE: Mitocondria, Docking, Cáncer, Metabolitos.

Según la OMS, en el 2020 el cáncer provocó 9.958.133 muertes en el mundo, siendo el cáncer de hígado el tercer tipo de cáncer con mayor mortalidad, debido a esto, surge la necesidad de identificar nuevos compuestos adyuvantes que puedan potencializar los efectos de las terapias convencionales.

Usando la interfaz Maestro del paquete de Schrödinger Drug Discovery suite for molecular modeling (2020-4), se realizó un screening virtual de una base de datos con 229 metabolitos, determinando su posible afinidad con el complejo I (PDBID:5XTD, resolución 3,70Å) y el complejo III (PDBID:5XTE, resolución 3.40Å).

Los resultados obtenidos del docking molecular sugieren que los compuestos quercetina, ácido elágico y ácido gálico con docking score de -6,57, -4,15 y -4,57, respectivamente, presentan interacciones pi-pi y puente de hidrogeno con los residuos Phe 101, Glu 208, Lys 226 y Phe 229, del sitio de oxidación del NADH en el complejo I, los cuales también interactúan con esta molécula. Por otro lado, los compuestos ácido elágico y carvacrol con docking score de -9,35 y -5,22, respectivamente, presentan interacciones tipo puente de hidrogeno con los residuos Asn 255 y Thr 336 de los sitios de reducción Qo y Qi del ubiquinol, en el complejo III. De esta forma, se espera que los compuestos quercetina, ácido gálico, ácido elágico, carvacrol y sus interacciones con los residuos importantes identificados en esta investigación, sean capaces de inhibir la cadena respiratoria mitocondrial e inducir la muerte celular en células de hepatocarcinoma (HepG2).

REFERENCIAS:

1. GLOBOCAN. 2020: Nuevos datos mundiales sobre el cáncer.
2. Gueguen, N.; Desquret-Dumas, V.; Leman, G.; Chupin, S.; Baron, S.; Nivet Antoine, V.; Vessières, E.; Ayer, A.; Henrion, D.; Lenaers, G.; Reynier, P.; Procaccio, V. Resveratrol Directly Binds to Mitochondrial Complex I and Increases Oxidative Stress in Brain Mitochondria. *PLoS One* **2015**, *10* (12), 1–19.
3. Pardo Andreu, G. L.; Reis, F. Z. Dos; González-Durruthy, M.; Hernández, R. D.; D'Vries, R. F.; Vanden Berghe, W.; Alberici, L. C. Rapanone, a Naturally Occurring Benzoquinone, Inhibits Mitochondrial Respiration and Induces HepG2 Cell Death. *Toxicol. Vitro*. **2020**, *63* (November 2019), 104737.



SLMC2-40

EVALUACIÓN *in vitro* Y ESTUDIO BIOFÍSICO DEL PÉPTIDO Δ M4 COMO POTENCIAL AGENTE ANTITUMORAL CONTRA EL CÁNCER DE SENO

Maria Camila Klaiss-Luna¹, Gloria A Santa-González², Marcela Manrique-Moreno¹

marcela.manrique@udea.edu.co

¹Instituto de Química, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia, A.A. 1226, Medellín, Antioquia

²Grupo de Investigación en Innovación Biomédica, Facultad de Ciencias Exactas y Aplicadas, Instituto Tecnológico Metropolitano, A.A. 54959, Medellín, Colombia.

PALABRAS CLAVES: Cáncer, Péptidos, Infrarrojo, Cultivos.

INTRODUCCIÓN

Los péptidos poseen una amplia actividad antimicrobiana, antifúngica y anticancerígena 1 . El mecanismo de acción se basa en la desestabilización de la membrana y posterior inducción de muerte celular. La evaluación biológica y biofísica de nuevos compuestos es fundamental en la búsqueda de nuevos agentes para el tratamiento del cáncer 2 .

MÉTODOS

La evaluación de la actividad biológica de Δ M4 se realizó en las líneas HaCat, MCF-7 y MDA-MB-231. Utilizando espectroscopia infrarroja se evaluó la interacción lípido-péptido en modelos sintéticos de membranas tumorales y no tumorales, el efecto de la carga en la interacción del péptido y los cambios conformacionales de Δ M4.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES

Los ensayos de actividad antiproliferativa del péptido Δ M4 alcanzaron valores de IC 50 de 104.7, 64.36 y 58.67 μ M en las líneas celulares HaCat, MCF-7 y MDA-MB-231, respectivamente. Los resultados muestran una mayor actividad citotóxica del péptido en células tumorales que células no tumorales. El análisis de la interacción lípido-péptido a través de Espectroscopia Infrarroja demostró que Δ M4 incide e incrementa la fluidez de los liposomas y es más activo hacia el modelo de membrana tumoral en comparación con el no tumoral. La evaluación del efecto carga en la interacción lípido-péptido evidenció que el efecto de Δ M4 en la fluidez de membrana es dependiente de concentración y se potencializa al incrementar la carga del sistema. Finalmente, el estudio conformacional reveló que el péptido adquiere una estructura helicoidal al interactuar con los sistemas de membrana. Los resultados demostraron el potencial de Δ M4 como agente terapéutico en tratamientos para el cáncer de seno.

REFERENCIAS

- [1] Raheem, N., & Straus, S. K. Mechanisms of Action for Antimicrobial Peptides with Antibacterial and Antibiofilm Functions. *Frontiers in Microbiology* (2019).
[2] Chan, Y.-H. M., & Boxer, S. G. Model membrane systems and their applications. *Current Opinion in Chemical Biology* (2007),11(6) 581–587.

INSTITUCIONES FINANCIADORAS:

Proyecto financiado por el Ministerio de Ciencia Tecnología e Innovación – MinCiencias (Cod. 111584467189, RC N ° 946-2019).



ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LAS POSIBLES INTERACCIONES DE LOS METABOLITOS CON ACTIVIDAD REPELENTE: α -BISABOLOL, NEROLIDOL Y ACETATO DE GERANILO CON LAS PROTEÍNAS FREQUENINA-2 Y RECEPTOR DE TRIFOSFATO DE INOSITOL (IP₃R).

Laura Marcela Pérez Niño, Stelia Carolina Méndez Sánchez.
Universidad Industrial de Santander

laura_manino@yahoo.com

En el estudio reportado por Portilla y colaboradores 2020 [1] identificaron una mezcla de metabolitos (nerolidol, acetato de geranilo y α -bisabolol) de plantas medicinales con una actividad repelente del 100% durante 3 horas. Por lo cual, este estudio tuvo como objetivo identificar las posibles interacciones de los metabolitos nerolidol, acetato de geranilo, α -bisabolol y el compuesto de referencia (DEET) con las proteínas: frequenina y el IP₃R (receptor de trifosfato de inositol) siendo importante estas debido a la relación con la proteína AaegOBP1 (proteína de unión odorífera 1) que se ve afectada por la acción del repelente [4], para esto se realizó ensayos *in silico* en el programa Schrödinger Drug Discovery donde se identificaron las interacciones mediante herramientas computacionales como Glide en los compuestos y proteínas de interés, donde se propone una posible inhibición en estas según la información reportada en la literatura. Los resultados del docking molecular sugieren que el nerolidol y el DEET se encuentran en un pocket formando interacciones de tipo hidrofóbico con los residuos VAL 179 y LEU 182. Lo anterior nos permite señalar la posible inhibición de la Frq por los compuestos nerolidol y DEET, dado que Roca y colaboradores 2018 reportan que el compuesto FD4 es capaz de inhibir la frequenina gracias a interacciones hidrofóbicas formadas por el grupo fenotiazina de este compuesto y los residuos que forman parte de la hélice H10 [2]. En cuanto a la proteína IP₃R, los resultados sugieren que el α -bisabolol presentan interacciones de tipo puente de hidrógeno con el residuo ARG 266, interacción electrostática con el residuo ARG 270 e hidrofóbica con el residuo LEU 269, mientras que el DEET presenta interacciones electrostáticas con el residuo LYS 507 y puente de hidrógeno con el residuo ARG 266. En la literatura se reporta que la heparina [3] inhibe al IP₃R mediante interacciones electrostáticas formadas en el sitio activo, lo cual indica que al tener las mismas interacciones el α -bisabolol y DEET podría haber una posible inhibición para esta proteína. En conclusión tanto para la Frq-2 como el IP₃R los resultados de docking sugieren que los compuestos podrían presentar una posible inhibición debido a las interacciones formadas en el sitio activo, siendo las mismas que las reportadas en la literatura para los inhibidores conocidos.

