

ENAQUI

LIBRO DE RESÚMENES

Noveno Encuentro Nacional de Química

ENAQUI 9

21 al 24 de octubre de 2025

Torre de Telecomunicaciones de Antel, Montevideo, Uruguay

Organizan:

PEDECIBA
MEC-UDELAR

Facultad
de Química
UDELAR - Uruguay

Auspician:

Facultad
de Química
UDELAR - Uruguay

FACULTAD DE
CIENCIAS
UDELAR fcien.edu.uy

FACULTAD DE
AGRONOMÍA

FACULTAD DE
INGENIERÍA
UDELAR

FACULTAD DE MEDICINA MONTEVIDEO
1875

UNIVERSIDAD
DE LA REPÚBLICA
URUGUAY

Institut Pasteur
de Montevideo

iibce
INSTITUTO DE INVESTIGACIONES
BIOLÓGICAS CLEMENTE ESTABLE

Asociación de Universidades
GRUPO MONTEVIDEO

CENUR
Litoral Norte

Sponsors:

Empresas expositoras:

Premio Nacional en Ciencias Químicas:

Comité Organizador

Gabriela Irazoqui

(Área Bioquimica,Departamento de Biociencias,Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay)

Silvana Alborés

(Área Microbiología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay)

César Iglesias

(Área Microbiología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay)

Eduardo Dellacassa

(Área Estructura y Análisis Orgánico, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay)

Franco Vairoletti

(Laboratorio de Biología de Gusanos, Institut Pasteur Montevideo, Montevideo, Uruguay)

Guillermo Bragunde

(Laboratorio de Ecología Química, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay)

Gustavo Mourglia-Ettlin

(Área Inmunología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay)

Mariano Romero

(Área Física, Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay)

Ignacio Machado

(Área Química Analítica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay)

Lucía Pareja

(Departamento de Química del Litoral, Cenur Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay)

Índice

Resúmenes de Conferencias……7

Resúmenes de Presentaciones Orales……22

Resúmenes de Pósters……68

CONFERENCIAS

Conferencias

Conferencia Plenaria Inaugural (Martes 21/10 – 16:00-17:00)

Dra. Valeria Edelsztein - *¿Libre de químicos? El desafío de comunicar Química en un mundo que la odia*

Conferencia Invitada 1 (Martes 21/10 – 17:00-17:30)

Dra. Virginia López - *De la mesada al paciente: el camino de SANA, un fármaco uruguayo para la obesidad y la diabetes*

Conferencia Plenaria 1 (Miércoles 22/10 – 10:00-11:00)

Dr. Carlos Martínez - *Impacto de las Tecnologías de Biocatálisis en la Industria Farmacéutica*

Conferencia Invitada 2 (Miércoles 22/10 – 12:30-13:00)

Dra. Karen Ovsejevi - Inmovilización de enzimas: una estrategia para potenciar el uso de biocatalizadores en la reducción de la contaminación acuífera

Conferencia Invitada 3 (Miércoles 22/10 – 14:00-14:30)

Dra. Ana Rey - 60 aniversario del Área Radioquímica de la Facultad de Química: Aportes a la investigación y a la docencia en Radiofarmacia en la región

Conferencia Plenaria 2 (Jueves 23/10 – 10:00-11:00)

Dr. Marcelo Alarcón - *Microplásticos como xenobióticos emergentes: rutas de exposición y disrupciones moleculares en el cuerpo humano*

Conferencia Invitada 4 (Jueves 23/10 – 12:30-13:00)

Dra. Valery Bühl - *Arsénico en aguas subterráneas: integrando Química, Geología, Toxicología y Medicina*

Conferencia Invitada 5 (Jueves 23/10 – 14:00-14:30)

Dr. Williams Porcal - *Materias primas renovables a partir de biomasa: Construcción de arquitecturas moleculares utilizando plataformas químicas furánicas*

Conferencia Invitada 6 (Jueves 23/10 – 16:00-16:30)

Dra. Laura Fariña - *De lo deseables a lo indeseable: el rol de los compuestos volátiles como indicadores de calidad en alimentos y bebidas*

Conferencia Plenaria 3 (Viernes 24/10 – 10:00-11:00)

Dr. Ernesto Rodríguez - *Glicosilación tumoral: un factor clave en la modulación de respuestas inmune*

Conferencia Invitada 7 *(Viernes 24/10 – 12:30-13:00)*

Dra. Carmina Reyes - *POLYMERA: De la investigación al emprendimiento científico*

Conferencia Plenaria de Clausura *(Viernes 24/10 – 16:00-17:00)*

Dr. Hugo Cerecetto - *Desarrollo de agentes híbridos para el tratamiento de glioblastoma*

¿Libre de químicos? El desafío de comunicar química en un mundo que la odia.

Valeria Edelsztein

Centro de Formación e Investigación en Enseñanza de las Ciencias (CEFIEC), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires - CONICET, Buenos Aires, Argentina.

valeria.edelsztein@gmail.com

¿Cómo enseñar química en un contexto donde el término "químico" se ha vuelto sinónimo de veneno? ¿En qué deberíamos centrarnos cuando comunicamos nuestro trabajo para poder interpelar al público? ¿Qué es lo que esperamos cuando decimos que buscamos ciudadanos "científicamente alfabetizados"? Vamos a hacer un viaje por historias de la ciencia que nos invitan a reflexionar acerca de estas cuestiones ¡y muchas más!

De la mesada al paciente: el camino de SANA, un fármaco uruguayo para la obesidad y la diabetes

Virginia López[1, 2]

[1]*Departamento de Química Orgánica. Facultad de Química. Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Laboratorio de Síntesis Orgánica y Desarrollo de Fármacos, Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay.*

vlopez@fq.edu.uy

La obesidad y la diabetes tipo 2 constituyen una de las principales causas de morbimortalidad en el mundo y representan un desafío sanitario global. Aunque terapias recientes, como los agonistas del receptor GLP-1, han marcado un avance, el tratamiento de la obesidad sigue requiriendo estrategias complementarias que actúen por vías nuevas y sinérgicas.

Hace más de una década iniciamos una línea de investigación orientada al diseño y síntesis de pequeñas moléculas con actividad antiinflamatoria y metabólica. De ese trabajo surgió una familia de compuestos nitroalqueno, entre los cuales destacó SANA, un derivado nitroalqueno de salicilato con un perfil singular: reducción de la esteatosis hepática, mejora en la sensibilidad a la insulina y disminución del peso corporal en modelos de obesidad inducida por dieta. Su mecanismo de acción resultó innovador: activar el metabolismo dependiente de creatina y el aumento del gasto energético en tejido adiposo, independiente de UCP1 y de la vía de AMPK, incluso en condiciones de termoneutralidad.

Llevar a SANA, una pequeña molécula surgida en el laboratorio, hacia su desarrollo como fármaco fue un camino desafiante. En 2016, con el licenciamiento de las patentes y un fondo semilla de CITES (Argentina), nació EOLO Pharma, una startup de base científico-tecnológica destinada a impulsar el proceso de transferencia, llevar el SANA del laboratorio al paciente. Tras años de trabajo y rondas de inversión privada, avanzamos con estudios preclínicos regulatorios, la producción bajo estándares GMP (CMC) y la primera evaluación clínica en humanos.

En 2023, el estudio fase I realizado en Australia demostró que SANA es seguro, bien tolerado y, en solo dos semanas de administración, produjo efectos favorables en el peso corporal y en el control de glucosa. Estos hallazgos posicionan a SANA como el primer activador de la termogénesis dependiente de creatina, y a su recorrido —desde la idea académica hasta el primer ensayo clínico— como un ejemplo del potencial científico de nuestro país para generar innovación con impacto global.

Impacto de las Tecnologías de Biocatálisis en la Industria Farmacéutica

Carlos A. Martinez[1]

[1]*Biocatalysis Center of Excellence, Chemical Research and Development, Pfizer Global Research, Groton, CT, USA*

carlos.martinez6@pfizer.com

Charla centrada en describir la biocatálisis como tecnología y el impacto en la aceleración y el desarrollo la síntesis eficientes y sostenibles de medicamentos. Se presentarán varios ejemplos ilustrando aplicaciones a nivel industrial, destacando la importancia que tiene el tener librerías diversas y amplias de varias clases de enzimas en la integración de esta tecnología en los flujos de trabajo en la química de procesos. También habrá una descripción del uso de la ingeniería de enzimas, y se presentará estas técnicas como un requisito absoluto para el desarrollo de aplicaciones de alta productividad. Por último, se discutirán tecnologías emergentes y sus limitaciones, incluyendo nuevas plataformas enzimáticas, la ingeniería de proteínas dirigida por la computación y la biocatálisis en sistemas continuos.

Inmovilización de enzimas: una estrategia para potenciar el uso de biocatalizadores en la reducción de la contaminación acuífera

Karen Ovsejevi

Área Bioquímica, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

La contaminación de aguas generada por las diversas actividades humanas, entre ellas la agricultura (fertilizantes y pesticidas), la industria (descargas de desechos), la metabolización de fármacos (descarte en heces y orina) y la actividad doméstica (productos químicos y detergentes) representa un gran desafío ambiental. El tratamiento de efluentes es una estrategia con gran potencial para mitigar esta contaminación antropogénica. No obstante, aunque existen diversos métodos químicos y físicos para la remoción de contaminantes, estos a menudo presentan limitaciones como elevados costos, largos tiempos para completar el proceso, baja eficiencia o la generación de subproductos más tóxicos. Por este motivo existe la necesidad de nuevas tecnologías eficientes y ambientalmente amigables. En este contexto, las biotransformaciones enzimáticas, especialmente aquellas que utilizan enzimas con baja especificidad como las lacasas (oxidorreductasas, EC 1.10.3.2), representan una opción muy prometedora. Estas enzimas tienen la capacidad de oxidar una amplia variedad de compuestos fenólicos sin necesidad de cofactores, y, en presencia de mediadores, pueden actuar sobre compuestos más complejos. Sin embargo, sus aplicaciones biotecnológicas se ven limitadas debido a su inestabilidad en forma soluble, la imposibilidad de reutilizarlas y la dificultad para obtener productos libres de enzima. Una alternativa para superar estos inconvenientes es utilizar la enzima inmovilizada a un soporte. En la presente disertación nos centraremos en el desarrollo de biocatalizadores insolubles en base a lacasas y su aplicación a la biotransformación de colorantes y compuestos con actividad estrogénica. Las lacasas utilizadas fueron producidas por cepas nativas de basidiomicetes e inmovilizadas mediante distintos métodos de inmovilización (covalente reversible, entrapamiento y adsorción) y en diferentes soportes (comerciales, biopolímeros obtenidos a partir de recursos renovables y materiales mesoporosos en base a silicio). Los contaminantes fueron seleccionados por sus impactos negativos en el medio ambiente y la salud humana. Los colorantes son compuestos recalcitrantes, reducen la cantidad de luz solar disponible para los organismos fotosintéticos, así como la cantidad de oxígeno disuelto en el agua, lo que afecta a los ecosistemas acuáticos y algunos de ellos y/o sus productos de degradación son tóxicos y potencialmente cancerígenos. Las sustancias hormonalmente activas pueden ocasionar reducción de la fertilidad, cáncer de mama, cáncer de próstata y en animales acuáticos pueden dar lugar a la feminización de los machos y hermafroditismo. Las diversas metodologías permitieron obtener lacasas insolubles con gran capacidad para biotransformar contaminantes de muy variada estructura química, demostrando que el proceso de inmovilización es una valiosa herramienta para potenciar el uso de estas oxidorreductasas en el tratamiento de aguas contaminadas.

60 aniversario del Área Radioquímica de la Facultad de Química: aportes a la investigación y a la docencia en Radiofarmacia en la región

Ana Rey

Área Radioquímica, Departamento "Estrella Campos", Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

arey@fq.edu.uy

El Área Radioquímica de la Facultad de Química fue fundada por el Dr. Jorge Servián en 1965 y desde sus inicios estuvo fuertemente volcada hacia el apoyo de la Medicina Nuclear. La Medicina Nuclear es una especialidad médica que utiliza compuestos radiactivos (radiofármacos) para diagnóstico y terapia, estudiando la funcionalidad de los órganos y más recientemente procesos bioquímicos "in vivo". Para ello es imprescindible contar con Radiofármacos sensibles y específicos dirigidos hacia marcadores moleculares característicos de las diversas enfermedades.

El desarrollo de un Radiofármaco es un proceso multidisciplinario que involucra síntesis orgánica e inorgánica, radioquímica, biología molecular, trabajo con células en cultivo y con animales de experimentación. Su preparación en clínica implica conocimientos farmacéuticos y condiciones de buenas prácticas para preparación y control de calidad de fármacos inyectables.

Nuestro grupo ha realizado en estos 60 años un intenso trabajo de investigación y docencia en Radiofarmacia, no solamente a nivel nacional sino de la región ya que esta área cuenta con muy poco desarrollo a nivel académico en Latinoamérica.

En docencia se destaca la colaboración con el Organismo Internacional de Energía Atómica, que culminó con la instauración del Diploma de Especialista en Radiofarmacia, que iniciando en 2016 ya cuenta con egresados de Uruguay, Colombia, Costa Rica, Argentina y Bolivia.

En investigación se trabaja en el desarrollo y evaluación de potenciales radiofármacos oncológicos de ^{99m}Tc derivados de nitroimidazoles como marcadores de hipoxia tumoral, derivados de estradiol con potencial interacción con los receptores de estrógenos, derivados del fármaco antiandrogénico flutamida en cáncer de próstata, etc. Los tipos de compuestos desarrollados han sido principalmente complejos tricarbonílicos de Tc(I) (monoméricos), nitrido complejos simétricos de Tc(V) (homodiméricos) y complejos tricarbonílicos de Tc(I) de tipo 2+1 dirigidos a 2 blancos moleculares diferentes (heterodiméricos). También se trabaja en conjunto con el Centro Uruguayo de Imagenología Molecular (CUDIM) en el desarrollo de radiofármacos de ^{11}C y ^{18}F para enfermedades neurodegenerativas y para diagnóstico de infecciones utilizando ^{68}Ga, ^{11}C y ^{18}F.

Otros ámbitos en los que nuestra área ha realizado grandes aportes son la puesta en marchao y consolidación del CUDIM y el servicio de Dosimetría Interna de trabajadores ocupacionalmente expuestos.