REFERENCIAS

1. Portilla, J.; Castillo, R.; Barón, M.; Duque, J.; Mendez, S. Design of a Repellent Against *Aedes aegypti* (Diptera: Culicidae) Using *in silico* Simulations With AaegOBP1 Protein. *Journal of Medical Entomology*. [Online] 2020, 57, 463–476. Doi: 10.1093/jme/tjz171
2. Roca, C.; Martínez, L.; Mozo, M.; Sastre, J.; Infantes, L.; Mansilla, A.; Chaves, A.; Gonzáles, J.; Gil, C.; Cañada, F.; Martínez, A.; Sánchez, M.; Campillo, N. Deciphering the inhibition of the neuronal calcium sensor 1 and the guanine exchange factor Ric8a with a small phenothiazine molecule for the rational generation of therapeutic synapse function regulators. *Journal of Medicinal Chemistry*. [Online] 2018, 61, 5910-5921. Doi: 10.1021/acs.jmedchem.8b00088
3. Azumaya, C.; Linton, E.; Risener, C.; Nakagawa, T.; Karakas, E. Cryo-EM structure of human type 3 inositol triphosphate receptor reveals the presence of a self-binding peptide that acts as an antagonist. *Journal of Biological Chemistry*. [Online] 2020, 295, 1742-1753. Doi: 10.1074/jbc.RA119.011570
4. Mukunda, L.; Miazzi, F.; Sargsyan, V.; Hansson, B.; Wicher, D. Calmodulin Affects Sensitization of *Drosophila melanogaster* Odorant Receptors. *Frontiers in Cellular Neuroscience*. [Online] 2016, 10, 1-11.



SLMC2-414

CARACTERÍSTICAS BIOQUÍMICAS-CLÍNICA DE LA LITIASIS BILIAR EN PACIENTES DE UNA RED HOSPITALARIA DE CARTAGENA

Willfrant Jhonnathan Muñoz Murillo¹, José Belisario Tinoco², Angélica Guerrero Castilla³, Amileth Suárez-Causado²

¹ Semillero de Investigación -grupo de Investigación PROMETEUS. Facultad de Medicina, Universidad de Cartagena. Cartagena de Indias, Colombia. ² Grupo de Investigación PROMETEUS. Facultad de Medicina, Universidad de Cartagena. Cartagena de Indias, Colombia. ³ Escuela de Química y Farmacia, Facultad de Medicina y Ciencia, Universidad San Sebastián, Valdivia, Chile.

asuarezc1@unicartagena.edu.co

PALABRAS CLAVES. Litiasis, biliar, TGF β , LDH

INTRODUCCIÓN: La patología biliar litiásica corresponde al conjunto de enfermedades que afectan la vesícula biliar y/o las vías biliares como consecuencia de presencia anormal de cálculos, que en forma genérica es denominada colelitiasis, debido a que este padecimiento constituye el factor común presente en la gran mayoría de los casos.

MÉTODOS: El trabajo describe en términos bioquímicos clínico el comportamiento de la enfermedad litiásica biliar. Se realizó un estudio preliminar descriptivo de corte transversal. Se identificaron características sociodemográficas, epidemiológicas, clínicas y parámetros bioquímicos - moleculares como el factor de crecimiento transformante β por PCR convencional, en pacientes con obstrucción biliar.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Los resultados del presente estudio permiten observar la frecuencia de la enfermedad litiásica vesicular asociada a Obesidad, dislipidemia, diabetes mellitus, con un aumento significativo de la Lactato deshidrogenasa, sin compromiso de su contractibilidad y regeneración tisular en los pacientes estudiados.

REFERENCIAS:

1. Königer, J., et al. (2005). "Transforming growth factor- β pathway is activated in cholecystolithiasis." *Langenbeck's archives of surgery* 390(1): 21-28.
2. Krawczyk, M., et al. (2013). "Genetics of biliary lithiasis from an ethnic perspective." *Clinics and research in hepatology and gastroenterology* 37(2): 119-125.
3. Wilkins, T., et al. (2017). "Gallbladder dysfunction: cholecystitis, choledocholithiasis, cholangitis, and biliary dyskinesia." *Primary Care: Clinics in Office Practice* 44(4): 575-597.



SLMC2-477

**NUEVOS HÍBRIDOS BASADOS EN CURCUMINA Y RESVERATROL: CITOTOXICIDAD,
ACTIVIDAD ANTIPROLIFERATIVA E INDUCCIÓN DE MUERTE CELULAR CONTRA CÁNCER
COLORRECTAL**

Gustavo Moreno, Cristian Hernández, Angie Herrera, Wilson Cardona
Universidad de Antioquia

gustavo.moreno@udea.edu.co

PALABRAS CLAVE: Cáncer colorrectal, moléculas híbridas, curcumina, resveratrol.

INTRODUCCIÓN: El cáncer colorrectal (CCR) es la segunda causa de muerte por cáncer en el mundo¹. Los tratamientos actuales para CCR causan efectos adversos severos². En la búsqueda de nuevas alternativas terapéuticas se está evaluando el potencial quimiopreventivo de nuevos híbridos curcumina - resveratrol contra células de cáncercolorrectal.

MÉTODOS: La actividad citotóxica y antiproliferativa de los compuestos se evaluó en células SW480 y SW620 y su selectividad en células CHO-K1 mediante el ensayo de sulforodamina B. La determinación de proteínas apoptóticas se realizó mediante kits de ELISA sandwich y la detección de poliaminas por kit fluorométrico.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Los híbridos 3e y 3i (para SW480) y 3a, 3e y 3k (para SW620) mostraron la mejor actividad citotóxica con valores IC₅₀ desde 11.52±2.78 a 29.33±4.73 µM para ambas líneas celulares, con índices de selectividad superiores a 1, 48h postratamiento. Los IC₅₀ e índices de selectividad fueron mejores que los reportados para el fármaco de referencia (5-fluorouracilo), compuestos de partida curcumina-resveratrol y mezcla equimolar (excepto el compuesto 3e para SW480). Estos híbridos mostraron buena actividad antiproliferativa. El compuesto 3i indujo un aumento significativo de caspasa 3 y caspasa 7 en células SW480 y en células SW620 el compuesto 3k también indujo esteatamiento de caspasa 3, lo que sugiere posibles mecanismos de apoptosis. El compuesto 3e indujo un aumento significativo en la proteína supresora de tumores p53 en células SW480. Por último, los compuestos 3a, 3e y 3k indujeron en células SW620 un aumento significativo en la concentración de poliaminas.

REFERENCIAS:

1. Sung, H.; Ferlay, J.; Siegel, R.L.; Laversanne, M; Soerjomataram, I.; Jemal, A; Bray, F. Global Cancer Statistics 2020: GLOBOCAN Estimates of Incidence and Mortality Worldwide for 36 Cancers in 185 Countries. *CA Cancer J. Clin.* **2021**, *71*, 209–249.
2. Anand, A.B.; Kunnumakara, C.; Sundaram, K.B.; Harikumar, S.T.; Tharakan, O.S.; Lai, B.; Sung, B.B. *Pharm. Res.* **2008**, *25*, 2097-2116.



Expresión de Reteplasa, una variante del Activador Tisular del Plasminógeno Humano recombinante, en el sistema Gateway® a nivel analítico.

Jhoana Carolina Ossa-Tabares^{1,2}, Oscar Mauricio Gómez-Guzmán^{2,3}, Ana María García Cepero^{1,2}

¹ Facultad de ciencias farmacéuticas y alimentarias, Universidad de Antioquia. ² Unidad de Biología Celular y Molecular, Corporación para investigaciones biológicas CIB ³ Facultad de Ciencias y Biotecnología, Universidad CES.
ana.garciac@udea.edu.co

PALABRAS CLAVE: Reteplasa, rtPA, Clonación, Expresión.

INTRODUCCIÓN: *Escherichia coli* es empleada para producir moléculas biosimilares. Un ejemplo es Reteplasa, una variante recombinante del Activador Tisular del Plasminógeno, un agente fibrinolítico indicado para el tratamiento de enfermedades cardiovasculares de alta prevalencia y mortalidad en Colombia. Clonar y al expresar la proteína candidata al biosimilar Reteplasa en *E. coli*.

MÉTODOS: Se realizó un análisis bioinformático con el cual, se obtuvo un constructo que fue generado por síntesis química, y ya insertado en el vector de clonación pDONR221 (Invitrogen). La conación se realizó con el sistema de expresión Gateway de Invitrogen® y se evaluó la expresión del clon candidato en diferentes parámetros.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Se obtuvo un constructo génico de Reteplasa insertado en el vector pDONR221 que por recombinación homologa creó el vector de expresión pET-DEST42Ret-Pat. Este al ser transformaron en *E. coli* BL21(DE3), generó clones de los cuales se seleccionó el clon 21 (pET-DEST42Ret-PatC12). La correcta clonación del gen fue confirmanda por PCR y análisis de restricción con fragmentos de tamaños moleculares esperados, y por 100% de identidad por secuenciación. Las condiciones óptimas para la expresión fueron: crecimiento celular antes de la inducción entre DO 0.4 – 0.6; inducción con IPTG similar entre 0,1 y 1,0 mM; y tiempo de incubación ≤6 horas. Reteplasa se visualizó en la fracción insoluble, sugiriendo su expresión en cuerpos de inclusión y se estimó una concentración de 190 µg/ml de proteína expresada por *E. coli* BL21 (DE3) pET-DEST42 Ret-PatC12. Este trabajo compila los métodos para la obtención de un sistema alternativo para la expresión de Reteplasa en el sistema Gateway.

REFERENCIAS:

1. *E. coli* Expression System with Gateway® Technology. Gateway®-adapted destination vectors for cloning and highlevel expression of native or tagged recombinant proteins in *E. coli*. Catalog Numbers 11824-026, 2012. Publication Number 25-0517. MAN0000278
2. Gurman P, Miranda OR, Nathan A, Washington C, Rosen Y, Elman NM. Recombinant tissue plasminogen activators (rtPA): a review. Clin Pharmacol Ther. 2015 Mar;97(3):274-85. doi: 10.1002/cpt.33.
3. Seyedhosseini Ghaheh H, Ganjalikhany MR, Yaghmaei P, Pourfarzam M, Mir Mohammad Sadeghi H. Investigation of Supercharging as A Strategy to Enhance the Solubility and Plasminogen Cleavage Activity of Reteplase. Iran J Biotechnol. 2020 Oct 1;18(4):e2556. doi: 10.30498/IJB.2020.2556.



SLMC2-506

DETERMINACIÓN DE LAS PROPIEDADES ANTIOFÍDICAS DEL EXTRACTO METANÓLICO DE *Petiveria alliacea* FRENTE AL VENENO DE *Bothrops atrox* DEL PIE DE MONTE AMAZÓNICO.Sebastian Saldarriaga Muñoz¹, Yudy Lorena Silva Ortiz¹.¹Grupo de investigación Productos Naturales Amazónicos; Universidad de la Amazonia.s.saldarriaga@udla.edu.co

El presente trabajo expone los resultados investigativos en la determinación de la actividad alexitérica del extracto metanólico de *Petiveria alliacea* Hojas (**EH**) y Raíz (**ER**) sobre un pool de veneno de *Bothrops atrox* proveniente del *pie de monte amazónico* en el departamento del Caquetá. Al veneno liofilizado se le evaluaron actividades toxinológicas mediante ensayos *in vitro* (Actividad coagulante, actividad proteolítica, actividad Hemolítica indirecta), estableciendo las dosis mínimas que generan este efecto (Dosis mínima coagulante (**DMC-F**), Dosis mínima proteolítica (**DMP-C**), Dosis mínima hemolítica indirecta (**DmHI**)), al igual que el contenido de proteínas. Posteriormente se evaluó el comportamiento de las dosis mínimas frente a la presencia de **EH** y **ER**. Finalmente se monitoreo el perfil proteico del veneno y la proteólisis que los extractos generan mediante electroforesis (**SDS-PAGE**).

En este orden de ideas las dosis mínimas se establecieron en **DMC-F**: 10 µg/mL; **DMC-C**: 2,5 mg/mL; **DmHI**: 0,5 µg/mL. Las interacciones de las dosis de veneno con ambos extractos evidenciaron la disminución del efecto toxinológico en cada una de las actividades, indicando un potencial alexitérico; también se encontraron bandas proteicas en el pool de veneno a (85-60, 50-40, 30-20-10 KDa); en el perfil proteolítico los dos extractos generaron la aparición de bandas proteicas entre (90- 100, 10 -15 KDa) al igual que una variación en la intensidad de algunas bandas, explicando en gran medida el comportamiento anteriormente evidenciado, finalmente se estableció el contenido proteico en 98.30±10,13%.

REFERENCIAS:

1. Gonçalves-Machado, L., Pla, D., Sanz, L., Jeane-B, R, J., Leitão-De-Araújo., Alves, M, L., (2015). JFP, 135, 73-89.
2. Hatakeyama, D. M., Morais-Zani, K., Serino-Silva, C., Grego, F., Sant'Anna, S., Fernandes, W. (2018). Toxicon. 141. 34-42.
3. Laemmli, U. (1970). Nature (227), 680-685



SLMC2-589

INTERFERENCIA DE ALGUNOS DETERGENTES EN LA INMUNODETECCIÓN DEL MARCADOR EXOSOMAL CD81 EN EL SECRETOMA DE CÉLULAS DE MELANOMA A375

S. Susana Novoa-Herrán¹, Luis Alberto Gómez-Grosso^{1,2}.

¹ Grupo de Fisiología Molecular, Subdirección de Investigación Científica y Tecnológica, Dirección de Investigación en Salud Pública, Instituto Nacional de Salud, Colombia. ² Facultad de Medicina. Universidad Nacional de Colombia.

snovoa@ins.gov.co

PALABRAS CLAVE: vesículas extracelulares; exosomas, cáncer; tetraspanina 28

INTRODUCCIÓN.

El secretoma y las vesículas extracelulares tipo exosomas (VE) son una fuente promisoría de biomarcadores. Sin embargo, la cuantificación proteica y la inmunodetección del marcador exosomal CD81 puede ser afectada por detergentes usados en el proceso de lisis de VE¹ y solubilización de proteínas de membrana², procesos analíticos desafiantes. Métodos. El secretoma de células A365 fue concentrado por ultrafiltración, tratado con diferentes detergentes a diferentes concentraciones y en buffer Laemmli. Se cuantificó con el método de BCA y mediante fijación en membranas de nitrocelulosa y tinción con amidoblack³. El CD81 fue detectado mediante Dot- y Western-Blotting (n=3, p≤0,05). Resultados y Conclusiones. Se obtuvo el secretoma de células A375 enriquecido en VE menores a 200nm y proteínas mayores a 10kDa. El resultado de la cuantificación proteica y la inmunodetección de CD81 varió según el buffer de lisis usado (Tritón X-100 1%, Nonidet P-40 1%, Deoxicolato de sodio 1%, SDS del 2% al 0.001%) y en buffer Laemmli con y sin calentamiento. El método de fijación y tinción con amidoblack permitió cuantificar las muestras tratadas con detergentes a alta concentración, a diferencia del método BCA. Mediante Dot-Blot se determinó que el Tritón X-100 y Nonidet P-40 interfieren en la detección del CD81, y se observó una mayor señal a mayor concentración de SDS (2%), obteniendo la máxima señal con el buffer Laemmli, detección confirmada mediante Western Blot. Los resultados sugieren que el SDS mejora la lisis de VE y la cantidad de proteína solubilizada es un factor determinante en la inmunodetección de CD81.

REFERENCIAS.:

1. Osteikoetxea, X.; Sódar, B.; Németh, A.; Szabó-Taylor, K.; Pálóczi, K.; Vukman, K. V.; Tamási, V.; Balogh, A.; Kittel, Á.; Pállinger, É.; Buzás, E. I., Differential detergent sensitivity of extracellular vesicle subpopulations. *Organic & Biomolecular Chemistry* 2015, 13 (38), 9775-9782.
2. Buschow, S. I.; Nolte-'t Hoen, E. N. M.; Van Niel, G.; Pols, M. S.; Ten Broeke, T.; Lauwen, M.; Ossendorp, F.; Melief, C. J. M.; Raposo, G.; Wubbolts, R.; Wauben, M. H. M.; Stoorvogel, W., MHC II in Dendritic Cells is Targeted to Lysosomes or T Cell-Induced Exosomes Via Distinct Multivesicular Body Pathways. *Traffic* 2009, 10 (10), 1528-1542.
3. Henkel, A. W.; Bieger, S. C., Quantification of Proteins Dissolved in an Electrophoresis Sample Buffer. *Anal. Biochem.* 1994, 223 (2), 329-331.



SLMC2-617

LA EXPOSICIÓN CRÓNICA AL ETANOL ALTERA LA ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE GLUTATIÓN PEROXIDASA (GPX) HEPÁTICA DURANTE EL TERCER TRIMESTRE DE DESARROLLO FETAL

Alberto Díaz Castillo^{1,2}; Janne Paola Silgado²; Karick Jotty Arroyo^{1,2}

¹ Grupo de investigación en Química Orgánica Medicinal, Facultad de Ciencias Farmacéuticas Universidad de Cartagena

² Grupo de Fisiología y Neurociencias, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales-Universidad de Cartagena

kjotty@unicartagena.edu.co

PALABRAS CLAVES: síndrome alcohólico fetal, glutatión peroxidasa, antioxidantes, etanol.

INTRODUCCIÓN: La exposición al etanol durante la gestación ocasiona patologías que afecta el desarrollo de los individuos debido a alteraciones en órganos de relevancia fisiológica. Por tal razón, se determinó el estado antioxidante hepático dependiente de selenoenzimas GPx en un modelo de crías equivalente al tercer trimestre de desarrollo fetal humano.

METODOLOGÍA: Se empleó una exposición gradual al etanol (5-10-15 y 20 %) y se registró el estado antioxidante hepático por medio de la actividad enzimática GPx y los niveles de oxidación de proteínas. Finalmente se evaluó los niveles séricos de Glucosa, Colesterol, triglicéridos, urea, Creatinina, Fosfatasa alcalina, Alanina aminotransferasa y Amilasa.