Agradecimientos: Pedeciba-Química, CSIC, ANII, CUDIM, Centro de Medicina Nuclear, Hospital de Clínicas,

Microplásticos como xenobióticos emergentes: rutas de exposición y disrupciones moleculares en el cuerpo humano.

Marcelo Alarcón

Thrombosis Research Center and Healthy Aging, and Department of Clinical Biochemistry and Immunohematology, Faculty of Health Sciences, Universidad de Talca, 2 Norte 685, Talca, Chile.

malarcon@utalca.cl

Los microplásticos (MPs), definidos como partículas poliméricas menores a 5 mm, constituyen una clase creciente de contaminantes ambientales persistentes. Su presencia ha sido documentada en múltiples matrices biológicas humanas, incluyendo sangre, placenta, pulmón e intestino, lo que evidencia su capacidad para atravesar barreras biológicas y bioacumularse en tejidos. La exposición humana ocurre principalmente por ingestión, inhalación y, en menor grado, por contacto dérmico, favorecida por su ubicuidad en alimentos, agua potable y aire ambiental.

Una vez internalizados, los MPs pueden inducir respuestas celulares complejas a través de mecanismos dependientes de tamaño, carga superficial, y composición química, incluyendo aditivos como ftalatos y bisfenoles. Estudios *in vitro* e *in vivo* han demostrado que estas partículas pueden activar vías de estrés oxidativo, respuestas inflamatorias mediadas, y alteraciones en la señalización mitocondrial, favoreciendo apoptosis, autofagia disfuncional y senescencia celular. Asimismo, se ha observado disrupción de uniones intercelulares en epitelios intestinales y pulmonares, y potenciales efectos sobre la integridad de la barrera hematoencefálica.

Durante esta exposición se abordarán rutas de exposición sistémica a MPs, biodistribución orgánica, interacciones célula-partícula y evidencia experimental sobre su impacto en órganos diana como intestino, hígado, cerebro y sistema cardiovascular. Se discutirán además los efectos inmunotóxicos emergentes, incluyendo activación plaquetaria y desequilibrio de ejes citoquínicos, con especial énfasis en modelos de inflamación crónica y envejecimiento. La comprensión de estos mecanismos resulta clave para evaluar el riesgo toxicológico de los microplásticos como xenobióticos de preocupación global.

Arsénico en aguas subterráneas: integrando Química, Geología, Toxicología y Medicina

Valery Bühl

Química Analítica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

vbuhl@fq.edu.uy

La presencia de arsénico natural en aguas subterráneas es un problema ambiental que afecta a muchas regiones del mundo, y Uruguay no está exento. En nuestro país, existen zonas donde las aguas subterráneas contienen arsénico en niveles superiores a los recomendados por organismos internacionales, por lo que las poblaciones potencialmente expuestas a este tóxico son, principalmente, aquellas que consumen agua de perforaciones, lo que generalmente ocurre en zonas rurales.

Este tema requiere un abordaje interdisciplinario para su estudio, comprensión y búsqueda de soluciones con aportes de la geología, la toxicología, la medicina y por supuesto, de la química. En este marco, hemos conformado un grupo de trabajo que viene desarrollando investigaciones conjuntas desde esta perspectiva integradora.

Se presentarán los resultados de proyectos financiados y tesis de posgrado que abordan diferentes aspectos del problema: desarrollo de metodologías analíticas para la determinación de arsénico, estudios de los niveles de este contaminante en aguas de pozos de zonas rurales de Uruguay, factores que favorecen la movilización del arsénico desde los minerales hacia las aguas, posibilidades de remediación, evaluación de riesgos a la salud y evaluación de la exposición al arsénico de poblaciones que beben dichas aguas.

Asimismo, se abordarán los retos del trabajo interdisciplinario, resaltando cómo la química, junto con la toxicología, la geología y la medicina, superando desafíos de comunicación y enfoques, logran contribuir al estudio y a la búsqueda de posibles soluciones para este y otros problemas ambientales complejos.

Materias Primas Renovables a Partir de Biomasa: Construcción de Arquitecturas Moleculares Utilizando Plataformas Químicas Furánicas

Williams Porcal[1,2]; Gloria Virginia López[1,2]

[1]*Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Síntesis Orgánica y Desarrollo de Fármacos, Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay*

wporcal@fq.edu.uy

En la actualidad, nos encontramos ante la urgente necesidad de que la química ejerza una influencia positiva sustancial sobre el impacto ambiental, mediante productos y procesos químicos. Para lograr estos objetivos, debemos prestar especial atención a la sustentabilidad de los recursos. La biomasa obtenida a partir de materia orgánica presente en las plantas, así como de los residuos agrícolas e industriales, representa la reserva más abundante de materiales renovables en nuestro planeta. Variadas y destacadas posibilidades de investigación e innovación nos brindan las materias primas renovables obtenidas a partir de la biomasa, dentro del dominio de la síntesis orgánica hacia el desarrollo sustentable.

El uso de plataformas químicas a partir de biomasa como recurso de carbono renovable representa una oportunidad para el diseño y síntesis de nuevos productos químicos. En este sentido, nuestro grupo se ha centrado en diferentes reacciones en el campo de la química orgánica, empleando principalmente plataformas furánicas como compuestos renovables derivados de la biomasa celulósica. El objetivo principal es generar productos de alto valor, con especial énfasis en el desarrollo de nuevas moléculas bioactivas y potenciales candidatos a fármacos.



Referencias:

(1) Queneau, Y.; Han, B. *The Innovation*. 3, 100184, (2022)

(2) López, G.V.; Porcal, W. *Pure Appl Chem*. 96(9), 1271-1277, (2024)

De lo deseable a lo indeseable: el rol de los compuestos volátiles como indicadores de calidad en alimentos y bebidas

Laura Fariña[1]; Lucia Almeida[1]; Gonzalo Baldivia[1]; Noela Gonzalez[1]; Belen Listur[1]; Eduardo Boido[1], Andrés Coniberti[2]; Valentina Martín[1]; Karina Medina[1]; Francisco Carrau[1]; Eduardo Dellacassa[3]

[1]Área de enología Y biotecnología de las Fermentaciones, Departamento de Ciencia y tecnología de los Alimentos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay
[2] Viticultura, Estación Experimental INIA-Las Brujas
[3]Laboratorio de Biotecnología de Aromas, Departamento de Química Orgánica Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay
lfarina@fq.edu.uy

Los compuestos volátiles desempeñan un rol clave en la calidad sensorial de alimentos y bebidas, actuando tanto como marcadores positivos relacionados con el origen, la tipicidad o la calidad percibida, así como negativos, asociados a defectos. El análisis de compuestos volátiles constituye una herramienta transversal para el desarrollo de alimentos y bebidas más saludables, diferenciados y sustentables.

En el área de vitivinicultura, se presentarán resultados del trabajo sobre clones uruguayos de *Vitis vinifera* var. Tannat, variedad emblemática de Uruguay. A más de 150 años de su introducción, el país continúa utilizando clones de origen francés seleccionados con criterios que hoy resultan limitados para la elaboración de vinos de alta gama. En este contexto, se buscó identificar un clon adaptado a las condiciones locales, con atributos diferenciales en términos enológicos y sensoriales. El trabajo incluyó la evaluación del proceso de maduración, análisis de precursores aromáticos glicosilados (por GC-MS), carotenoides (por HPLC-DAD), y la realización de microvinificaciones con posterior caracterización sensorial. Los resultados revelaron diferencias significativas entre clones, permitiendo avanzar en la selección de un clon uruguayo de Tannat con menor potencial alcohólico, mayor resistencia a enfermedades fúngicas y perfil aromático distintivo.

En el caso de las mieles, se expondrán estudios enfocados en la caracterización de mieles provenientes de plantas nativas y cultivos introducidos, explorando sus perfiles volátiles, atributos sensoriales y propiedades nutracéuticas como la capacidad antioxidante, el contenido de polifenoles y la actividad antimicrobiana.

Finalmente, se compartirán experiencias vinculadas a la selección de levaduras no-*Saccharomyces* orientadas a modular el perfil aromático de bebidas fermentadas mediante la producción específica de metabolitos volátiles.

Glicosilación tumoral: un factor clave en la modulación de respuestas inmune

Ernesto Rodriguez

Tumor-Host Interaction Laboratory, The Francis Crick Institute, London, UK.

ernesto.rodriguez@crick.ac.uk

Las células tumorales son capaces de evadir la respuesta inmunitaria mediante varios mecanismos. Entre ellos, la glicosilación aberrante: una característica casi universal del cáncer que genera estructuras tumor-específicas capaces de modular la inmunidad antitumoral. Aquí analizamos cómo los cambios en la glicosilación contribuyen al escape inmunológico del adenocarcinoma ductal de páncreas (PDAC), un tipo tumoral extremadamente agresivo cuya supervivencia a cinco años es ~9 %. El análisis transcriptómico de muestras de pacientes reveló dos vías de glicosilación de especial relevancia clínica e inmunológica: la fucosilación y la sialilación.

La expresión de glicanos que contienen fucosa se asoció con el estado de transición epitelio-mesénquima, con subtipos moleculares descritos previamente y con el pronóstico de los pacientes. Estos glicanos actúan como ligandos de DC-SIGN en los macrófagos asociados al tumor, favoreciendo su polarización antiinflamatoria a través de la sobreexpresión de IL-10.

También constatamos un incremento general de la sialilación en PDAC. Los residuos de ácido siálico interactúan con receptores de la familia Siglec y promueven la diferenciación de monocitos infiltrantes hacia macrófagos inmunomoduladores, reforzando un microambiente tolerogénico que facilita la progresión tumoral.

Extendimos el análisis a 20 tipos tumorales adicionales, identificando genes y vias de glicosilación específicos para diferentes tejidos y asociados con la supervivencia de los pacientes. Nuestros hallazgos señalan ejes glico-inmunológicos prometedores que podrían convertirse en biomarcadores pronósticos y dianas terapéuticas, y abren la puerta a ensayos destinados a revertir la inmunosupresión mediada por glicanos.

POLYMERA: de la investigación al emprendimiento científico

Carmina Reyes

Laboratorio de Energías Renovables, IPTP, Facultad de Química, Uruguay

carmina@fq.edu.uy

El tránsito desde la investigación académica hacia la creación de industrias basadas en conocimiento representa uno de los mayores desafíos para abordar las problemáticas contemporáneas. Llevar los resultados del laboratorio a la sociedad implica reconocer que la ciencia no solo amplía nuestro entendimiento del mundo, sino que también puede transformarlo.

En ese marco surge POLYMERA, una empresa que nace en la Facultad de Química de la Universidad de la República, dedicada al desarrollo de materiales biobasados y biodegradables. El proyecto se originó en investigaciones sobre bacterias antárticas capaces de producir polímeros naturales con propiedades superabsorbentes. A partir de ese conocimiento, se consolidó una propuesta tecnológica orientada a enfrentar un problema ambiental global: la acumulación de residuos derivados de materiales no biodegradables.

POLYMERA es una empresa de biotecnología enfocada en crear una nueva generación de materiales sostenibles para reemplazar polímeros petroquímicos. Su primer producto, ChimeraSAP, es un superabsorbente biobasado y biodegradable diseñado para sustituir los polímeros sintéticos utilizados en pañales, toallas sanitarias y artículos para la incontinencia. La tecnología se basa en un biopolímero producido naturalmente por una bacteria antártica capaz de generar materiales con alta capacidad de absorción.

En esta charla se busca mostrar, a través del caso de POLYMERA, cómo la ciencia puede impulsar transformaciones profundas cuando se orienta a la creación de soluciones sostenibles. En el contexto latinoamericano, el desarrollo de empresas de base científica adquiere un valor estratégico: permite transformar conocimiento local en soluciones adaptadas a las realidades regionales, promover cadenas de valor sostenibles y fortalecer la independencia tecnológica. Este tipo de iniciativas no solo contribuye a diversificar las economías, sino también a generar empleo calificado, retener talento y posicionar la ciencia como motor del desarrollo social y ambiental.

La experiencia de POLYMERA demuestra que los emprendimientos científicos pueden convertirse en motores de cambio hacia un modelo de desarrollo más equitativo, sostenible y basado en conocimiento, donde la innovación se traduce en bienestar y resiliencia.

Desarrollo de agentes híbridos para el tratamiento de glioblastoma

Hugo Cerecetto

Área de Radiofarmacia, CIN y Grupo de Química Orgánica Medicinal, IQB, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

hcerecetto@cin.edu.uy

El glioblastoma (GBM) es uno de los tumores cerebrales primarios más agresivo y prevalente. A pesar de ciertos avances en los tratamientos, como la resección quirúrgica, la radioterapia y la quimioterapia, los GBM siguen estando asociados a un mal pronóstico con una supervivencia inferior a los 15 meses post-diagnóstico, representando un gran desafío en la oncología clínica. La terapia por captura neutrónica de boro (BNCT) ha sido propuesta como una buena estrategia terapéutica para GBM recurrentes o resistentes a tratamientos convencionales. Ésta se basa en la administración de agentes portadores de boro estable, seguida de la irradiación del tumor con neutrones donde se producen, por la reacción entre el nucleido ^{10}B y los neutrones, eventos citotóxicos que conllevan a la muerte del tejido tumoral. El desafío más importante en la BNCT es concentrar el daño en el tejido enfermo sin afectar los órganos sanos circundantes. En este sentido, utilizar las diferencias biológicas entre células sanas y tumorales puede ser la estrategia para la acumulación selectiva de agentes portadores de ^{10}B. En esta presentación se describirán nuestros hallazgos, químicos y biológicos, cuando se utilizó como bio-sistema diferencial, entre sistema sano y enfermo, a los receptores de tirosina quinasa (TKR). Estos se encuentran desregulados en GBM, lo que favorece la progresión tumoral, la invasión, la angiogénesis y la resistencia a la terapia, convirtiéndose los TKR en dianas relevantes para la terapia dirigida a través de inhibidores (TKRI). Los TKRI, covalentes y no-covalentes, interrumpirían las vías de señalización oncogénica. Nuestra línea de nuestro trabajo se centró en desarrollar agentes híbridos, constituidos: i) por farmacóforos de TKRI, como forma de promover toxicidad por esta vía pero además como forma de concentrar el agente en el tejido enfermo; y ii) por agrupamientos ricos en boro, como forma de usar BNCT.[1-8]

[1] Alamón C, et al. A potential boron neutron capture therapy agent selectively suppresses high-grade glioma: In vitro and in vivo exploration. Mol Pharm. 2023; 20: 2702. [2] Alamón C, et al. Exploring the cell death mechanisms of cytotoxic [1,2,3]triazolylcarborane lead compounds against U87 MG human glioblastoma cells. Chem Biol Drug Des. 2023; 101: 1435. [3] Alamón C, et al. Sunitinib-containing carborane pharmacophore with the ability to inhibit tyrosine kinases receptors FLT3, KIT and PDGFR-β, exhibits powerful in vivo anti-glioblastoma activity. Cancers (Basel). 2020; 12: 3423. [4] Couto M, et al. Bimodal therapeutic agents against glioblastoma, one of the most lethal forms of cancer. Chemistry. 2020; 26: 14335. [5] Couto M, et al. *Closo*-carboranyl- and metallacarboranyl [1,2,3]triazolyl-decorated lapatinib-scaffold for cancer therapy combining tyrosine kinase inhibition and boron neutron capture therapy. Cells. 2020; 9: 1408. [6] Couto M, et al. Carboranylanilinoquinazoline EGFR-inhibitors: toward “lead-to-candidate” stage in the drug-development pipeline. Future Med Chem. 2019; 11: 2273. [7] Couto M, et al. Discovery of potent EGFR inhibitors through the incorporation of a 3D-aromatic-boron-rich-cluster into the 4-anilinoquinazoline scaffold: Potential drugs for glioma treatment. Chemistry. 2018; 24: 3122. [8] Couto M, et al. Small-molecule kinase-inhibitors-loaded boron cluster as hybrid agents for glioma-cell-targeting therapy. Chemistry. 2017; 23: 9233.