RESULTADOS: Los resultados obtenidos demostraron que la exposición materna de etanol disminuye significativamente en las crías del grupo A la actividad de la glutatión peroxidasa ($p < 0,05$), mientras aumenta significativamente la oxidación de proteínas ($p < 0,05$). Los parámetros bioquímicos en suero muestran que las crías del grupo A sufrieron un incremento significativo en la actividad enzimática de fosfatasa alcalina y alanina aminotransferasa ($p < 0,001$), al tiempo que, sufrieron un incremento de las concentraciones de colesterol y urea ($p < 0,01$; $p < 0,05$). Estos resultados demuestran que la ingesta de alcohol durante el embarazo altera drásticamente el estado antioxidante hepático durante una etapa de alta vulnerabilidad fisiológica como es el tercer trimestre de desarrollo fetal.

REFERENCIAS:

1. Popova, S.; Lange, S.; Probst, C.; Gmel, G.; Rehm, J. Estimation of National, Regional, and Global Prevalence of Alcohol Use During Pregnancy and Fetal Alcohol Syndrome: a Systematic Review and Meta-analysis. *The Lancet Global Health* **2017**, *5*, e290-e299.
2. Osna, N. A.; Donohue Jr, T. M.; Kharbanda, K. K; Alcoholic Liver Disease: Pathogenesis and Current Management. *Alcohol research: current reviews*, **2017**, *38*, 147-161.
3. Goldberg, E. M.; Aliani, M. Metabolomics and Fetal Alcohol Spectrum Disorder. *Biochem. Cell Biol.* **2018**, *96*, 198-203.



SLMC2-629

Alternativa para la detección de SARS-CoV-2 por RT-qPCR acoplada a SYBR Green

Valentina Guevara, Andrea Carolina Barragán-Cárdenas, David Alejandro López-González, Andrés Correa-Sánchez, Sebastián Arcila-Barrera, Mauricio Urquiza, Adriana Umaña-Perez.
Universidad Nacional de Colombia

vguevarap@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: COVID-19, qPCR, coronavirus, test diagnóstico

El aumento exponencial de casos de contagio con SARS-CoV-2 a nivel mundial pone de manifiesto la importancia de la detección temprana para disminuir la velocidad de la progresión del contagio. Para realizar tamizaje a gran escala y detectar casos rápidamente, un test diagnóstico de bajo costo es necesario. Muestras de RNA de pacientes positivos para SARS-CoV-2 se retrotranscribieron mediante RT PCR y posteriormente se realizó detección de los genes RdRp, E y RNP con los primers reportados por Corman et. al. (2020) usando un sistema de qPCR convencional acoplado a SYBR® Green. Los amplicones se observaron por electroforesis en gel de poliacrilamida. Se estandarizó la concentración y la temperatura de anillamiento de los primers para la detección del virus SARS-CoV-2 utilizando un volumen de reacción de 10aL. Las curvas de eficiencia muestran un comportamiento lineal y las curvas de fusión tienen una única señal correspondiente al amplicon esperado para cada uno de los genes. El gel de poliacrilamida muestra una única banda correspondiente al tamaño de pares de bases esperado. Con estos resultados es posible concluir que el sistema RT-PCR en dos pasos acoplado a SYBRGreen permite la detección de los genes E y RdRp de SARS-CoV-2 y el gen RNP humano en muestras de RNA provenientes de pacientes.

REFERENCIAS:

1. Corman, V. M., Landt, O., Kaiser, M., Molenkamp, R., Meijer, A., Chu, D. K. W., Bleicker, T., Brünink, S., Schneider, J., Schmidt, M. L., Mulders, D. G. J. C., Haagmans, B. L., Van Der Veer, B., Van Den Brink, S., Wijsman, L., Goderski, G., Romette, J. L., Ellis, J., Zambon, M., ... Drosten, C. (2020). Detection of 2019 novel coronavirus (2019-nCoV) by real-time RT-PCR. *Eurosurveillance*, 25(3), 2000045. <https://doi.org/10.2807/1560-7917.ES.2020.25.3.2000045>



SLMC2-632

DESARROLLO DE UNA PRUEBA DIAGNÓSTICA PARA LA DETECCIÓN DE SARS COV-2 BASADA EN LA TÉCNICA LAMP

Steven Alexander, David Jimenez, Paola Andrea Caicedo Burbano, María Francisca, Villegas Torres, Natalia Campillo Pedroza.
Universidad Icesi

steven0693@hotmail.com

PALABRAS CLAVE: LAMP, SARS-CoV-2, Isotérmica, Diagnóstico

La situación actual producida por la contingencia sanitaria debido a la pandemia por COVID 19 ha impulsado a la comunidad científica y las industrias farmacéuticas al desarrollo de terapias efectivas como las vacunas para combatir esta enfermedad. No obstante, la detección oportuna, confiable, rápida y simple del agente patógeno es crítica no solo para la prevención y el control de la diseminación del virus, sino también para la administración acertada de la terapia farmacológica y/o no farmacológica. Para atender esta situación, en este proyecto se planteó el desarrollo de una prueba para la detección de SARS-CoV-2 basada en la técnica LAMP. Para ello, se estandarizó y optimizó las condiciones de amplificación de los genes N, RdRp y RdRp/Hel presentes en el virus. En este caso, se obtuvo un método más rápido (40 min de reacción), con menor consumo de reactivos, altamente sensible, específico y reproducible. Adicionalmente, durante el desarrollo se incluyó el uso de materiales y reactivos que permitieran el uso efectivo de la prueba en laboratorios municipales con recursos limitados. Esto se logró, empleando un sistema de baño maría rudimentario, buffers de amplificación isotérmica preparados in house y el colorante Hidroxinaftol azul (HNB), que permitió la generación de un método de detección visual. A partir de esto se puede concluir que la técnica LAMP tiene un gran potencial para la creación de una prueba diagnóstica alternativa como las POCT (en inglés, point-of-care testing), dado que es rápida, económica y de fácil ejecución en cualquier laboratorio de investigación.

REFERENCIAS:

1. Zhou, Y.; Wan, Z.; Yang, S.; Li, Y.; Li, M.; Wang, B.; Hu, Y.; Xia, X.; Jin, X.; Yu, N.; Zhang, C. A Mismatch-Tolerant Reverse Transcription Loop-Mediated Isothermal Amplification Method and Its Application on Simultaneous Detection of All Four Serotype of Dengue Viruses. *Front. Microbiol.* 2019, 10 (MAY), 1–13. <https://doi.org/10.3389/fmicb.2019.01056>.
2. Li, Y.; Fan, P.; Zhou, S.; Zhang, L. Loop-Mediated Isothermal Amplification (LAMP): A Novel Rapid Detection Platform for Pathogens. *Microb. Pathog.* 2017, 107, 54–61. <https://doi.org/10.1016/j.micpath.2017.03.016>.
3. Notomi, T.; Mori, Y.; Tomita, N.; Kanda, H. Loop-Mediated Isothermal Amplification (LAMP): Principle, Features, and Future Prospects. *J. Microbiol.* 2015, 53 (1), 1–5. <https://doi.org/10.1007/s12275-015-4656-9>.



SLMC2-635

EXPRESIÓN DE INTERLEUQUINA-4 (IL-4) Y FACTOR ESTIMULANTE DE COLONIAS DE GRANULOCITOS Y MACRÓFAGOS (GM-CSF) RECOMBINANTES BOVINOS EN CÉLULAS COS-7.

Pedro Antonio Fontalvo Jaraba^{1,2}; Angie Melissa Puentes Orozco^{1,2}, Rafael Garzón Jaramillo², Lina Cardona Pico³, Adis Ayala Fajardo¹, Josué Anselmo Ortiz García¹, Catalina Avendaño³, Alexander Rodríguez López^{1,2}, Manuel Alfonso Patarroyo².

¹Facultad de Ciencias y Educación. Universidad Distrital Francisco José de Caldas. ²Fundación Instituto de Inmunología de Colombia FIDIC. ³Facultad de Ciencias Agropecuarias. Universidad de Ciencias Aplicadas y Ambientales U.D.C.A.

earodriguezl@correo.udistrital.edu.co

PALABRAS CLAVE: COS-7, IL-4, GM-CSF, células-dendríticas.

Proteínas como Interleuquina 4 (IL-4) y el factor estimulante de colonias de granulocitos y macrófagos (GM-CSF) son fundamentales para la diferenciación celular en el sistema inmune de mamíferos. Para el estudio de estas citoquinas se realizó la producción de las proteínas recombinantes de bovino en células COS-7. El cDNA de las citoquinas fue clonado y transfectado, empleando Lipofectamina 3000. Se recolectaron sobrenadantes de los cultivos celulares estables seleccionados con Geneticina y se confirmó presencia de brIL-4 y brGM-CSF mediante Dot-Blot y Western-Blot. Las proteínas fueron purificadas por Cromatografía por afinidad y se cuantificaron por método de BCA. Se confirmaron los tamaños de las secuencias codificantes de bIL-4 (376 pb) y bGM-CSF (428 pb), mediante PCR y secuenciación. Adicionalmente, usando la técnica de Western-blot se identificaron bandas de tamaño aproximado de 17, 35 y 48 kDa para ambas citoquinas, lo que sugiere que la proteína se encuentra en forma nativa y agregada. La concentración de la proteína purificada fue de 7.28 ug/mL y 1.82 ug/mL para rbIL-4 y rbGM-CSF, respectivamente. Por último, se realizaron ensayos que permitieron observar la diferenciación de monocitos a células dendríticas por microscopía y citometría de flujo. Estos resultados muestran la viabilidad del sistema de expresión para la producción de estas proteínas bovinas recombinantes y permite evidenciar la funcionalidad de las mismas en la derivación de monocitos a células dendríticas.

REFERENCIAS:

1. Müller, S., Adomeit, A., Kaufmann, R., Appelhans, H., Passow, H., Reißmann, S., & Liebmann, C. (2000). Expression and Functional Characterization of a pHis-Tagged Human Bradykinin B2 Receptor in COS-7 Cells. *Biological Chemistry*, 381(4). doi:10.1515/bc.2000.045
2. Ganguly, D., Paul, K., Bagchi, J., Rakshit, S., Mandal, L., Bandyopadhyay, G., & Bandyopadhyay, S. (2007). Granulocyte-macrophage colony-stimulating factor drives monocytes to CD14^{low} CD83⁺ DCSIGN⁻ interleukin-10-producing myeloid cells with differential effects on T-cell subsets. *Immunology*, 121(4), 499–507. doi:10.1111/j.1365-2567.2007.02596.x



SLMC2-646

PRODUCCIÓN E IMPLEMENTACIÓN DE UN SISTEMA DE ENTIDADES PSEUDOVIRALES PARA EL ESTUDIO DE LA INFECCIÓN DEL SARS-COV-2 EN UN ENSAYO IN VITRO DE INVASIÓN A CÉLULAS HUMANAS.

Laura Fernanda Fernández Fonseca, Yadi Adriana Umaña Pérez, Mauricio Urquiza-Martínez
Universidad Nacional de Colombia

lfernandezf@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: SARS-CoV-2, Pseudovirus, Infección, plásmido.

INTRODUCCIÓN: El SARS-CoV-2 es un virus que en su detección y cuantificación representa un riesgo de salud, por sus niveles de bioseguridad 3. Como solución se plantea, el uso del pseudovirus con un requerimiento de nivel de bioseguridad menor, permitiendo así realizar estudios tal como si se contara con el virus.

Métodos: Construcción del pseudovirus del SARS-CoV-2 por sistema de empaque de plásmidos. Transfección celular en línea HEK 293T. Identificación de la proteína recombinante en superficie de células por citometría de flujo.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Se realizó la construcción del pseudovirus del SARS-CoV-2 haciendo uso de tres plásmidos: el de envoltura que expresa la proteína S, el plásmido de empaquetamiento quien encapsula el RNA y el plásmido de transferencia que expresa las proteínas involucradas del pseudovirus. Se detecta la expresión de la proteína recombinante en la superficie de las células 293T por citometría de flujo y se implementa un ensayo para el estudio del proceso de infección del SARS-CoV-2 a la célula.

REFERENCIAS:

1. F.B. Belen-Apak, F. Sarialioglu. The old but new: Can unfractionated heparin and low molecular weight heparins inhibit proteolytic activation and cellular internalization of SARS-CoV2 by inhibition of host cell proteases? *Medical Hypotheses* 142(2020)109743. doi: 10.1016/j.mehy.2020.109743
2. Chen M, Zhang XE. Construction and applications of SARS-CoV-2 pseudoviruses: a mini review. *Int J Biol Sci* 2021; 17(6):1574-1580. doi:10.7150/ijbs.59184.



SLMC2-701

CAMBIOS EN LA EXPRESIÓN DE CITOQUINAS POR EFECTO DE PÉPTIDOS DERIVADOS DE LA PROTEÍNA gp85 DEL VIRUS DE EPSTEIN-BARR.

¹Botero-Buitrago Jenny A., ¹Urquiza-Martínez Mauricio.

¹Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Sede Bogotá

jeboterob@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Citoquinas, glicoproteína gp85, péptidos, leucocitos, inflamación. **Introducción**

Las citoquinas regulan la comunicación intercelular durante la respuesta inmune. De acuerdo con su concentración, pueden promover o inhibir el desarrollo de tumores. Se ha identificado un péptido derivado del sitio de unión de la glicoproteína gp85 del virus de Epstein-Barr a leucocitos humanos, el cual podría modular su respuesta.

METODOLOGÍA: En este trabajo, se evaluó el efecto del péptido denominado 11438 y su análogo (33210) a nivel génico y de proteínas, sobre la producción de citoquinas inflamatorias en leucocitos humanos mediante RT-qPCR y citometría de flujo, respectivamente.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Se determinó que los péptidos inducen modificaciones en el perfil de expresión de citoquinas, dadas por una regulación a la baja de IL-10 y GM-CSF a nivel génico, y un aumento en el nivel de expresión de citoquinas proinflamatorias como IL-6, TNF- α e IL-1 β a nivel de proteína, dependiendo del tiempo de estímulo y de la concentración utilizada. Estos resultados sugieren que los péptidos evaluados pueden actuar como moléculas promisorias para modular la respuesta inmune en un ambiente inflamatorio mediante la producción de citoquinas.

REFERENCIAS

1. Berraondo P.; Sanmamed M.F.; Ochoa M.C; Etxeberria I.; Aznar M.A.; Pérez-Gracia J.L.; et al. Cytokines in clinical cancer immunotherapy, *British Journal of Cancer*. 2019, 120, 6–15.
2. Urquiza M.; Suarez J.; Lopez R.; Vega E.; Patino H.; Garcia J.; et al. Identifying gp85- regions involved in Epstein-Barr virus binding to B-lymphocytes. *Biochem Biophys Res Commun*. 2004, 319(1), 221–9.
3. Urquiza M.; Melo-Cardenas J.; Guevara T.; Echeverria I.; Rodriguez I.C.; Vanegas M.; et al. α -Helix peptides designed from EBV-gH protein display higher antigenicity and induction of monocyte apoptosis than the native peptide. *Amino Acids*. 2010, 39(5), 1507–19.



SLMC2-703

INFLUENCIA DE LOS REQUISITOS DEL MATERIAL VEGETAL DE PARTIDA SOBRE LA ACTIVIDAD BIOLÓGICA DE EXTRACTOS OBTENIDOS A PARTIR DE FRUTOS DE *PHYSALIS PERUVIANA* L.

Anderson Stiven Sedano Ramirez¹, Jors Steven Vargas Mantilla¹, Yolima Baena Aristizábal¹.

¹Grupo de investigación TECPRONA – Departamento de Farmacia – Universidad Nacional de Colombia

ybaenaa@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: *Physalis peruviana*, Diabetes, Peruviosas, Fitoterapéuticos.

El objetivo fue evaluar extractos etanólicos obtenidos a partir de frutos de *Physalis peruviana* categorizados según los requisitos de la Norma Técnica Colombiana (NTC) 4580 de 1999 (1), con el fin de estudiar la influencia de la categoría y los estados de madurez sobre características fisicoquímicas y de actividad biológica. Los extractos se obtuvieron mediante un proceso de extracción sólido-líquido, a partir de los frutos clasificados según la NTC. Los extractos se llevaron a sequedad y se les evaluaron algunas propiedades fisicoquímicas, rendimiento y actividad de inhibición *in vitro* de α -amilasa (2), esta última relacionada con su actividad antidiabética. Los extractos de frutos categoría II con nivel de madurez 4 y 5 presentaron el mayor rendimiento y actividad inhibitoria *in vitro* de α -amilasa a una concentración de 10240 $\mu\text{g/mL}$. El análisis estadístico indicó que no existen diferencias estadísticamente significativas ($p < 0,05$), entre los extractos de los frutos categoría Extra y I, mientras los obtenidos de los frutos categoría II si la evidencian, en los diferentes niveles de madurez. Los extractos, independiente de la categoría a la que pertenecieran presentaron actividad comparable a la acarbosa, actividad que en estudios previos se atribuyó principalmente a las peruviosas (3). Así, los extractos obtenidos de las diferentes categorías Extra y I (las más comercializadas para exportación y a nivel nacional, respectivamente), y la categoría II (principalmente empleada para procesamiento), se podrían emplear como potencial fuente de extractos para su aplicación en el desarrollo de fitoterapéuticos con actividad frente al tratamiento de la diabetes.