PRESENTACIONES ORALES



Presentaciones Orales

Sesión 1 (Miércoles 22/10 – 11:30-12:30)

Auditorio Mario Benedetti

PO.01A-BQ Carmen Magallanes - *Caracterización molecular de aislamientos clínicos de Enterococcus faecium resistentes a vancomicina*

PO.02A-BQ Yamira Quintero - *Caracterización molecular de la β-mananasa de Penicillium sp. VA8*

PO.03A-QO Guillermo Bragunde - *Perfil de ésteres en cría de abejas melíferas: diferencias entre colonias resistentes y susceptibles a Varroa*

PO.04A-QO Luisina Rodriguez - *Comparación de dos métodos de análisis para la cuantificación de psilocina y psilocibina en hongos psicodélicos del Uruguay*

Sala Idea Vilariño

PO.01B-IA Nataly Rodríguez - *Perfil de elementos potencialmente tóxicos en lechuga de mar (Ulva sp.) de la costa este de Uruguay*

PO.02B-IA Delfina Quiñone - *Polímeros impresos fluorescentes: sondas prometedoras para la cuantificación de fluoruro en agua*

PO.03B-BQ Sylvia Cuchman - *Caracterización de antígenos O-específicos de Escherichia coli: Estudio estructural por RMN y análisis genético de clústeres biosintéticos en dos cepas novedosas*

PO.04B-BQ Gonzalo Lopez - *Del diseño asistido por computadora a la mesada: Un caso de éxito en mutación racional de una imino reductasa*

Caracterización molecular de aislamientos clínicos de *Enterococcus faecium* resistentes a vancomicina

Carmen Magallanes[1]; Eliana Eugster[1]; Felipe Clavijo[2]; Patricia Echeverría[3]; Josefina Torello[4]; Mercedes Castro[1,2]; Carolina Márquez[1,5]

[1]*Laboratorio de Microbiología Clínica, Departamento de Bioquímica Clínica, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*
[2]*Laboratorio de Microbiología molecular, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*
[3]*Laboartorio de la Sociedad Médica Universal, Montevideo, Uruguay.*
[4]*Laboratorio Central del HCFFAA, Montevideo, Uruguay.*
[5]*Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*

cmagallanes@fq.edu.uy

Enterococcus faecium es una bacteria cocos Gram positivo comensal del tracto gastrointestinal humano que ha adquirido gran relevancia como patógeno nosocomial. La vancomicina (VA) es el antibiótico de última línea para el tratamiento de infecciones causadas por esta bacteria, sin embargo, la aparición de *Enterococcus spp*. resistentes a VA (ERV) genera un desafío a nivel global, encontrándose entre los patógenos de alta prioridad, según la Organización Mundial de la Salud. El principal mecanismo de resistencia a la VA en *E. faecium* es la modificación del dímero de D-alanina en la pared celular, mediada por los genes *van*, siendo *vanA* y *vanB* los de mayor impacto clínico por su localización en elementos genéticos móviles[1]. En este trabajo se realizó la caracterización molecular de aislamientos ERV, con el objetivo de aportar a la epidemiología molecular de la resistencia en Uruguay. Se analizaron 5 aislamientos clínicos de ERV provenientes de centros de salud obtenidos desde abril a octubre de 2024. La identificación y sensibilidad fueron realizadas por el sistema VITEK® 2, la extracción de ADN total por el kit comercial Quick-DNA Fungal/Bacterial Miniprep Kit y la secuenciación por metodología de Oxford Nanopore Technologies. El análisis genómico se realizó mediante herramientas bioinformáticas y utilizando bases de datos. Todos los aislamientos fueron sensibles a linezolid y resistentes a ampicilina, ciprofloxacina y VA. Se detectaron genes de resistencia a antibióticos de uso clínico: *vanA*, *ermB*, *aac(6')-Ie-aph(2'')-Ia*, *ant(6)-Ia*, *aad(6)*, *aph(3')-IIIa*. Se observaron 4 secuenciotipos diferentes (ST*117*, ST*17*, ST*18* y ST*584*) que pertenecieron al complejo clonal epidémico CC17 y al clado filogenético A. Todos presentaron una plataforma genética de 10Kb que alberga los genes del operón *vanA*: vanSHAXYZ embebidos en un transposón Tn*1546*, interrumpido por la IS*1216* en localizaciones no descritas. Esta estructura genética se detectó insertada a su vez en plásmidos diferentes, un mega plásmido RepA_N/ Inc18 de 289 Kb que no contenía otros genes de resistencia y un plásmido multirresistente *rep17* de 39 Kb. Se describe la primera caracterización genómica de aislamientos clínicos de ERV en Uruguay y se destaca el potencial de transferencia horizontal del gen *vanA*. Este estudio brinda información útil para la vigilancia y control de infecciones.

[1]Lisotto P et al. (2021) Molecular Characterisation of Vancomycin-Resistant Enterococcus faecium Isolates Belonging to the Lineage ST117/CT24 Causing Hospital Outbreaks. *Front Microbiol*. 27; 12:728356.

Caracterización molecular de la β-mananasa de *Penicillium* sp. VA8

Yamira Quintero[1,2]; Fabián Mancioni[1]; Cesar Iglesias[2,3]; Paula Rodríguez[3,4]; Rosario Durán[5]; Magdalena Portela[5,6]; Cecilia Giacomini[1]

[1]Laboratorio de Bioquímica, DepBio, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.
[2]Laboratorio de Microbiología Molecular, DepBio, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.
[3]Laboratorio de Biocatálisis y Biotransformación, DepBio-DQO, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.
[4]Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.
[5]Unidad de Bioquímica y Proteómica Analíticas, IIBCE & Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay.
[6]Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay Montevideo, Uruguay.

yquintero@fq.edu.uy

La enzima 1,4-β-D-manan manohidrolasa (EC 3.2.1.78), conocida como endo-β-mananasa, cataliza la hidrólisis aleatoria de los enlaces β-1,4 manosídicos en β-mananos, glucomananos y galactomananos. Esta actividad genera β-manooligosacáridos (β-MOS) de distintos tipos y grados de polimerización, compuestos que han despertado gran interés por sus propiedades prebióticas e inmunoestimulantes. En el ámbito biotecnológico, las endo-β-mananasas de origen fúngico son herramientas interesantes para la valorización de biomasa vegetal, permitiendo la obtención de β-MOS a partir de residuos agroindustriales o sustratos comerciales de bajo costo. En este contexto, el presente trabajo se centró en la cepa fúngica *Penicillium* sp. VA8, identificada como fuente de endo-β-mananasa extracelular mediante screening en medio sólido y confirmada por ensayo de actividad ®-mananasa en el sobrenadante de cultivo. El análisis por TLC de hidrolizados enzimáticos de distintos mananos, tratados con el sobrenadante de cultivo, confirmó la actividad β-mananasa. Posteriormente, se purificó la enzima mediante cromatografía de intercambio iónico a pH 7,5, eluyendo con un gradiente de NaCl (0–0,5 M). Se partió de una actividad inicial de 120 mUE/mL en el sobrenadante de cultivo, obteniéndose una fracción activa (47 mUE/mL) a una concentración de 0,3 M NaCl. La enzima pura presentó un pH óptimo de 5,0, temperatura óptima de 50°C, con Km de 0,64% goma guar y Vmax de 156,25 mUE/mL. Se determinó el peso molecular en aproximadamente 55 kDa por cromatografía de exclusión molecular y SDS-PAGE. La presencia de glicosilaciones se evidenció por tinción PAS tras SDS-PAGE, y la posterior disminución en la masa aparente tras tratamiento con PNGasa confirmó la existencia de N-glicanos en la estructura de la enzima. En paralelo se está trabajando en la identificación molecular de la enzima mediante dos enfoques complementarios: i) aislamiento y secuenciación del ADN genómico del microorganismo; ii) digestión proteolítica con tripsina de la banda correspondiente a la enzima pura obtenida por SDS-PAGE, seguida del análisis peptídico por HPLC-MS. Con los resultados obtenidos se llevará a cabo un análisis de correlación entre los péptidos identificados y las secuencias codificantes presentes en el genoma, esto permitirá validar la identidad de la enzima como una endo-β-mananasa, identificar los posibles sitios de *N*-glicosilación, con miras a su posterior expresión en sistemas heterólogos como *Escherichia coli* y *Pichia pastoris*, facilitando la producción de preparaciones enzimáticas aptas para aplicaciones en salud humana y animal. Los resultados obtenidos evidencian que: i) se logró identificar, purificar y caracterizar una endo-β-mananasa extracelular producida por *Penicillium* sp. VA8., y ii) establecen las bases para el desarrollo de bioproductos de alto valor agregado y abren nuevas oportunidades para la producción recombinante de la enzima en sistemas heterólogos, con aplicaciones potenciales en salud humana y animal.

Perfil de ésteres en cría de abejas melíferas: diferencias entre colonias resistentes y susceptibles a Varroa

Guillermo Bragunde[1,2]; Karina Antunez[3]; Daniela Arredondo[3]; Belén Branchiccela[4]; Ciro Invernizzi[5]; Fanny Mondet[6]; Sofía Palacios[3]; Carmen Rossini[1]

[1]*Laboratorio de Ecología Química, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Programa de Posgrados de la Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay*

[3]*Laboratorio de Microbiología y Salud de las Abejas, Departamento de Microbiología, Instituto de Investigaciones Biológicas Clemente Estable, Montevideo, Uruguay*

[4]*Sección Apicultura, Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria, Colonia, Uruguay*

[5]*Sección Etología, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[6]*INRAE, UR 406 Abeilles et Environnement, Aviñón, Francia*

gbragunde@fq.edu.uy

Las abejas, *Apis mellifera* (Hymenoptera: Apidae), son insectos polinizadores clave para la producción de alimentos y generan productos de alto valor económico como miel, cera y propóleos. En los últimos años, se ha registrado una disminución global sostenida en el número de colmenas, siendo el ácaro *Varroa destructor* (Mesostigmata: Varroidae) una de las principales causas. En Uruguay, la pérdida anual ronda el 30%. Sin embargo, en el noreste del país (Treinta y Tres) se han identificado colonias capaces de sobrevivir sin tratamientos acaricidas, mientras que en el oeste (Colonia), las colonias requieren múltiples aplicaciones para sobrevivir. Estas dos poblaciones naturales representan un modelo valioso para investigar mecanismos asociados a la resistencia a Varroa.

En este estudio se analizó si el perfil químico de la cría podría estar vinculado a dicha resistencia. Se extrajeron larvas recién operculadas (< 6 h) de colonias resistentes y susceptibles a Varroa, y se analizaron por GC-FID diez feromonas de la cría (cinco ésteres metílicos y cinco etílicos), tras extracción con hexano y purificación por SPE. Los datos fueron analizados mediante modelos lineales mixtos, considerando el tipo de colmena como efecto fijo y la colmena como efecto aleatorio. Se encontraron diferencias estadísticamente significativas en tres ésteres etílicos (etil estearato, etil linoleato y etil oleato; $p < 0.05$), con concentraciones menores en las colonias resistentes. Estos compuestos han sido propuestos previamente como activadores de la reproducción del ácaro[1,2].

Nuestros resultados, en concordancia con reportes anteriores, sugieren que una menor emisión de señales químicas por parte de la cría podría limitar la reproducción de *Varroa destructor* en colmenas resistentes, contribuyendo a su supervivencia sin tratamientos acaricidas. Este hallazgo representa un aporte relevante para el diseño de estrategias de manejo integrado y selección de colmenas resistentes.

Referencias:

[1]Frey *et al.* (2013) *Journal of Invertebrate Pathology*

[2]Scaramella *et al.* (2024) *Scientific Reports*

Comparación de dos métodos de análisis para la cuantificación de psilocina y psilocibina en hongos psicodélicos del Uruguay

Luisina Rodriguez[1]; Guillermo Morera[2]; Sandra Lupo[2]; Danilo Davyt[1]; Elena E. Stashenko[3]; Andrés González[3]; Ignacio Carrera[1]; Gonzalo Hernández Dossi[1]

[1]Departamento de Química Orgánica, Facultad de química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

[2]Sección Micología, Facultad de ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

[3]Laboratorio de Cromatografía y Espectrometría de Masas (CROM-MASS), Universidad de Santander, Bucaramanga, Colombia

lrodriguez@fq.edu.uy

Los hongos de los géneros *Psilocybe, Conocybe y Panaeolus* que contienen psilocibina (PSB) y psilocina (PS) han sido utilizados en la historia con fines medicinales y espirituales [1]. Recientemente estudios clínicos que administran PSB para tratar diversas afecciones psiquiátricas han mostrado prometedores resultados [2]. Por lo tanto, la determinación cuali y cuantitativa de triptaminas presentes en hongos nativos, adquiere importancia. En ese sentido, la elección del método de extracción es clave para una cuantificación precisa, maximizar el rendimiento, minimizar la coextracción de interferentes y asegurar resultados reproducibles, especialmente en matrices complejas y especies poco estudiadas. El objetivo de este trabajo fue comparar dos métodos de extracción para PS y PSB: uno basado en la técnica de dispersión de la matriz en fase sólida (MSPD) y análisis por UHPLC-MS, y otro mediante extracción convencional con metanol asistida por ultrasonido, seguida de análisis por resonancia magnética nuclear cuantitativa (qRMN). La técnica MSPD se destaca por ser rápida, eficiente, con bajo consumo de solventes, mientras que la extracción por ultrasonido es más sencilla, pero puede requerir más etapas y tiempo. Para evaluar la recuperación de PS y PSB con MSPD se utilizó *Agaricus bisporus* como matriz fúngica sin triptaminas. Aunque el método mostró buenos resultados en esta matriz, su aplicación a hongos psicoactivos evidenció baja recuperación y reproducibilidad, probablemente por degradación enzimática de las triptaminas, ausente en *A. bisporus*. En contraste, la extracción por ultrasonido mostró excelentes porcentajes de recuperación, sin indicios de degradación, por lo que se concluyó que este método es el más adecuado. Este protocolo fue validado evaluando los límites de detección (LOD), de cuantificación (LOQ), precisión y recuperación de ambos compuestos.