REFERENCIAS:

1. ICONTEC, “NTC 4580 Frutas frescas. Uchuva. Especificaciones,” 1999.
2. Rey, D. Evaluación *in vitro* del efecto de un extracto de frutos de *Physalis peruviana* sobre algunas carbohidrasas intestinales. Tesis de Maestría en Ciencias Farmacológicas. Facultad de Ciencias. Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, 2013.
3. Bernal, C. *et al.*, Peruvioses A to F, sucrose esters from the exudate of *Physalis peruviana* fruit as α -amylase inhibitors. *Carbohydr. Res.*, 2018, vol. 461, pp. 4–10, doi: 10.1016/j.carres.2018.03.003.



SLMC2-704

DETERMINACIÓN DE PERFILES TH₁/TH₂ DE LINFOCITOS DE RATÓN BALB/c ESTIMULADOS CON PEPTIDOMIMÉTICOS DERIVADOS DE ANTÍGENOS DE MSP-1 DE *Plasmodium* spp.

Zully Johana Rodríguez Parra¹, José Manuel Lozano Moreno¹.

¹Departamento de Farmacia, Universidad Nacional de Colombia

zjrodriguezp@unal.edu.co, jmlozanom@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Plasmodium spp. Péptidomiméticos, Inmunología, Linfocitos

INTRODUCCIÓN:

Se estableció la expresión de diferentes citoquinas asociadas con polarización de linfocitos Th1/Th2, en sobrenadantes de cultivo de poblaciones linfocitarias provenientes de ratón BALB/c, estimuladas con péptidos de origen sintético modificados a nivel estructural y conformacional, como aporte al conocimiento de la respuesta inmune frente a la infección por malaria.

MÉTODOS: En sobrenadantes de cultivo de células provenientes de bazo de ratón BALB/c, detectamos citoquinas, empleando un kit comercial y citometría de flujo. Establecimos el Índice de Estimulación de los analitos respecto al grupo control identificando perfil Th1/Th2 con aproximación a la respuesta inmune celular atribuida a las moléculas en estudio.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: Los datos se normalizaron para cada conjunto de células estimuladas, con el fin de calcular el Índice de Estimulación (IE) como se reporta en (Flórez et al., 2021), dividiendo los resultados de las células estimuladas con cada antígeno entre las células provenientes de animales sin estimulación.

Los peptidomiméticos B1An1, B6An1 y B6An2 estimularon la secreción de las citoquinas IL-2, TNF- α , e IFN- γ , con diferencia significativa respecto al grupo control, lo que sugiere predominio por el perfil de respuesta Th1.

Lo anterior, está directamente relacionado con la activación del macrófago y las respuestas pro-inflamatorias. Es decir, respuestas afines a la fase aguda de la infección y la inmunidad mediada por células, donde además se promueve la diferenciación de linfocitos B y la secreción de anticuerpos (Riley EM & Stewart VA, 2013).

REFERENCIAS:

1. Lozano, J. M. (2016). The Next Vaccine Generation Against Malaria: Structurally Modulated Plasmodium Antigens. In A. Rodríguez-Morales (Ed.), Current Topics in Malaria (pp. 307– 328). <https://doi.org/10.5772/65251>
2. Riley EM, Stewart VA. (2013) Immune mechanisms in malaria: new insights in vaccine development. Nat Med. 19(2):168-78. doi: 10.1038/nm.3083. PMID: 23389617.
3. Lesmes, L., Gallego, G., Carreño, L., Hoebecke, J., & Lozano, J. M. (2011). Actividad funcional de anticuerpos inducidos por péptido-miméticos derivados del antígeno MSP-2 del Plasmodium, como potenciales agentes inmunoterapéuticos en malaria causada por Plasmodium yoelii y Plasmodium berghei en ratones BALB/c. Revista Colombiana de Ciencias Químico - Farmacéuticas, 40(1), 67–91.



SLMC2-713

OPTIMIZACIÓN DE SISTEMA DE qPCR PARA DETECCIÓN DE LA RESPUESTA PRO APOPTÓTICA DE PÉPTIDOS ANTICANCERÍGENOS

Jenny A. Botero-Buitrago¹, Sebastian Arcila-Barrera, Adriana Umaña-Pérez¹

¹Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Ciencias, Departamento de Química, Sede Bogotá
jennybotero10@hotmail.com

PALABRAS CLAVE: Péptidos, cáncer, optimización, qPCR.

El uso de péptidos para el tratamiento del cáncer es un campo promisorio por las ventajas que presentan sobre tratamientos convencionales, ya que son específicos, su toxicidad es selectiva hacia células cancerosas y sus efectos secundarios son reducidos, lo que permite mejorar la calidad de vida de los pacientes. Como elemento formativo de jóvenes talento en salud, se planteó una estrategia para medir la expresión génica pro o anti-apoptótica de péptidos en la línea derivada de cáncer de seno MCF-7, por retrotranscripción acoplada con PCR cuantitativa (RT-qPCR). Las condiciones de anillamiento para los *primers* de Caspasa 8, Caspasa 9, PUMA y Beclin-1 se optimizaron aplicando un gradiente de temperatura y la evaluación de una matriz de tres concentraciones de primers (75, 100 y 125 nM). Los parámetros óptimos se establecieron con base en las reacciones que obtuvieron la formación de un amplicón, dado por la presencia de una señal única en las curvas de fusión, menor ciclo de cuantificación (Cq) para cada pareja de *primers*, así como por una sola banda en gel de poliacrilamida, correspondiente al tamaño esperado según análisis bioinformático para cada pareja. Los *primers* que mostraron una amplificación eficiente y lineal, a partir de curvas de eficiencia para cada gen, se consideraron optimizados para la evaluación de péptidos en el modelo celular escogido mediante RT qPCR.

REFERENCIAS:

1. Marqus, S.; Pirogova, E.; Piva, T.J. Evaluation of the use of therapeutic peptides for cancer treatment. *J Biomed Sci.* **2017**;24(1):1–15.
2. Boohaker, R.J.; Lee, M.; Vishnubhotla, P.; Pérez, J.M.; Khaled, A.R. The use of therapeutic peptides to target and to kill cancer cells. *Curr Med Chem.* **2012**;19(22):3794–804.
3. Raymaekers, M.; Smets, R.; Maes, B.; Cartuyvels, R. Checklist for optimization and validation of real-time PCR assays. *Journal of clinical laboratory analysis.* **2009**; 23(3): 145- 151.



SLMC2-716

Detección del virus del chikungunya por RT-PCR en tiempo real de un solo paso basado en SYBR Green.Andrés Felipe Cuéllar Quimbaya¹, Ana Luisa Muñoz¹, Nidya Alexandra Segura², Anny Karely Rodríguez¹, Felio Bello³,
Mónica Losada-Barragán¹¹ Facultad de ciencias, Universidad Antonio Nariño, Bogotá, Colombia. ² Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia. ³ Facultad de Ciencias Agrarias y Ganaderas, programa de medicina veterinaria, Universidad de La Salle, Bogotá, Colombia.zjrodriguezp@unal.edu.co**PALABRAS CLAVE:** chikungunya, detección, RT-qPCR.

La epidemia del virus del chikungunya (CHIKV) se ha extendido por América Latina, esto ha generado un problema al sistema de salud ya que la infección del DENV, ZIKV y CHIKV generan síntomas similares dificultando su diagnóstico. Debido a esto, se necesita desarrollar un método de diagnóstico específico para CHIKV ¹.

El objetivo del estudio es diseñar y evaluar un ensayo RT-qPCR para la detección de CHIKV aislado de cultivos celulares, amplificando el gen NSP1, y determinando la especificidad mediante el análisis de las curvas de disociación e inclusión de muestras de ARN de DENV y ZIKV.

Los resultados de la técnica demuestran que el ensayo fue optimizado para a la detección de ZIKV con una eficiencia de 98,91%, y un R² de 0.97. La técnica fue capaz de detectar al menos 0,0064 ng de ARN de CHIKV y mostró un coeficiente de variación entre 0.15%- 7.39% que indica que la técnica desarrollada es altamente sensible y reproducible. Adicionalmente, las curvas de disociación de las muestras presentaron un único pico con una temperatura de disociación promedio de 85.37, sugiriendo la amplificación específica del gen blanco. Asimismo, no se observó reacción cruzada con otros flavivirus, lo que demuestra la especificidad. En conjunto, este trabajo ostenta el desarrollo de un ensayo de RT- qPCR, sensible, reproducible y específico para la detección de CHIKV. Proporcionando una herramienta molecular para la detección específica de la infección por CHIKV en regiones donde co-circulan otros arbovirus de difícil diferenciación clínica como el DENV y ZIKV.

REFERENCIAS.

1. (1) dos Santos S. Marinho, R.; Sanz Duro, R. L.; Santos, G. L.; Hunter, J.; da Aparecida Rodrigues Teles, M.; Brustulin, R.; de Padua Milagres, F. A.; Sabino, E. C.; Diaz, R. S.; Komninakis, S. V. Detection of Coinfection with Chikungunya Virus and Dengue Virus Serotype 2 in Serum Samples of Patients in State of Tocantins, Brazil. *J. Infect. Public Health* **2020**, *13* (5), 724– 729. <https://doi.org/10.1016/j.jiph.2020.02.034>.



SLMC2-728

ACTIVIDAD *IN VITRO* E *IN SILICO* DE ALCALOIDES INDÓLICOS DE *TABERNAEMONTANA CYMOSA* JACQ (APOCYNACEAE), FRENTE A *STAPHYLOCOCCUS AUREUS* SENSIBLE Y RESISTENTE A ANTIBIÓTICOS.

Julián Andrés Cabrera Barraza, Geraldine Martelo Martínez, Yina Pájaro González, Andrés Oliveros Díaz, Juan Urrego Álvarez, Winston Quiñonez Fletcher, Fredyc Díaz Castillo.
Universidad de Cartagena

jcabrerabl@unicartagena.edu.co

PALABRAS CLAVES: CIM, PBPs, Resistencia antibiótica, *Tabernaemontana cymosa*.

INTRODUCCIÓN: La resistencia bacteriana ha dejado obsoleto el uso de algunos antibióticos, por lo tanto, se hace imperativo la búsqueda de nuevas moléculas con propiedades antibacterianas. Los productos naturales son una fuente promisoría de nuevas sustancias, considerándose de alto valor agregado para la comunidad científica debido a su potencial biológico y químico.

MÉTODOS: La evaluación *in vitro* de los alcaloides indólicos aislados de *Tabernaemontana cymosa* se realizó mediante microdiluciones seriadas en caldo Muller Hinton, bajo protocolos del CLSI (con modificaciones) frente a cepas ATCC de *S. aureus*. Adicionalmente, se evaluaron estos compuestos contra los cinco isotipos de las Proteínas de Unión a Penicilina mediante Docking molecular utilizando el programa Autodock Vina y Autodock Tools.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: A partir del extracto etanólico de semillas de *Tabernaemontana cymosa* se aislaron e identificaron los alcaloides indólicos Voacangina, Voacangina-7 hidroindolenina, 3-oxo Voacangina y Rupicolina mediante técnicas cromatográficas y RMN. Los resultados obtenidos de actividad antibacteriana mostraron que Voacangina presentó una Concentración Inhibitoria Mínima de 64 µg/mL frente a *S. aureus* sensible (ATCC 29213) y resistente (ATCC 33591) a metilicina, a diferencia de los otros compuestos que no tuvieron actividad a esta concentración evaluada. Por otra parte, el estudio *in silico* mostró alta afinidad de estos alcaloides indólicos en los receptores PBPs mediante distintas interacciones intermoleculares, en las que predominó el puente de hidrogeno convencional, alquil, π donador y π -Alquil. La mayor afinidad de los alcaloides estudiados lo obtuvo voacangina con una energía de unión de -8,1 Kcal/mol con la proteína PBP2 y de -7,70 Kcal/mol con la proteína PBP2a. Estos resultados confirman el posible mecanismo de acción de voacangina, como interferente en la síntesis de pared celular de *Staphylococcus aureus*.

REFERENCIAS:

1. Clinical and Laboratory Standards Institute. Methods for Dilution Antimicrobial Susceptibility Tests for Bacteria That Grow Aerobically; Approved Standard—Ninth Edition. **2012**, M07-A9, Vol. 32 No. 2
2. Quave C.L.; Plano L.R.W.; Pantuso T.; Bennett B.C. Effects of extracts from Italian medicinal plants on planktonic growth, biofilm formation and adherence of methicillin-resistant *Staphylococcus aureus*. Journal of Ethnopharmacology. **2008**, 118(3): 418-428.
3. Aguayo, A.; Quezada, M.; Mella, S.; Riedel, G.; Opazo, A.; Bello, H.; González, G. Bases moleculares de la resistencia a metilicina en *Staphylococcus aureus*. Revista Chilena de Infectología. **2018**, 35(1), 7–14.



SLMC2-735

IDENTIFICACIÓN DE METABOLITOS PRESENTES EN PLANTAS MEDICINALES COMO ADYUVANTES EN EL TRATAMIENTO CONTRA EL ADENOCARCINOMA DE CÉRVIX MEDIANTE ESTUDIOS IN SILICO EMPLEANDO COMO DIANA FARMACOLÓGICA LA MITOCONDRIA.

Andrea Otero Mojica, Luis Carlos Vesga Gamboa, Stelia Carolina Mendez Sanchez.
Grupo de Investigación en Bioquímica y Microbiología (GIBIM), Universidad Industrial de Santander

andreaoter30@gmail.com

PALABRAS CLAVES: Cáncer, mitocondria, docking molecular

El cáncer de cérvix ocupa la posición número cuatro entre las principales causas de muerte en mujeres alrededor del mundo.¹ El tratamiento quimioterapéutico es efectivo, no obstante, la farmacorresistencia y los efectos secundarios producidos, generan la necesidad de identificar nuevos compuestos

Empleando la interfaz Maestro 2021-1, desarrollada por Schrodinger, se realizó un screening virtual de 229 metabolitos, utilizando la herramienta Glide frente a la subunidad 4 del complejo IV de la ETC (PDBID: 5z62, resolución de 3.60 Å)². La selección se realizó mediante la inspección visual de las interacciones proteína-ligando.

Los resultados obtenidos a partir del docking molecular sugieren que los compuestos quercetina, timol y sulindac con docking score/energía de afinidad de -2.707/-97.406 Kcal/mol, -2.05/-68.245 Kcal/mol y -3.364/-39.248 Kcal/mol, respectivamente, interaccionan con la subunidad 4 de la citocromo c oxidasa (complejo IV) en los residuos aminoácidos específicos Met119, Lys122, Tyr126 y Leu129, a través de interacciones hidrofóbicas, puentes de hidrogeno, y π -catión. Con base en lo anterior, se espera que los metabolitos seleccionados puedan generar inhibición en la cadena de respiración mitocondrial y de esta forma inducir la muerte celular en la línea de cáncer de cuello uterino, HeLa.

REFERENCIAS:

1. GLOBOCAN. 2020. Cervical cancer elimination | UICC.
2. H.M. Berman, J. Westbrook, Z. Feng, G. Gilliland, T.N. Bhat, H. Weissig, I.N. Shindyalov, P.E. Bourne 5Z62: Structure of human cytochrome c oxidase. RCSB-PDB 2000, 28, 235-242.
3. Oliva, C. R., Zhang, W., Langford, C., Suto, M. J., & Griguer, C. E. Repositioning chlorpromazine for treating chemoresistant glioma through the inhibition of cytochrome c oxidase bearing the COX4-1 regulatory subunit. Oncotarget 2017, 8, 23.



VEGETAL & AGRICULTURA

SLNC2-719

EXPLORACIÓN DE LOS MECANISMOS DE RESISTENCIA A CADMIO A TRAVÉS DEL ANÁLISIS GENÓMICO DE DOS HONGOS NATIVOS (*Annulohyphoxylon stygium* y *Aaosphaeria arxii*) PRESENTES EN SUELOS CACAOTEROS DEL MUNICIPIO DE YACOPÍ-CUNDINAMARCA.
González B. Diego A., Córdoba-Novoa Henry, Roa P. Yesica D, Gómez V. Yolanda, Torres R. Esperanza, Gribskov Michael

Universidad Nacional de Colombia
diagonzalezbe@unal.edu.co

PALABRAS CLAVE: Illumina, ensamblaje, anotación, metales pesados, transportadores, cacao.

Introducción: El cadmio es un metal pesado, tóxico, presente en el suelo que puede ser tomado, transportado y acumulado por las plantas. El uso de hongos con capacidad para tolerar altas concentraciones cadmio es considerado una estrategia para disminuir la contaminación por cadmio y su translocación a órganos vegetales.

MÉTODOS: Se utilizaron los hongos *Annulohyphoxylon stygium* y *Aaosphaeria arxii*, aislados de suelos cacaoteros con altas concentraciones de cadmio en Cundinamarca. La secuenciación del ADN se realizó mediante Illumina HiSeq 4000, el ensamblaje del genoma y la predicción de genes se realizó con herramientas bioinformáticas de Spades y Augustus, respectivamente.

RESULTADOS Y CONCLUSIONES: *Annulohyphoxylon stygium* y *Aaosphaeria arxii*, son hongos nativos tolerantes a cadmio que pertenecen a la división Ascomycota, familias Xylariaceae y Pleosporomycetidae, respectivamente. La exploración inicial de estos genomas representa una gran oportunidad para estudiar los elementos genéticos involucrados en los mecanismos de tolerancia a metales pesados en hongos.

El tamaño y a la predicción de genes obtenida fue similar en ambos genomas. El tamaño del genoma estimado para ambas especies fue alrededor de 39.5 MB y el número de genes estimado correspondió a 9624 y 9532 para *A. stygium* y *A. arxii*, respectivamente. De acuerdo con las anotaciones realizadas, cerca del 10% de los genes identificados pertenecen a la respuesta de defensa antioxidante y al metabolismo secundario, estos son mecanismos esenciales para la tolerancia al estrés oxidativo. Adicionalmente, en ambas cepas se encontraron genes directamente relacionados con genes transportadores de cadmio. Análisis más profundos para caracterizar los genomas se están llevando a cabo.