Referencias

[1] Ott, J. Pharmacotheon: Entheogenic Drugs, Their Plant Sources and History; Co, N. P., Ed.; Kennewick, WA, 1993.

[2] Davis, A. K.; Barrett, F. S.; May, D. G.; Cosimano, M. P.; Sepeda, N. D.; Johnson, M. W.; Finan, P. H.; Griffiths, R. R. Effects of Psilocybin-Assisted Therapy on Major Depressive Disorder. JAMA Psychiatry 2021, 78 (5), 481. https://doi.org/10.1001/jamapsychiatry.2020.3285.

Perfil de elementos potencialmente tóxicos en lechuga de mar (*Ulva sp.*) de la costa este de Uruguay

Nataly Rodríguez[1,2]; Aline Simsen[3]; Lilian Fehlberg[3]; Filipe Rondan[3]; Gustavo Gohlke[4]; Marcia Mesko[3]; Erico Flores[4]; Fiorella Iaquinta[2]; Ignacio Machado[2]

[1]Programa de posgrado en química, Programa de desarrollo de las ciencias básicas (PEDECIBA)
[2]Grupo de Bioanalítica y especiación (BIOESP), Química Analítica, Facultad de Química, Universidad de la república, Montevideo, Uruguay
[3]Laboratorio de controle de contaminantes em biomateriais (LCCBio), Centro de ciências químicas, farmacêuticas e de alimentos, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas (RS), Brasil
[4]Laboratrio de análises químicas, industriais e ambientais (LAQUIA), Universidade Federal de Santa María, Santa Maria (RS), Brasil

natalyr@fq.edu.uy

El consumo de macroalgas se ha popularizado recientemente a nivel mundial debido a su composición rica en minerales, antioxidantes y fibras. Sin embargo, su capacidad de bioacumulación de ciertos elementos puede conducir a potenciales riesgos toxicológicos. En nuestro país el consumo es típico en la costa este, pero no existe información ni regulaciones asociadas al contenido de elementos potencialmente tóxicos en algas de consumo.
En este contexto, el objetivo del trabajo fue evaluar el perfil de elementos potencialmente tóxicos tales como mercurio (Hg), cromo (Cr), arsénico (As), bromo (Br) y yodo (I), comúnmente asociados al consumo de diversas algas, así como su posible impacto sobre la salud, en muestras de lechuga de mar (*Ulva sp.*) recolectadas en La Paloma, Rocha. Cabe destacar que, si bien el yodo es un elemento esencial, su rango de concentración segura es muy estrecho. La preparación de muestras para la determinación de Cr y As se realizó por digestión ácida asistida por microondas, donde 0,5 g de muestra se digirieron con 10,0 mL de ácido nítrico 2,9 mol L^{-1}. La determinación analítica de Cr se realizó mediante espectrometría de emisión atómica con plasma inducido por microondas (MP AES), mientras que la determinación analítica de As se realizó mediante esta técnica acoplada a generación de hidruros (HG-MP AES). La preparación de muestras para la determinación de Br y I se realizó por combustión asistida por microondas, utilizando 0,4 g de muestra, 50 µL de solución ignitora de nitrato de amonio 6 mol L^{-1} , 6,0 mL de solución absorbedora de hidróxido de amonio 150 mmol L^{-1} y presurización con O_2 a 20 bar. La determinación analítica se realizó mediante espectrometría de masas con plasma acoplado inductivamente (ICP-MS). La determinación analítica de Hg se realizó por espectrometría de absorción atómica por vapor frío utilizando una amalgama de oro mediante un analizador directo de mercurio (DMA). Todos los métodos analíticos fueron previamente validados, siendo los parámetros de desempeño adecuados para el fin propuesto. Los contenidos hallados (base seca) fueron: 15,3 ± 2,1µg kg^{-1} para Hg, 1,74 ± 0,44 mg kg^{-1} para Cr, 3,28 ± 0,35 mg kg^{-1} para As, 27,4 ± 3,9 mg kg^{-1} para I y 218,1 ± 3,3 mg kg^{-1} para Br. Considerando las ingestas diarias o semanales tolerables (TDI o TWI) relacionadas a estos elementos o sus formas químicas, se observó que la ingesta estimada se ubicó entre 0,04% (Cr) y 18,27% (I) de la TDI. Para el As, elemento que no posee TDI definida, se realizó una determinación preliminar de arsénico inorgánico (iAs = As (III) + As (V)), llegando a un contenido menor al 2,5% del total, el cual cumple ampliamente con la regulación internacional existente para esta especie. Estos resultados respaldan la inocuidad de *Ulva sp.* frente a estos elementos.

Polímeros impresos fluorescentes: sondas prometedoras para la cuantificación de fluoruro en agua

Delfina Quiñone[1,2]; Giammarco Romano[3]; Matteo Savastano[3]; Antonio Bianchi[3]; Andrea Bencini[3]; Margarita Brovetto[4]; Julia Torres[1]; Nicolás Veiga[1]

[1]Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.
[2]Programa de Posgrado en Química, Facultad de Química, UdelaR, Uruguay.
[3]Departamento de Química 'Ugo Schiff', Universidad de Florencia, Florencia, Italia.
[4]Laboratorio de Síntesis Orgánica, DQO, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.

delfina@fq.edu.uy

El anión fluoruro (F^-) está ampliamente distribuido en la corteza terrestre y en aguas naturales. Es un ejemplo de "arma de doble filo", ya que puede producir efectos beneficiosos o perjudiciales para la salud, dependiendo de su concentración.[1] Esto resalta la necesidad de desarrollar nuevos sensores de bajo costo y portátiles, capaces de monitorear *in situ* los iones F^-. Desafortunadamente, lograr una alta compatibilidad con medios acuosos y especificidad hacia el fluoruro sigue siendo un desafío. En este trabajo se diseñaron seis potenciales sensores fluorescentes de F^- basados en urea (**A1**-**A6**). **A6** mostró alta sensibilidad en agua (K_{SV} = 13 449 M^{-1}; LD = 0,7 µM), al igual que **A1** (K_{SV} = 871 M^{-1}, LD = 8 µM). Sin embargo, otros aniones como $H_2PO_4^-$ y Cl^- son interferentes importantes. Para mejorar la selectividad, ambos sensores se incluyeron en polímeros de impresión molecular (**A1P**, **A6P**).[2] **A1P** destacó por su buena sensibilidad, selectividad, reutilización y valores de recuperación en muestras reales (101–106%), cumpliendo con límites internacionales establecidos.

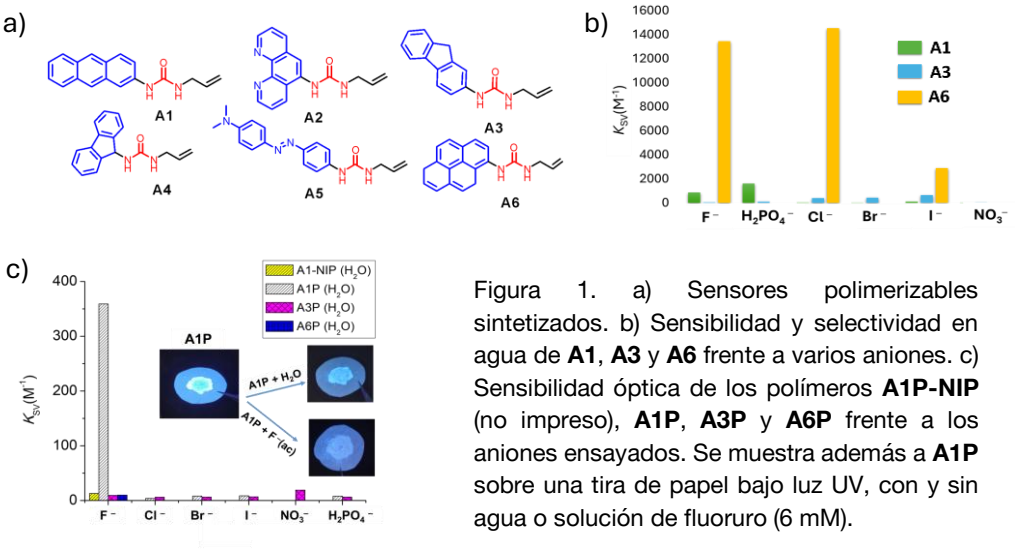


Figura 1. a) Sensores polimerizables sintetizados. b) Sensibilidad y selectividad en agua de **A1**, **A3** y **A6** frente a varios aniones. c) Sensibilidad óptica de los polímeros **A1P-NIP** (no impreso), **A1P**, **A3P** y **A6P** frente a los aniones ensayados. Se muestra además a **A1P** sobre una tira de papel bajo luz UV, con y sin agua o solución de fluoruro (6 mM).

Agradecimientos: PEDECIBA, ANII (POS_NAC_2020_1_164261) y CSIC.

[1] S. Srivastava and S. J. S. Flora, *Current Environmental Health Reports*, **2020**, 7, 140. [2] D. Quiñone, G. M. Romano, R. Faccio, M. Savastano, A. Bianchi, A. Bencini, M. Brovetto, J. Torres and N. Veiga, *Small*, **2024**, 20, 2402696.

Caracterización de antígenos O-específicos de *Escherichia coli*: Estudio estructural por RMN y análisis genético de clústeres biosintéticos en dos cepas novedosas

Sylvia Cuchman[1,2]; Edgardo Gianneechini[3]; Rodolfo Rivero[3]; María José Benítez-Galeano[4]; Nélida Rodriguez-Osorio[4]; Ileana Corvo[5]; Carolina Fontana[1]

[1]Laboratorio de Química Orgánica, Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, UdelaR, Paysandú, Uruguay.

[2]Programa de Posgrados de la Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.

[3]División Laboratorios Veterinarios "Miguel C. Rubino", MGAP, Paysandú, Uruguay.

[4]Unidad de Genómica y Bioinformática, Departamento de Ciencias Biológicas, CENUR Litoral Norte, UdelaR, Salto, Uruguay.

[5]Laboratorio de I+D Moléculas Bioactivas, Departamento de Ciencias Biológicas, CENUR Litoral Norte, UdelaR, Paysandú, Uruguay.

scuchman@gmail.com

La diversidad del antígeno O-específico (O-Ag), componente del lipopolisacárido (LPS), permite clasificar a las cepas de *Escherichia coli* en 182 serogrupos. Aunque esta clasificación se basa tradicionalmente en la reactividad serológica, su aplicación práctica está limitada a un número reducido de laboratorios especializados. En este estudio se empleó espectroscopía de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) para caracterizar estructuralmente cinco cepas aisladas de *E. coli* en Uruguay (SC-UY1 al SC-UY5), provenientes de diarrea en terneros y mastitis bovina. Dos de estos aislados (SC-UY1 y SC-UY4) fueron también analizados por secuenciación de ADN para caracterizar los aspectos biosintéticos de sus O-Ag. Los materiales polisacarídicos estudiados se obtuvieron mediante extracción del LPS por el método de fenol/agua caliente, seguido de un proceso de remoción del lípido A (O-PS) y posterior hidrólisis de los grupos ésteres (PS-OH). El análisis por RMN reveló estructuras novedosas, incluyendo la presencia de residuos de xilosa en forma furanósica, un monosacárido poco frecuente en polisacáridos bacterianos, nunca antes reportado en *E. coli*. Tres de los aislados se correspondieron con serogrupos conocidos (O1C, O88 y O146), aunque solo O88 había sido reportado previamente en Uruguay. Ninguno de estos serogrupos está incluido en vacunas en desarrollo. Los otros dos aislados presentaron estructuras antigénicas novedosas, lo que podría sugerir la posible existencia de dos nuevos serogrupos dentro de esta especie, además de otros reportados recientemente en la literatura. Para explorar sus mecanismos biosintéticos, se amplificaron y secuenciaron los clústeres de genes comprendidos entre las regiones *JUMPstart* y *gnd* en las cepas SC-UY1 y SC-UY4, mediante tecnología Nanopore (MinION). Las secuencias obtenidas (SC-UY1: 16.120 pb; SC-UY4: 20.100 pb) codifican proteínas asociadas a dos rutas biosintéticas distintas: una correspondiente a la ruta de la flipasa/polimerasa (SC-UY1, correlacionada con el serogrupo O20) y la otra a la ruta del transportador ABC (SC-UY4, correlacionada con O99). Estos hallazgos amplían el conocimiento sobre la diversidad estructural y genética de *E. coli*, con implicancias para la vigilancia epidemiológica, diagnóstico y desarrollo de vacunas.