REFERENCIAS:

1. Cáceres-Zambrano, Y.; Córdoba-Novoa, H.A., Torres-Rojas, E. Culturable cadmium tolerant fungi isolated from cacao (*Theobroma cacao* L.)-cultivated soils. Submitted to Microbial Research.
2. Ding, S.; Ma, C.; Shi, W.; Liu, W.; Lu, Y.; Liu, Q.; Luo, Z. Exogenous glutathione enhances cadmium accumulation and alleviates its toxicity in *Populus × canescens*. *Tree Physiology*. **2017**, *37*(12), 1697-1712. Doi: /10.1093/treephys/tpx132
3. Keller, N. P. Fungal secondary metabolism: Regulation, function and drug discovery. *Nature Reviews Microbiology*. **2019**, *7*(3), 167-180. Doi: /10.1038/s41579-018-0121-1
4. Liu, P.; Huang, Z.; Luo, X.; Chen, H.; Weng, B.; Wang, Y.; Chen, L. Comparative transcriptome analysis reveals candidate genes related to cadmium accumulation and tolerance in two almond mushroom (*Agaricus brasiliensis*) strains with contrasting cadmium tolerance. **2020**, *PloS one*, *15*(9), e0239617. doi: 10.1371/journal.pone.0239617



SLNC2-434

CONTENIDO DE COMPUESTOS BIACTIVOS Y ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE CAMU-CAMU EN DIFERENTES ESTADOS DE MADURACIÓN.

Gloria Magally Paladines, Leicy Restrepo Cuellar, Anderson Anacona

g.paladines@udla.edu.co

PALABRAS CLAVES: Camu-camu, maduración, bioactivos y actividad antioxidante.

INTRODUCCIÓN

La caracterización química y funcional de frutos en varias etapas de desarrollo puede utilizarse para determinar tiempos óptimos de cosecha, maximizando y aprovechando sus principales componentes (Camargo Neves et al., 2015). En ese sentido, se estudió el contenido de compuestos bioactivos y actividad antioxidante del fruto amazónico camu-camu en diferentes estados de maduración.

MÉTODOS

El camu-camu se recolectó en estados de maduración: verde, pintón, maduro y sobremaduro. Se preparó extractos hidroalcohólicos diferentes con su cáscara, pulpa y semilla. Se determinó el contenido de flavonoides, fenoles, antocianinas, ácido ascórbico (Imán Correa et al., 2011), carotenoides (Camargo Neves et al., 2015). Además, la actividad antioxidante por los métodos FRAP, DPPH y ABTS (Shah & Modi, 2015).

RESULTADOS Y CONCLUSIÓN

En el contenido de Flavonoides, fenoles y ácido ascórbico se encontró un mayor contenido en la cáscara (1125,86mgcat/g, 3365,02mgA.G/g y 1710,15mgA.A/g, respectivamente), con diferencias significativas con respecto a la pulpa (113,13mgcat/g, 1119,57mgA.G/g y 999,67mgA.A/g, respectivamente) y semillas (132,62mgcat/g, 1091,50mgA.G/g y 769,63mgA.A/g, respectivamente). Así mismo, se reportó un mayor contenido de antocianinas en la pulpa (42,54 mgCian-glu/g) sin diferencias significativas con cáscara (41,73 mgCian-glu/g) pero si con semillas (0,85mgCian-glu/g). En cuanto a la actividad antioxidante (DPPH, ABTS y FRAP), se presentó un mayor potencial en las semillas (2461,80μmolTX/g, 5605,46μmolTX/g y 8769,14μmolA.A/g, respectivamente) con diferencias significativas con respecto a la cáscara (1376,45μmolTX/g, 518,81μmolTX/g y 7182,99μmolA.A/g, respectivamente) y pulpa (1046,72μmolTX/g, 5605,46μmolTX/g y 4681,62μmolA.A/g, respectivamente). Por otro lado, se encontró que hubo variabilidad en los estados de maduración con resultados muy promisorios en el estado pintón con diferencias significativas frente a verde, maduro y sobremaduro

INSTITUCIONES FINANCIADORAS

Universidad de la Amazonia, Florencia Caquetá

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Camargo Neves, L., Xavier da Silva, V., Alves Pontis, J., Flach, A., & Roberto, S. R. (2015). Bioactive compounds and antioxidant activity in pre-harvest camu-camu [*Myrciaria dubia* (H.B.K.) Mc Vaugh] fruits. *Scientia Horticulturae*, 186, 223–229. <https://doi.org/10.1016/j.scienta.2015.02.031>

Imán Correa, S., Bravo Zamudio, L., Sotero Solís, V., & Oliva Cruz, C. (2011). Vitamin C content in fruits of camu camu *Myrciaria dubia* (H.B.K) Mc Vaugh, in four states of maturation, coming from the Collection of Germoplasma of the INIA Loreto, Peru. *Scientia Agropecuaria*, 2, 123–130. <https://doi.org/10.17268/sci.agropecu.2011.03.01>

Shah, P., & Modi, H. A. (2015). Comparative Study of DPPH, ABTS and FRAP Assays for Determination of Antioxidant Activity. *International Journal for Research in Applied Science & Engineering Technology (IJRASET)*, 3(98), 2321–9653.



SLPC2-711

OPTIMIZACIÓN DE LA EXTRACCIÓN DE ADN MICROBIANO EPÍFITO PARA SECUENCIACIÓN ASOCIADO A LA FILÓSFERA Y HOJARASCA DE SISTEMAS PRODUCTIVOS DE CACAO CON ALTAS CONCENTRACIONES DE CADMIO EN EL SUELO.

Roa P. Yesica. D., Torres-Rojas. Esperanza.
Universidad Nacional de Colombia

ydroap@unal.edu.co

Los microorganismos que habitan sobre las hojas interactúan con la planta, estas interacciones pueden ser patogénicas o benéficas. Los microorganismos pueden promover el crecimiento vegetal, degradar la materia orgánica, participar en el ciclaje de nutrientes, o mitigar la absorción y transporte de cadmio hacia diferentes órganos vegetales. Se utilizó la metagenómica para caracterizar la comunidad presente sobre la filósfera y la hojarasca de cultivos cacaoteros. Se tomaron muestras de hojarasca y hojas de plantas crecidas en suelos con cadmio. Se evaluó diferentes técnicas de extracción de ADN de microorganismos epífitos y de recuperación de microorganismos. La recuperación de los microorganismos epífitos mediante lavados del material vegetal con NaCl 0,9% en combinación con la extracción de ADN con métodos convencionales: CTAB, SDS y kit Power Soil, arrojó bajos rendimientos de ADN (0-16 ng) y baja calidad del ADN ($260/280 < 1.7$; $260/230 < 1$). Resultados similares se obtuvieron con la recuperación de microorganismos mediante el buffer K_2HPO_4 0,1M y utilizando los métodos convencionales de extracción de ADN. Sin embargo, se observó que al combinar el buffer K_2HPO_4 y el kit Power Soil los resultados eran homogéneos y reproducibles en rendimiento y la calidad del ADN a pesar de la baja concentración obtenida. Por eso, se realizó ajustes en la recuperación de microorganismos epífitos utilizando un filtro de 0,2 μ m. Este se sumergió en el buffer-lisis del Kit Power Soil, obteniéndose mayor rendimiento (7-21ng), mejor calidad ($260/280: 1.7-2.2$; $260/230: 1-1.5$) y fue amplificable con diferentes marcadores rRNA.

REFERENCIAS:

1. Bodenhausen, N.; Horton, M.; Bergelson, J. Bacterial Communities Associated with the Leaves and the Roots of *Arabidopsis thaliana*. **2013**. *PLoS ONE* 8(2): e56329. doi: 10.1371/journal.pone.0056329.
2. Maropola, M.; Ramond, J.; Trindade, M. Impact of metagenomic DNA extraction procedures on the identifiable endophytic bacterial diversity in *Sorghum bicolor* (L. Moench). **2015**. *J. Microbiol. Methods*, 112, 104-117. doi: 10.1016/j.mimet.2015.03.012
3. Ruiz-Pérez, C.; Restrepo, S.; Zambrano, M. Microbial and functional diversity within the phyllosphere of Espeletia Species in an Andean High-Mountain ecosystem. **2016**. *Appl Environ Microbiol*, 82(6) 1807-1817. doi: 10.1128/AEM.02781-15



11 AL 15 DE OCTUBRE 2021

**CENTRO DE CONVENCIONES
JULIO CESAR TURBAY
CARTAGENA DE INDIAS**

SOCIEDAD COLOMBIANA DE CIENCIAS QUÍMICAS

sccq@sccq.com.co / +57 3204721808