Del diseño asistido por computadora a la mesada: Un caso de éxito en mutación racional de una imino reductasa

Gonzalo López[1,2]; Sonia Rodríguez[1]; Pablo Dans[2]; Paola Panizza[1,2]

[1]*Laboratorio de Microbiología Molecular, Área Microbiología General, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Grupo de Biofísica Computacional, Departamento de Ciencias Biológicas, CENUR Litoral Norte, Universidad de la República, Salto, Uruguay.*

gonzalomlp@fq.edu.uy

En la actualidad, hay un fuerte interés por generar compuestos bioactivos con aminas quirales, presentes en fármacos y productos naturales. Una reacción clave para obtener estas aminas es la aminación reductiva, que acopla cetonas con aminas específicas. Esta reacción puede llevarse a cabo por medios biocatalíticos, utilizando iminoreductasas o aminasas reductivas, enzimas valoradas por su amplio rango de sustratos y alta estereoselectividad.[1] Nuestro equipo ha trabajado en la síntesis de radiotrazadores usados en diagnóstico por tomografía por emisión de positrones. Una estrategia se basa en la aminación reductiva de fenilacetona para obtener L-nordeuterodeprenil. Aunque identificamos una aminasa reductiva nueva en una cepa nativa de *Streptomyces spp.* (Ss-IRED-R), esta no actúa sobre dicha cetona, por lo que buscamos inducir actividad mediante mutagénesis racional.[2] Presentamos aquí los resultados de la evaluación de mutantes de Ss-IRED-R, diseñados a partir del análisis estructural de su sitio activo comparado con el de AspRedAm, una aminasa de *Aspergillus oryzae* con estructura conocida y alta similitud en secuencia. Se usaron herramientas de bioinformática estructural, con el fin de evaluar una amplia gama de descriptores fisicoquímicos que permitieran entender a nivel molecular el funcionamiento de Ss-IRED-R. A partir de dicho conocimiento, se generaron mutantes simples, dobles y triples mediante QuikChange o síntesis de ADN, evaluando su actividad frente a varias cetonas y aminas. Se identificaron mutaciones clave que alteran la actividad. Dos variantes ganaron funciones nuevas; una de ellas, A221Y/T249V, catalizó la aminación reductiva de fenilacetona. Estos resultados experimentales dieron lugar a una nueva ronda de análisis racional asistido por computadora, donde se propuso una nueva mutante triple que está siendo evaluada en el laboratorio.

[1]Aleku GA *et al*. (2017) A reductive aminas from *Aspergillus oryzae*. ***Nat. Chem.*** 9, 961-969.

[2]Iglesias C *et al*. (2021) Identification, characterization and in silico analysis of new imine reductases from native *Streptomyces* genomes. ***Front. Catal.*** 1, 1-10.

Presentaciones Orales

Sesión 2 (Miércoles 22/10 – 14:30-15:30)

Auditorio Mario Benedetti

PO.05A-IA Mariano Soba - E*valuación de la bioaccesibilidad in vitro de elementos esenciales y potencialmente tóxicos en insectos comestibles de la región rioplatense*

PO.06A-IA Fiamma Pequeño - *Comparación del decaimiento de fungicidas en dos variedades de frutilla desarrolladas en Uruguay*

PO.07A-FQ Fabiana Salazar - *¿Qué sabemos de la activación de los profármacos antitumorales de Pt(IV) mediada por Tioles y Asc?: Un enfoque teórico-computacional*

PO.08A-FQ Patrice Portugau - *Catalizadores basados en MnOx/carbón activado aplicados a la reducción electroquímica de* O_2

Sala Idea Vilariño

PO.05B-BQ Cecilia Ghiazza - *Resistoma, mobiloma y estructura de comunidades microbianas de lodos de Plantas de Tratamiento de Aguas Residuales de Uruguay*

PO.06B-BQ Pablo Galeano - *Uso de nanopartículas basadas en quitosano para el control del tizón de la hoja en cebolla*

PO.07B-QO Juan Mesa - *Desarrollo de un sistema* Cu^{I}*-*MBH_4 *para la reducción exhaustiva de cinamatos en un único paso de reacción*

PO.08B-QO Maximiliano Colobbio - *Helmintiasis: 30 años de investigación interdisciplinaria, adaptaciones de fragmentos basado en 2-amino-valerolactamas y reutilización de benzimidazoles hacia novedosos mecanismos de acción*

Evaluación de la bioaccesibilidad *in vitro* de elementos esenciales y potencialmente tóxicos en insectos comestibles de la región rioplatense

Mariano Soba; Ignacio Machado

[1]*Grupo de Bioanalítica y Especiación, Química Analítica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

mariano@fq.edu.uy

En los últimos años, los insectos han despertado un gran interés como fuente de proteínas más sostenible, ofreciendo ventajas frente a las proteínas tradicionales de origen animal. Además de su elevado contenido proteico, presentan un alto valor nutricional, incluyendo compuestos bioactivos como vitaminas, minerales y ácidos grasos poliinsaturados. Sin embargo, tienen también la capacidad de bioacumular elementos tóxicos del ambiente. Por lo tanto, es fundamental evaluar no solo su contenido elemental total, sino también la fracción bioaccesible, es decir, la porción liberada desde la matriz alimentaria al tracto gastrointestinal con potencial de absorción y actividad biológica.

En este estudio se evaluó la bioaccesibilidad *in vitro* de aluminio (Al), cobre (Cu), hierro (Fe), plomo (Pb), manganeso (Mn) y zinc (Zn) en insectos silvestres de la región rioplatense. Las muestras fueron recolectadas en enero de 2024 y caracterizadas por un entomólogo como *Chromacris speciosa*, *Diloboderus abderus* y *Gryllus assimilis*. Posteriormente, fueron liofilizadas, trituradas y homogeneizadas con molino de bolas.

La digestión *in vitro* se realizó en dos etapas. La solución gástrica contenía pepsina (3 g L^{-1} en HCl 12 mol L^{-1}, pH 1,3), mientras que la intestinal incluía sales biliares (2 g L^{-1}) y pancreatina (5 g L^{-1}) en NaOH 0,2 mol L^{-1} (pH 6,8). Se emplearon 0,5 g de muestra seca, primero incubada con solución gástrica a 37 °C durante 2 h, y luego, tras ajuste de pH a 6,8, con solución intestinal durante otras 2 h. Tras centrifugación a 28.000 *g* durante 30 min, el sobrenadante se separó y se utilizó para determinar la fracción bioaccesible (FB), calculada como FB (%) = (FL/CT) × 100, donde FL es la fracción liberada y CT la concentración total (mg kg^{-1}). Para las determinaciones analíticas se utilizó espectrometría de emisión óptica con plasma inducido por microondas (MP AES), una técnica muy eficiente y amigable con el ambiente, empleada por primera vez en estudios de este tipo en insectos. Las muestras y residuos obtenidos luego de los ensayos de bioaccesibilidad fueron sometidos a digestión ácida asistida por microondas con HNO_3 4,2 mol L^{-1}. Se optimizaron cuidadosamente las condiciones instrumentales para cada elemento, y se emplearon longitudes de onda específicas con corrección automática de fondo. Para evaluar la veracidad de ensayo *in vitro* se calculó el balance de masa como MB (%) = [(FL + FR)/CT] × 100, donde FR es la fracción residual. Asimismo, se utilizó un material de referencia certificado de mejillones.

Los resultados obtenidos coinciden parcialmente con valores previamente reportados en especies europeas, mostrando valores de BF superiores al 40% para Cu, Fe y Zn, aportando nuevos datos sobre la fracción bioaccesible de elementos esenciales y tóxicos en insectos nativos de Sudamérica. Este trabajo demuestra la utilidad del enfoque *in vitro* combinado con MP AES para el estudio de la calidad nutricional y la seguridad alimentaria de insectos, contribuyendo al conocimiento de su potencial como alimentos sostenibles en el futuro.

Comparación del decaimiento de fungicidas en dos variedades de frutilla desarrolladas en Uruguay

Fiamma Pequeno[1,2]; Natalia Besil[2]; Sofía Barrios[3]; Horacio Heinzen[4]; María Verónica Cesio[4]

[1]Programa de Posgrados de la Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay. [2]Grupo de Análisis de Compuestos Trazas (GACT), Departamento de Química del Litoral, Cenur Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay. [3]Instituto de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay. [4]GACT, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

fpequeno@fq.edu.uy

La producción de frutilla en Uruguay destinada al consumo interno, se ha visto favorecida por el programa de mejoramiento genético de INIA, que ha desarrollado variedades precoces adaptadas a sistemas de producción protegidos (macro y micro túneles). Entre ellas, Ágata™ (SGN48.3 cv.) e Yrupé™ (SGS73.1 cv.) se destacan por su rendimiento, sabor y resistencia a enfermedades de raíz y corona. Sin embargo, infecciones por *Botrytis cinérea* siguen siendo una amenaza significativa para el cultivo. El control químico mediante fungicidas es una práctica habitual, por lo que resulta relevante evaluar el comportamiento de los residuos de estos compuestos en las nuevas variedades.

El objetivo de este trabajo fue comparar la degradación de mezclas de fungicidas en las variedades Ágata e Yrupé, cultivadas en condiciones reales de producción. Se evaluaron tres formulaciones comerciales: Shaolin® 62.5 WG (ciprodinil y fludioxonil), Botrix® (boscalid y piraclostrobina) y Amistar® Top (azoxistrobina y difenoconazol), aplicadas según dosis de etiqueta y bajo buenas prácticas agrícolas (BPA). Se realizaron seis muestreos a lo largo de 14 días post aplicación, tomando 1 kg de fruta por triplicado en cada día. Los residuos de pesticidas fueron analizados mediante HPLC-MS/MS, previa extracción por QuEChERS (CEN 15662). Todos los compuestos mostraron una cinética de degradación de tipo exponencial, con diferencias entre variedades y mezclas. En general, se observaron vidas medias más cortas en Ágata para la mayoría de los compuestos respecto a Yrupé. Al día 14, boscalid y piraclostrobina reflejaron una degradación de más del 80%. Azoxistrobina, difenoconazol, ciprodinil y fludioxonil se aplicaron a mitad del experimento, por lo que solo se analizaron 3 muestras. Aun así, todos demostraron una disipación por encima del 25%. En el caso de Shaolin®, los tiempos de vida media obtenidos fueron significativamente menores a los reportados por el fabricante, lo que evidencia una disipación más rápida bajo las condiciones reales de cultivo. Además, se aporta información inédita sobre los tiempos de vida media de Botrix® y Amistar® Top en frutilla, ya que estos productos no especifican esta información para este cultivo. También se destaca que las concentraciones obtenidas para todos los compuestos no superan los LMR establecidos en Uruguay para la combinación frutilla/fungicida, lo que evidencia el cumplimiento de las BPA (azoxistrobina 10 mg kg^{-1}; boscalid y fludioxonil 3 mg kg^{-1}; ciprodinil 0,7 mg kg^{-1}; difenoconazol 2 mg kg^{-1} y piraclostrobina 1,5 mg kg^{-1}). Estos resultados representan un aporte valioso para los productores, ya que permiten una gestión más precisa de los períodos de carencia, mejorando así tanto la seguridad alimentaria como la sustentabilidad del manejo fitosanitario.

¿Qué sabemos de la activación de los profármacos antitumorales de Pt(IV) mediada por Tioles y Asc?: Un enfoque teórico-computacional

Fabiana Salazar; Laura Coitiño

Laboratorio de Química Teórica y Computacional (LQTC), Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias y Centro de Investigaciones Biomédicas (CeInBio), Universidad de la República, Iguá 4225, Montevideo 11400, Uruguay

fsalazar@fcien.edu.uy

La activación de los profármacos de Pt(IV) implica un proceso reducción disociativa de dos electrones ($2e^-$), cuyo mecanismo de reacción y cinética están modulados por la naturaleza de los ligandos coordinados al centro de Pt (principalmente los ligandos axiales L/L'), el agente reductor y el entorno del organismo[1]. Una activación prematura ejercida por agentes reductores del plasma sanguíneo es un escenario no deseado que debe evitarse para no comprometer la eficacia del profármaco. Por otro lado, debe asegurarse que la reducción, y por ende la activación y obtención del metabolito activo de Pt(II), sí tome lugar dentro de la célula, siendo mediada principalmente por glutatión (GSH) y (Asc). Este ligero y sensible equilibrio es lo que ha comprometido varias de las propuestas de compuestos de Pt(IV) que han surgido desde la década de los 80, y hasta ahora, aunque se cuenta con datos de cinética experimental y propuestas de las posibles vías de mecanismo que pueden tomar lugar en presencia de estos agentes[2, 3], no se han racionalizado los aspectos que deben tenerse en cuenta en su diseño. Desde un enfoque teórico-computacional, a nivel de DFT/PCM-IEF en solución acuosa, se estudiaron diferentes propuestas de mecanismos (todos de esfera interna) para la reducción de varios compuestos de Pt(IV) derivados de cisplatino por tioles de bajo peso molecular (Cys, Hcy y GSH) y Asc. Para las reacciones con Cys/Hcy/GSH se consideraron sus formas tiol/tiolato presentes en el organismo, así como la eventual asistencia de una molécula de agua explícita en los modelos materiales, donde la reducción por la especie tiolato en presencia de H_2O resultó ser el mecanismo más favorable en cada caso. En presencia de Asc, se estudió el mecanismo de ataque por el C_β del enolato para 6 compuestos de Pt(IV) considerando como ligandos axiales Cl, Br, DCA en combinaciones simétricas y asimétricas. Los resultados obtenidos muestran que las barreras de activación más bajas (obtenidas con Br como ligando axial) se correlacionaron con una menor transferencia de carga y con grados de avance reducidos en los enlaces clave, lo que sugiere una activación temprana del complejo. La inclusión del DCA permitió moderar estos efectos y abre paso a explorar estas reacciones incorporando L/L' derivados de ácidos carboxílicos.

Referencias

[1] Wexselblatt, E.; Gibson, D., *Journal of Inorganic Biochemistry*, (2012) 117, 220.
[2] Xia, Y.; Tian, H.; Yin, Z.; Jiang, C.; Liu, Z.; Zhang, H.; Zhang, W.; Zhang, G.; Liu, C.; Shi, T., *Journal of Molecular Structure*, (2025) 1329, 141394.
[3] Ponte, F.; Scoditti, S.; Mazzone, G.; Sicilia, E., *Physical Chemistry Chemical Physics*, (2023) 25, 15586.

Catalizadores basados en MnOx/carbón activado aplicados a la reducción electroquímica de O_2

Patrice Portugau[1,3]; Jorge Castilgioni[1]; Eduardo Méndez[2]; Conchi O. Ania[3]

[1]*Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Biomateriales, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[3]*CEMHTI, CNRS (UPR 3079), Université d'Orléans, 45071 Orléans, France*

portugau@fq.edu.uy

El manganeso y sus óxidos (MnOx) debido a su abundancia en la corteza terrestre, a su variedad de estados de oxidación, ha resultado de gran interés en diversas aplicaciones electroquímicas. Se han reportado aplicaciones tanto para procesos anódicos, como catódicos. En su rol como cátodo, se ha reportado que una misma fase cristalina presenta actividad para la reacción de reducción de O_2 (RRO), ya sea promoviendo el mecanismo de 2e-, como el de 4e-. Esta discrepancia es atribuida a la morfología que presente el óxido y a la cantidad relativa en el electrocatalizador, aspectos a tener en cuenta, ya que en diferentes condiciones experimentales conduce a la obtención de diferentes fases cristalinas y morfologías para los MnOx [1]. Por otra parte, los MnOx no son buenos conductores eléctricos por lo que es necesario mejorar esta característica soportándolos sobre materiales como el carbón activado.

En este trabajo se prepararon mediante un proceso solvotermal electrocatalizadores basados en MnOx soportados en distintos carbones activados. Las cargas de MnOx sobre los electrocatalizadores se encontraron entre 10 y 20 % en peso aproximadamente. Asimismo, los materiales fueron caracterizados mediante, microscopía Raman, Isotermas de fisisorción de N_2, Espectroscopia Infrarroja por Transformada de Fourier (FTIR), Difracción de Rayos X (DRX), Fluorescencia de Rayos X (FRX), Microscopía Electrónica de Barrido y ensayos electroquímicos en celda de 3 electrodos. Los ensayos electroquímicos se realizaron en solución 1 mol/L de NaOH en un Electrodo de Disco Rotatorio variando la velocidad de rotación entre 0 y 3500 rpm y empleando voltamperometrías lineales a una velocidad de barrido de 20 mV/s.

Los resultados muestran que los catalizadores presentan dos fases cristalinas, Mn_3O_4 y Mn_2O_3. Asimismo, la relación entre estas fases es dependiente de la naturaleza del carbón activado empleado. Desde el punto de vista electroquímico los catalizadores mostraron actividad para la reducción del O_2 disminuyendo el potencial de inicio de la reacción respecto al MnOx y a la vez incrementando la densidad de corriente obtenida.

[1] Moura, J. P. C., Antonin, V. S., Trench, A. B., & Santos, M. C. (2023). Hydrogen peroxide electrosynthesis: a comparative study employing Vulcan carbon modification by different MnO2 nanostructures. Electrochimica Acta, 463, 142852. https://doi.org/10.1016/j.electacta.2023.142852

Resistoma, mobiloma y estructura de comunidades microbianas de lodos de Plantas de Tratamiento de Aguas Residuales de Uruguay

Cecilia Ghiazza[1]; Valentín Berríos-Farías[2]; Eduardo Castro-Nallar[2]; Lucia Ferrando[1]

[1]*Laboratorio de Ecología Microbiana y Microbiología Ambiental, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Centro de Ecología Integrativa, Universidad de Talca, Talca, Chile.*

cghiazza@fq.edu.uy

Las plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR) desempeñan un papel clave en la diseminación de genes de resistencia a antibióticos (ARG), ya que en ellas confluyen microorganismos de diversos orígenes en condiciones que favorecen el intercambio genético. Una de las principales estrategias para la gestión de los lodos generados en las PTAR es su aplicación como mejoradores de suelo, siempre que se cumplan criterios microbiológicos y fisicoquímicos específicos. Sin embargo, esta práctica continúa siendo objeto de debate debido al potencial riesgo de introducir contaminantes emergentes de origen antropogénico al ambiente, entre los que se encuentran bacterias resistentes a antibióticos y ARG. En este trabajo se analizó la composición del resistoma y el mobiloma en lodos de ocho PTAR de Uruguay mediante secuenciación metagenómica shotgun (Illumina NovaSeq, paired-end 150 pb). Las plantas seleccionadas difieren en ubicación geográfica, sistema de tratamiento y manejo de lodos generados. Los resultados revelaron diferencias significativas en la composición de ARG, en la distribución de elementos genéticos móviles y en las comunidades bacterianas entre PTAR, con un patrón de agrupamiento principalmente determinado por la localidad. Del total de ARGs detectados, solo 64 genes conformaron un núcleo común entre las PTAR, representando entre el 16% y el 50% del resistoma de cada PTAR, lo que evidencia una alta variabilidad en la composición de ARGs entre localidades. En todas las PTAR predominaron genes que confieren resistencia a múltiples antibióticos, así como resistencia a macrólidos-lincosamidas-estreptograminas (MLS), aminoglucósidos y betalactámicos. Además, se identificaron plásmidos e integrones portadores de ARGs, lo que resalta el potencial de transferencia genética horizontal y el riesgo de diseminación de resistencia en estos entornos.

Uso de nanopartículas basadas en quitosano para el control del tizón de la hoja en cebolla

Pablo Galeano[1]; Noheilly Vásquez[2]; Helena Pardo[3]; Laura Franco Fraguas[1]; Guillermo Galván[4]; Silvana Alborés[2]

[1]*Área de Bioquímica, DEPBIO, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Área de Microbiología, DEPBIO, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[3]*Área Física & Centro NanoMat, DETEMA, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[4]*Departamento de Producción Vegetal, Facultad de Agronomía, Udelar. Centro Regional Sur (CRS), Progreso, Canelones, Uruguay.*

pgaleano@fq.edu.uy

La cebolla (*Allium cepa*) es uno de los principales cultivos hortícolas a nivel mundial y nacional. El tizón de la hoja causado por *Botrytis squamosa* causa pérdidas tanto en almácigos cómo durante el desarrollo del cultivo. El control químico de la enfermedad basado en fungicidas conlleva preocupaciones ambientales y sanitarias. El uso de nanomateriales biogénicos aporta al desarrollo de estrategias más sostenibles en el control de enfermedades por su acción antifúngica y como inductores de resistencia en plantas. En particular, los basados en quitosano han mostrado eficacia en varios patosistemas[1]. Este trabajo estudia efectos de nanopartículas de quitosano (CSNPs) y nanohíbridos de quitosano-plata biogénicas (CS-PchNHs), obtenidas por nuestro grupo, en la interacción *A. cepa-B. squamosa*. Se realizaron ensayos *in vitro* para determinar si los nanomateriales inhiben el crecimiento de *B. squamosa* (CE_{50}). Se encontró inhibición significativa por los CS-PchNHs, mayor que la causada por el quitosano comercial, no mostrando actividad las CSNPs. Se realizaron ensayos de desafío utilizando una variedad de cebolla susceptible (Regia) frente a una cepa de *B. squamosa*. Antes de la inoculación, grupos de plantas fueron tratados con los nanomateriales o quitosano. Además de síntomas, se evaluó en hojas la actividad de enzimas relacionadas con las patogénesis. El tratamiento con estos compuestos aumentó la actividad quitinasa en plantas previo a ser inoculadas. Este efecto fue más notorio para CS-PchNHs. Frente al patógeno, el tratamiento con estos compuestos redujo por igual los síntomas de la enfermedad. Las actividades peroxidasa, quitinasa y glucanasa aumentaron en respuesta al daño causado por el patógeno, pero también aumentaron en plantas pretratadas que tuvieron menor desarrollo de síntomas con efectos más claros para los nanocompuestos que para el quitosano. Estas respuestas variaron según el estado fenológico de la planta. Estos resultados sugieren para los CS-PchNHs un doble mecanismo de acción: efectos antifúngicos directos y activación de las respuestas de defensa de las plantas, mientras que las CSNPs actuarían a través de este último.

[1]Wang X. et al (2024) Emerging Nanochitosan for Sustainable Agriculture. *International Journal of Molecular Sciences*, 25(22), 12261.

Agradecimientos: ANII; PEDECIBA; Universidad de la República.

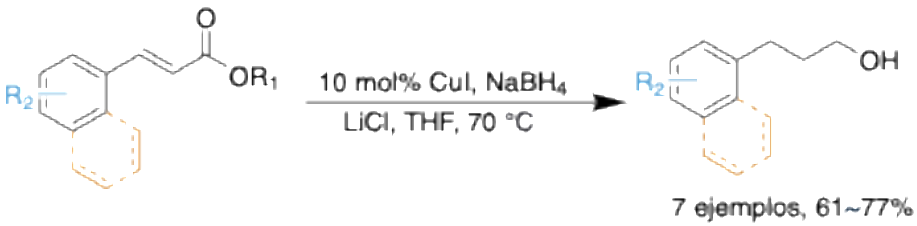
Desarrollo de un sistema Cu^{I}-MBH_4 para la reducción exhaustiva de cinamatos en un único paso de reacción

Juan Manuel Mesa; Margarita Brovetto; Gonzalo Carrau; Ignacio Carrera; Estefanía Dibello

[1]Laboratorio de Síntesis Orgánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

jmmesa@fq.edu.uy

Los cinamatos son bloques de construcción ampliamente utilizados en síntesis orgánica, con importantes aplicaciones en la obtención de productos naturales y farmacéuticos. Esta versatilidad está dada por poseer 3 grupos funcionales reactivos (éster, doble enlace conjugado y fenilo) donde es posible realizar transformaciones químicas.[1] En particular, la reducción exhaustiva de cinamatos es uno de los métodos de elección para la obtención de fenilpropanoles. Esta transformación es habitualmente llevada a cabo en dos pasos de reacción: reducción de la función éster mediante un reductor fuerte como DIBAL-H, obteniendose el alcohol alílico, y posteriormente una etapa la hidrogenación catalítica del alqueno. Debido a que, en la literatura, existen escasos reportes acerca de metodologías que permitan la reducción exhaustiva de cinamatos en un único paso (con aplicabilidad a escala de laboratorio),[2,3] nos propusimos desarrollar una nueva metodología valiosa para el campo. En este trabajo se presenta el desarrollo de un sistema Cu^{I}-MBH_4 (M= Li, Na) para la reducción exhaustiva de cinamatos en un solo paso de reacción. Se estudió el uso de diversos agentes reductores, sistema de disolventes y aditivos sobre un sistema modelo. Las condiciones optimizadas fueron ensayadas sobre una serie de sustratos diferentes validando el alcance de la metodología. Finalmente, se logró desarrollar un método para la reducción exhaustiva de cinamatos utilizando CuI en cantidades catalíticas y una combinación de $NaBH_4$ y LiCl como reductor en THF.



(1) Kustiana, B. A.; Widiyarti, G.; Ernawati, T. *Beilstein Journal of Organic Chemistry 21:85* **2025**, *21* (1), 1031–1086.
(2) Jagdale, A. R.; Paraskar, A. S.; Sudalai, A. *Synthesis* **2009**, *2009* (04), 660–664.
(3) Bodnar, B. S.; Vogt, P. F. *Journal of Organic Chemistry* **2009**, *74* (6), 2598–2600.

Helmintiasis: 30 años de investigación interdisciplinaria, adaptaciones de fragmentos basado en 2-amino-valerolactamas y reutilización de benzimidazoles hacia novedosos mecanismos de acción

Maximiliano Colobbio[1,4]; Ramiro Texeira[3]; Gerardo Duarte[3]; Magdalena Nieves[3]; Mauricio Silvera[1]; María Elisa Melian[3]; Beatriz Munguía[3]; Juan Carlos Ramos[1]; Eduardo Manta[1,2]

[1]*Laboratorio de Química Fina, Instituto Polo Tecnológico de Pando/Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Química Farmacéutica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[3]*Área Farmacología, Departamento de Ciencias Farmacéuticas (CIENFAR), Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*

[4]*Programa de Posgrados de la Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

mcolobbio@gmail.com

Las infecciones por helmintos afectan tanto a humanos como a animales, generando importantes pérdidas económicas y sanitarias, especialmente en países en desarrollo. Este problema se agrava por la rápida aparición de resistencia a los fármacos comerciales. En este contexto, y con el objetivo de aportar soluciones al sector productivo nacional, nuestro grupo viene trabajando desde hace tres décadas en el estudio del núcleo valerolactámico como bloque estructural para el desarrollo de nuevos agentes antihelmínticos. La valerolactama es un análogo simplificado de las bengamidas, metabolitos marinos con reconocida actividad biológica, incluida la antihelmíntica, aunque limitadas por su alta toxicidad. Su simplificación estructural ha demostrado mejorar el perfil toxicológico, aunque con deficiencias en la permeabilidad *in vivo*. Para superar esta limitación, se diseñaron distintas estrategias de farmacomodulación que permitieron mejorar la potencia y eficacia del compuesto. Como resultado, se obtuvo y patentó una serie de híbridos benzimidazólicos con actividad nanomolar sobre *Nippostrongylus brasiliensis*, destacándose el derivado valerolactama-fenbendazol (**VAL-FBZ**). Este compuesto mostró alta permeabilidad, baja citotoxicidad inespecífica y eficacia contra *Haemonchus contortus* (parásito de importancia ganadera), además de ser resistente a mecanismos enzimáticos de desintoxicación del parásito, posicionándolo como compuesto líder. Se realizó el escalado sintético y desarrollo de formulaciones innovadoras para ensayos *in vivo*. La evidencia sugiere que **VAL-FBZ** presenta un mecanismo de acción distinto al de los benzimidazoles clásicos, lo que motivó a la expansión estructural de esta familia de compuestos para establecer relaciones estructura-actividad. Este trabajo presenta una revisión de los principales avances alcanzados en veinte años de investigación interdisciplinaria, así como las proyecciones para el desarrollo de nuevos agentes antihelmínticos.

Presentaciones Orales

Sesión 3 (Jueves 23/10 – 11:30-12:30)

Auditorio Mario Benedetti

PO.09A-BQ Noheilly Vásquez - *Evaluación de la actividad antifúngica y biocompatibilidad de péptidos sintéticos derivados de receptores scavenger*

PO.10A-BQ María Fernanda Ramos - *Defensina atípica de Ibirapitá como herramienta emergente para control de infecciones fúngicas invasivas*

PO.11A-QO Martín Luzardo - *Síntesis de híbridos lactama-bencimidazol con potencial antihelmíntico mediante fotocatálisis radicalaria*

PO.12A-QO Camila Irabuena - *Ciclopéptidos herbicidas y su toxicidad aguda en organismos acuáticos*

Sala Idea Vilariño

PO.09B-IA Rossannie Guasamucare - *Nanopartículas de plata funcionalizadas: evaluación in vitro de su citotoxicidad y eficacia para uso cosmético*

PO.10B-IA Carolina Del Mármol - *Diseño de compuestos tricarbonílicos de Mn(I) y Re(I) con ligandos azólicos bioactivos para tratamiento de enfermedades desatendidas*

PO.11B-IA Maia Zeni - *Evaluación fisicoquímica, in vitro, e in vivo de potencial radiotrazador PET, derivado de kenpaullona, para imagenología molecular de GSK-3β en enfermedad de Alzheimer*

PO.12B-FQ Tatiana Gregorio - *Detección indirecta de contraiones de metales alcalinos utilizando transistores electroquímicos orgánicos basados en P3HT*

Evaluación de la actividad antifúngica y biocompatibilidad de péptidos sintéticos derivados de receptores *scavenger*

Noheilly Vásquez[1,2]; María Clara González-Porcile[1]; Elisa Cabeza[3]; Silvana Alborés[2]; Gustavo Mourglia-Ettlin[1]

[1]*Área Inmunología, DEPBIO, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Área Microbiología, DEPBIO, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[3]*Unidad Académica de Parasitología y Micología, Instituto de Higiene, Facultad de Medicina, Universidad de la República, Montevideo Uruguay.*

noheilly@gmail.com

La criptococosis es la infección causada por *Cryptococcus neoformans*, un hongo oportunista capaz de provocar meningoencefalitis particularmente en pacientes inmunocomprometidos. El aumento creciente de aislamientos clínicos con resistencia a los tratamientos convencionales ha impulsado la búsqueda de nuevos agentes terapéuticos. Los péptidos sintéticos son una alternativa prometedora dada su alta versatilidad estructural, especificidad y biocompatibilidad, además de sus ventajas en términos de producción. Por ello, en el presente trabajo se evaluó el perfil de biocompatibilidad y se determinó el valor como agentes antifúngicos, por parte de 12 péptidos sintéticos (T1-T12) previamente desarrollados por el grupo de trabajo en base a la secuencia de receptores *scavenger* capaces de reconocer diversos patógenos microbianos. Los péptidos se adquirieron a nivel comercial en alta pureza. Para explorar su potencial como agentes antifúngicos frente a *C. neoformans*, se trabajó con la cepa de referencia H99 y se determinó tanto la Concentración Inhibitoria Mínima (CIM) como la Concentración Fungicida Mínima (CFM) de los péptidos, así como su actividad aglutinante. Por un lado, 3 de los 12 péptidos mostraron valores de CIM en el rango ⌈M, destacándose T10 y T11 por su mayor eficacia inhibitoria (ambos con CIM = 6,25 µM). A su vez, solo T2, T10 y T11 mostraron actividad fungicida en el rango ⌈M; en todos los casos con CFM = CIM. Por otro lado, 7 de los 12 péptidos exhibieron actividad aglutinante frente a *C. neoformans*, destacándose T11 y T12 por hacerlo desde concentraciones muy bajas (6,25 y 3,13 ⌈M, respectivamente). Cabe destacar que no se encontró una correlación directa entre actividad antifúngica y capacidad aglutinante, sugiriendo por lo tanto que ambos fenómenos estarían mediados por mecanismos diferentes. Esta independencia entre actividades podría aprovecharse de manera combinada para el desarrollo de estrategias terapéuticas más efectivas. Asimismo, los péptidos se evaluaron en términos de biocompatibilidad *in vitro* mediante ensayos de actividad hemolítica (AH_{50}) y actividad citotóxica (AC_{50}). Para todos los péptidos se observó ausencia de efectos tóxicos significativos (AH_{50} y AC_{50} > 21,9 µM), respaldando su seguridad de uso. En suma, de los resultados obtenidos, los péptidos T10 y T11 se destacaron como los más promisorios debido a su eficacia inhibitoria sumada a su actividad fungicida; y en el caso de T11, a una notable capacidad aglutinante adicional. Además, dado su diseño basado en secuencias con relevancia inmunológica, dichos péptidos se evaluarán próximamente en términos de acciones inmunomoduladoras en el hospedero infectado, ya que esto podría aportarles ventajas adicionales respecto de los antimicóticos tradicionales.

Defensina atípica de Ibirapitá como herramienta emergente para control de infecciones fúngicas invasivas

Mª Fernanda Ramos[1]; Roberto Castro Rosas[2]; Gianna Cecchetto[2]; Mariella Terán[3]; Mariana Barraco Vega[1]

[1]*Laboratorio de Microbiología Molecular, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Laboratorio de Microbiología, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Uruguay.*

[3]*Área Radioquímica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

ramos.fr.11@gmail.com

Las enfermedades infecciosas siguen siendo una de las principales amenazas para la salud pública a nivel global. Si bien las infecciones causadas por bacterias multirresistentes figuran entre las más preocupantes, el aumento de las enfermedades fúngicas invasivas (EFI) representa un problema creciente según la OMS. En Uruguay, la mortalidad en unidades de cuidados intensivos alcanza el 22%, y aproximadamente la mitad de los casos se asocia a infecciones intrahospitalarias (MSP). Se estima que unas 128.000 personas padecen anualmente infecciones fúngicas graves en el país, siendo *Candida spp.* una de las principales causas. Ante este escenario, se vuelve urgente el desarrollo de nuevos agentes antimicrobianos con modos de acción alternativos. Las defensinas de plantas son péptidos antimicrobianos ricos en cisteína con un amplio rango de actividades biológicas. Recientes estudios señalan además su potencial como agentes antibiofilms. Sin embargo, la mayoría de las investigaciones se han centrado en las "defensinas verdaderas", quedando poco exploradas las defensinas largas, una subfamilia estructuralmente atípica. En este trabajo nos centramos en la caracterización de PdDf13, una defensina atípica identificada en *Peltophorum dubium* (análisis transcriptómico). PdDf13 es un péptido de 104 residuos, con regiones terminales extendidas y un dominio central conservado, aunque con motivos no canónicos. El péptido fue expresado recombinante en *Escherichia coli* y purificado para su estudio. Demostramos que tiene actividad antimicrobiana frente a *C. albicans (*IC_{50} 4,14 µM*)*, y que permea la membrana fúngica 42% (ensayos SYTOX Green). Por dicroísmo circular comprobamos su capacidad de interacción y modificación estructural del ADN. Como perspectivas, se plantea evaluar su actividad frente a *C. tropicalis* y su potencial antibiofilm frente a cepas de *C. albicans* y *C. tropicalis*. Estos resultados preliminares posicionarían a PdDf13 como un candidato prometedor para el desarrollo de herramientas de control o diagnóstico de EFIs causadas por *Candida spp.*

Agradecimientos: PEDECIBA, Centro interdisciplinario CEIBOS, ANII y Proyectos CSIC 2507 y 2511.

Síntesis de híbridos lactama-bencimidazol con potencial antihelmíntico mediante fotocatálisis radicalaria

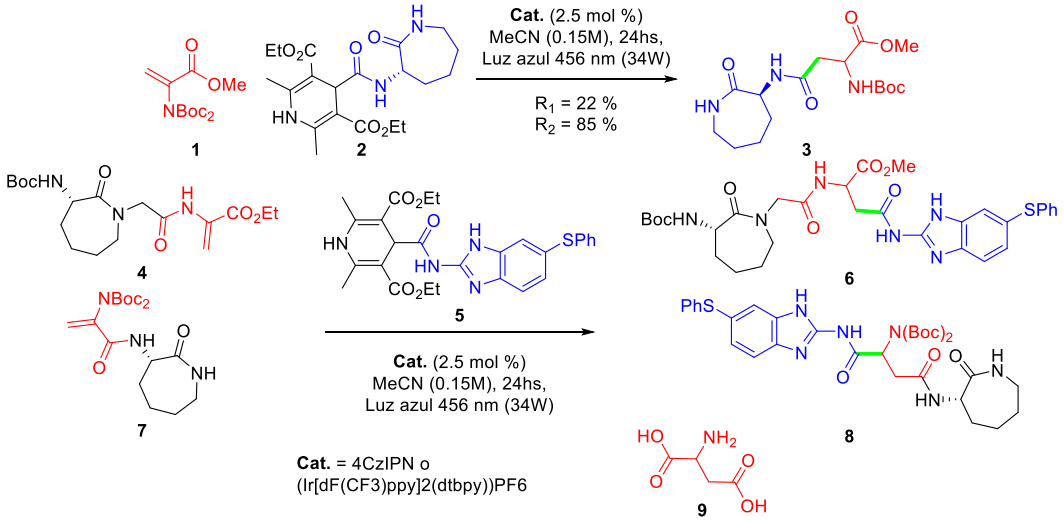
Martín Luzardo[1]; Marcelo Incerti[1]; Márcio Weber Paixão[2]; Eduardo Manta[1]

[1]*Laboratorio Química Farmacéutica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratory of Sustainable Organic Synthesis and Catalysis, Department of Chemistry, Federal University of São Carlos- UFSCar, São Carlos, Brazil.*

mluzardo@fq.edu.uy

Las helmintiasis causadas por nematodos gastrointestinales presentan un problema significativo para la salud humana y animal. *Haemonchus contortus* es uno de los más prevalentes y patógenos en ovinos. La resistencia creciente a los fármacos comercializados constituye una preocupación global, Uruguay no es ajeno a esta problemática, reportándose niveles alarmantes de resistencia frente a *H. contortus.*[1] En el marco de la búsqueda de nuevos agentes antihelmínticos, hemos desarrollado compuestos híbridos estructuralmente inspirados en lactamas, oxazoles y bencimidazoles. Con el objetivo de aumentar la diversidad estructural, controlar la orientación espacial y la distribución electrónica de los grupos farmacofóricos, así como mejorar las interacciones con posibles dianas farmacológicas, se exploraron nuevos linkers entre los fragmentos activos. La estrategia seleccionada se basa en la adición fotocatalítica de radicales carbamoílo, procedentes del compuesto **2**, a la deshidroalanina **1**, permitiendo el acceso a derivados de asparagina N^4-modificados no proteinogénicos **3**. Esta metodología, desarrollada por el profesor W. Paixão y colaboradores[2] ofrece una alta compatibilidad funcional y evita problemas de ortogonalidad que podrían surgir al emplear derivados del ácido aspártico **9** como linkers. En este contexto, se logró obtener el compuesto **3** con los rendimientos mostrados en la Figura. Además, se llevaron a cabo las reacciones orientadas a la síntesis de los compuestos **6** y **8**, actualmente en etapas de purificación.



[1]Bonino Morlan, J. & Casaretto, A. *XL Jornadas Uruguayas Buiatría* 19-29 (2012). [2]Pissinati, E. F. *et al*. *European J. Org. Chem.* **26**, 1-7 (2023).

Ciclopéptidos herbicidas y su toxicidad aguda en organismos acuáticos

Camila Irabuena[1]; Luciana Rey[2]; Melanie Silva[2]; Lucila Gonzalez[1]; Lucia Boccardi[4]; Laura Scarone[1]; Juana Villalba[2]; Luis Aubriot[3]; Andrés Kamaid[5]; Diana Miguez[4]; Gloria Serra[1]

[1]*Laboratorio de Química Farmacéutica, DQO, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Malherbología, DPV, Facultad de Agronomía- EEMAC, UdelaR, Paysandú, Uruguay*

[3]*Laboratorio de Limnología, Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[4]*Fundación Latitud, Laboratorio Tecnológico del Uruguay, Montevideo, Uruguay*

[4]*Bioimagenología Avanzada, Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay*

camirabuena@fq.edu.uy

Actualmente, el sector agrícola de Uruguay se enfrenta al desafío de controlar malezas de manera eficiente en un contexto donde la expansión de cultivos y el uso de prácticas agrícolas convencionales han incrementado la escorrentía de nutrientes. Esto favorece la eutrofización y la proliferación de cianobacterias productoras de toxinas en cuerpos de agua claves del país, afectando la calidad del agua y la salud pública. A su vez, el control de malezas sigue dependiendo de herbicidas sintéticos que presentan altos niveles de ecotoxicidad.[1]

Algunos productos naturales derivados de aminoácidos, tales como los ciclopéptidos Tentoxina, aislados del hongo *Alternaria alternata*, y Versicotide D, producido por el hongo *Aspergillus versicolor,* han demostrado actividad herbicida*, Figura 1 a).* Desde 2020 el grupo se encuentra trabajando en la síntesis de péptidos y ciclopéptidos análogos a estos productos naturales con el fin de desarrollar compuestos que presenten actividad herbicida y a su vez sean inhibidores de cianobacterias.[2]

El presente trabajo aborda la síntesis de péptidos a través de la metodología de síntesis de péptidos en fase sólida (SPPS), seguido de una macrociclación en solución para obtener los respectivos ciclopéptidos, Figura 1 b). La eficacia y selectividad herbicida es evaluada a través del ensayo de germinación en agar en malezas tales como *Lollium multiflorum* y *Conyza spp.* y cultivos tales como trigo, soja y colza. En lo que respecta a la ecotoxicidad, serán presentados resultados de actividad en diferentes organismos acuáticos tales como *Chlorella sp., Vibrio fisheri, Daphnia magna* y pez cebra.

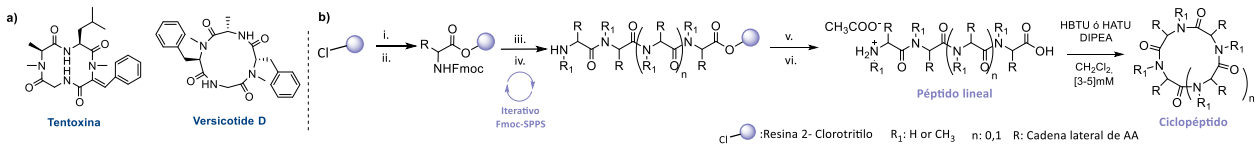


Figura 1. a) Ciclopéptidos naturales Tentoxina y Versicotide D. b) Procedimiento general de SPPS y macrociclación en solución. *i. Carga de la resina: Fmoc-AA-OH, CH_2Cl_2, DIPEA; ii. Capping: MeOH; iii. Desprotección: Piperidina 20% en DMF; iv. Acoplamiento: Fmoc-AA-OH, HBTU/DIPEA ó HATU/DIPEA; v. Desprotección: Piperidina 20% in DMF; vi. Escición: 1% TFA en CH_2Cl_2.*

Nanopartículas de plata funcionalizadas: evaluación *in vitro* de su citotoxicidad y eficacia para uso cosmético

R. Guasamucare[1]; L. Díaz[2]; C. Dauber[3]; I. Vieitez[3]; S. Albores[4]; J. Pereira[5]; E. Parente[1]; L. Arizaga[6]

[1]Área de Tecnología Farmacéutica y Control de Calidad de Medicamentos, Departamento Departamento de Ciencias Farmacéuticas (CIENFAR), Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay
[2]Grupo Bioprospección, Facultad de Ingeniería, Universidad de La Sabana, Colombia
[3]Área Tecnología de Alimentos, Departamento de Ciencia y Tecnología de Alimentos (CyTAL), Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay
[4]Área de Microbiología. Departamento de Biociencias (DEPBIO), Facultad de Química, Universidad de la República (UdelaR), Uruguay
[5]Departamento de Química, Facultad Experimental de Ciencias y Tecnología (FACyT), Universidad de Carabobo, Venezuela
[6]Área de Química Inorgánica, Departamento Estrella Campos (DEC), Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay.
rossannie@fq.edu.uy

Las nanopartículas (NPs) han cobrado protagonismo en la industria cosmética mejorando la estabilidad y eficacia de los productos para el cuidado de la piel. En este estudio se evaluó la citotoxicidad y la eficacia *in vitro* de nanopartículas de plata (AgNPs) funcionalizadas con polivinilpirrolidona (PVP), polivinilalcohol (PVA), L-cisteína (cys) y glicina (gly) como ingredientes activos en hidrogeles cosméticos. Las AgNPs se obtuvieron mediante reducción en fase acuosa a través de micelas de CTAB. Las NPs se caracterizaron mediante espectroscopía UV-Visible, dispersión dinámica de luz (DLS), potencial zeta y microscopía electrónica de transmisión (TEM), mostrando morfología esférica, distribución mono dispersa (8,25 ± 1,53 nm) y buena estabilidad coloidal. Se evaluaron efectos citotóxicos en cultivo celulares *in vitro,* utilizando el ensayo de viabilidad celular con bromuro de 3(4,5 dimetil-2-tiazoil)-2,5-difeniltetrazólico (MTT). De los cuatro tipos de nanomateriales estudiados, las AgPVP NPs mostraron moderada viabilidad celular, mientras que las Agcys NPs no presentaron toxicidad (viabilidad superior al 80 %) en líneas celulares de queratinocitos (HaCaT) y fibroblastos (HDFa). Por este motivo, ambas fueron seleccionadas para su incorporación en los geles. La eficacia *in vitro* de los geles con NPs se estudió en términos de actividad antimicrobiana, capacidad antioxidante y protección frente a la radiación UVB. La actividad antimicrobiana *in vitro* se estimó mediante el ensayo de halo de inhibición empleando cepas de referencia según la norma ISO 11930, se observó una mayor sensibilidad frente a *Staphylococcus aureus*, patógeno común en piel. La actividad antioxidante *in vitro* se evaluó mediante el ensayo con 2.2´azinobis-(3-etilbenzotiazolin-6-sulfónico) ABTS. Las formulaciones presentaron actividad antioxidante creciente con el tiempo de exposición comparable a la de la niacinamida, activo cosmético antioxidante. En cuanto a la fotoprotección, se determinó el factor de protección solar (FPS) *in vitro* de los hidrogeles encontrándose valores entre 15-18. En base en los resultados experimentales obtenidos hasta el momento, se evidencia un alto potencial para la aplicación de estas NPs en el desarrollo de formulaciones cosméticas con propiedades multifuncionales.

Diseño de compuestos tricarbonílicos de Mn(I) y Re(I) con ligandos azólicos bioactivos para tratamiento de enfermedades desatendidas

Carolina Del Mármol[1,2]; Gonzalo Scalese[1]; Ignacio Machado[3]; Leticia Pérez-Díaz[4]; Dinorah Gambino[1]

[1]Área Química Inorgánica, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

[2]Programa de Posgrado de la Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

[3]Área Química Analítica, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

[4]Sección Genómica Funcional, Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay

cdelmarmol@fq.edu.uy

Las enfermedades tropicales desatendidas como la enfermedad de Chagas y la leishmaniasis visceral, causadas por los parásitos tripanosomátidos *Trypanosoma cruzi* y *Leishmania infantum*, poseen un severo impacto en la población de América Latina.

En la búsqueda de nuevas moléculas bioactivas para el tratamiento de estas enfermedades, se han desarrollado compuestos de fórmula *fac*-[M^{I}(CO)$_3$(CTZ)(NN)](PF$_6$), siendo M=Mn(I) o Re(I), CTZ=clotrimazol, y NN=polipiridinas derivadas de 1,10-fenantrolina. Estos compuestos presentaron una actividad prometedora en el estadío tripomastigota de *T. cruzi* (0,25-4,46 µM) y promastigota de *L. infantum* (0,80-2,91 µM), y selectividades moderadas. Intentando elucidar algunos de los posibles mecanismos de acción de los compuestos, se constató la inhibición de la enzima parasitaria lanosterol 14-α-desmetilasa, involucrada en la síntesis de ergosterol, a través de la acumulación de precursores de la vía y depleción del producto.

Con el objetivo de rediseñar compuestos con potencial actividad antiparasitaria, se seleccionó el ligando NN que resultó en el compuesto más activo, 3,4,7,8-tetrametil-1,10-fenantrolina, para la síntesis de nuevos compuestos de esta familia, ahora con otros azoles inhibidores de la vía biosintética del ergosterol: bifonazol, miconazol y ketoconazol (Figura 1). Estos nuevos compuestos están en proceso de ser evaluados contra *T. cruzi*, *L. infantum* y células mamíferas modelo.

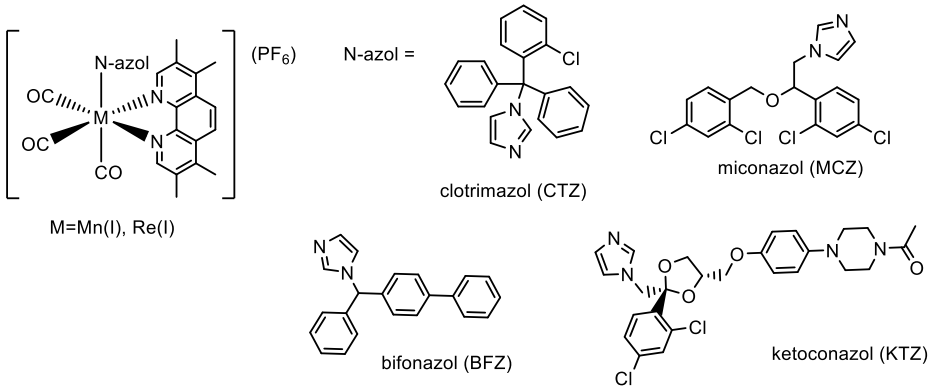


Figura 1: Esquema de los compuestos sintetizados

Evaluación fisicoquímica, in vitro, e in vivo de potencial radiotrazador PET, derivado de kenpaullona, para imagenología molecular de GSK-3β en enfermedad de Alzheimer

Maia Zeni[1,2]; Laura Reyes[2]; Manuela Bentura[2]; Florencia Arredondo[2]; Rosina Dapueto[2]; Ana Rey[1]; Javier Giglio[2]

[1]*Área Radioquímica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Investigación y desarrollo, Centro Uruguayo de Imagenología Molecular, Montevideo, Uruguay*

mzeni@fq.edu.uy

La enfermedad de Alzheimer (EA) se ha convertido en un problema de salud muy sensible mundialmente. La enzima glucógeno sintasa quinasa-3 (GSK-3β) presenta un incremento en su actividad en pacientes con EA, y una relación estrecha con procesos característicos en EA. Por esto los inhibidores de GSK-3β resultan de interés para el desarrollo de radiotrazadores para esta enfermedad.
El objetivo de este trabajo es la evaluación fisicoquímica, in vitro e in vivo de la (9-bromo-7,12-dihidrobenzo[2,3]azepino[4,5-b]indol-6(5H)-ona (kenpaullona) inhibidor de GSK-3β (IC50=23nM) marcado con ^{11}C ([^{11}C]KEN).
La marcación se realizó mediante metilación sobre el nitrógeno del grupo indol en un módulo TracerLab FXc-pro. El agente metilante [^{11}C]MeI (1260-1000mCi) se hizo reaccionar con $1{,}53x10^{-2}$ nmol de kenpaullona, $1{,}23\ x10^{-2}$ mmol de Cs_2CO_3 durante 4 minutos a 95°C en DMSO seco. La pureza radioquímica (PRQ) y la estabilidad se estudiaron mediante HPLC. La lipofilia se evaluó mediante logP=[n-octanol]/buffer fosfato (0,1M, pH=7,4) y la unión a proteínas plasmáticas (PPB) mediante cromatografía de exclusión molecular. Se determinó el porcentaje de unión en neuronas de fetos de ratones C57 de 16-18 días, y en astrocitos derivados de ratones 3xTg-AD neonatos incubando las células con [^{11}C]KEN durante 5, 10 y 20 minutos a 37ºC y 5% de CO_2. Se estudió su biodistribución en ratones F2 y 3xTg-AD de 12 meses (n=3).
Se obtuvo [^{11}C]KEN, con un rendimiento de 17±5% corregido por decaimiento y una PRQ de 99,0±0,8%. [^{11}C]KEN fue estable en medio de reacción y en plasma humano durante al menos 1h. La lipofilicidad fue Log (P) = 1,04±0,04 y PPB de 73±2%. El porcentaje de unión del potencial radiotrazador fue mayor en neuronas que en astrocitos en todos los tiempos estudiados, por ejemplo a los 20 minutos, 36,9±3,0% y 3,8±1,8% para astrocitos y neuronas respectivamente. El potencial radiotrazador presenta especificidad por neuronas, comportamiento esperado debido a que GSK-3β se expresa mayormente en neuronas. Los estudios en animales mostraron baja captación en cerebro, 0,33% en ratones 3xTg-AD. A fin de evaluar su potencialidad como agente de imagen de GSK3 en la EA, se va a continuar con estudios in vivo comparando la biodistribución entre animales normales y portadores de la enfermedad de Alzheimer en diferentes estadios de la misma.

Detección indirecta de contraiones de metales alcalinos utilizando transistores electroquímicos orgánicos basados en P3HT

Tatiana Gregorio; Dominique Mombrú; Mariano Romero; Alvaro W. Mombrú

Área Física, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de República, Montevideo, Uruguay

tgregorio@fq.edu.uy

Los transistores electroquímicos orgánicos (OECT, por sus siglas en inglés) son uno de los biosensores más prometedores que pueden operar en electrolitos acuosos, y son particularmente interesantes para transducir y amplificar fluctuaciones iónicas de baja amplitud de origen biológico [1]. En un dispositivo OECT, el electrodo gate controla la cantidad de corriente que fluye por el canal, el cual está típicamente compuesto por un conductor orgánico mixto que puede experimentar cambios reversibles en su estado de dopado debido a su interacción con especies iónicas presentes en un electrolito acuoso.

Uno de los materiales más utilizados es el poli(3-hexiltiofeno) (P3HT) que permite operar en modo de acumulación [2-5]. Aunque el P3HT tiene una naturaleza hidrofóbica, recientes estudios han demostrado que tanto las regiones amorfas como cristalinas pueden participar en procesos de dopaje, sugiriendo que el transporte de carga no se limita a fenómenos interfaciales [6].

Diversos estudios han mostrado que el tipo de anión influye significativamente en el comportamiento del OECT, también se ha observado que los cationes, como los metales alcalinos, juegan un papel importante en el mecanismo de dopaje, afectando tanto el umbral de voltaje como la corriente del transistor [7].

En este trabajo, se ha estudiado el efecto del dopaje del P3HT utilizando LiTFSI, un dopante altamente eficiente y se observa que el tipo de contraión alcalino (Li^+, Na^+, K^+, etc.) puede afectar notablemente la respuesta de los OECTs en modo de acumulación, incluso en presencia de electrolitos secundarios como sales de cloruro.

Se realizaron estudios *in-operando* de dispersión de rayos X y espectroscopía Raman para investigar estos efectos estructurales y electrónicos, confirmando que los procesos de dopaje y transporte en P3HT son complejos y fuertemente dependientes del entorno iónico. Estos hallazgos abren nuevas posibilidades para el diseño de dispositivos bioelectrónicos más sensibles y selectivos, ajustando las propiedades del electrolito y del material conductor del canal.

Referencias:
[1] Kukhta, N. A. et al. Chem. Rev. 2022, 122, 4325−4355. [2] Paulsen, B. D. et al. Nat. Mater. 2020, 19, 13−26. [3] Rivnay, J. et al. Nat. Commun. 2016, 7, 11287. [4] Khodagholy, D. et al. Nat. Commun. 2013, 4, 2133. [5] Romero, M. et al. ACS Appl. Electron. Mater. 2023,5, 9, 4863–4874. [6] Guardado, J. O. et al. Adv. Funct. Mater. 2017, 27 (32), 1701791. [7] Savva, A. et al. Chem. Mater. 2019, 31, 927−937.

Presentaciones Orales

Sesión 4 (Jueves 23/10 – 14:30-15:30)

Auditorio Mario Benedetti

PO.13A-IA Jessica Osorio - *Del Ceibo al laboratorio: tres estrategias para el diagnóstico de infecciones*

PO.14A-IA Rodrigo Moreira - *Tungstovanadatos contra enfermedades tropicales desatendidas*

PO.15A-QO Belén Dávila - *Caracterización farmacocinética de agentes antitumorales: predicciones ADMET, estabilidad a distintos pH y distribución subcelular*

PO.16A-QO Selva Cora - *Caracterización de compuestos fenólicos en mieles de Montes del Queguay mediante metabolómica dirigida y no dirigida por HRMS y su asociación con el perfil polínico*

Sala Idea Vilariño

PO.13B-BQ Camila Rodriguez - *Síntesis biológica de nanopartículas de plata por Xanthophyllomyces dendrorhous*

PO.14B-BQ Micaela González Steffano - *Análisis de comunidades microbianas de suelos antárticos con potencial desnitrificante mediante ensayos de microcosmos -*

PO.15B-FQ Santiago Pioli - *Avances en la preparación y en la caracterización ex situ e in situ de óxidos tipo perovskita para electrodos de oxígeno en celdas de electrólisis de óxido sólido para la producción de hidrógeno verde*

PO.16B-FQ Melissa Romero - *Desarrollo, evaluación fisicoquímica, sensorial y reológica de bebidas vegetales a base de quinoa, arroz y avena*

Del Ceibo al laboratorio: tres estrategias para el diagnóstico de infecciones

Jessica Osorio[1]; Micaela Morais[1]; Eduardo Savio[2]; Javier Giglio[2]; Gianna Cecchetto[3]; Mariella Terán[1]

[1]Area Radioquímica, DEC, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay.

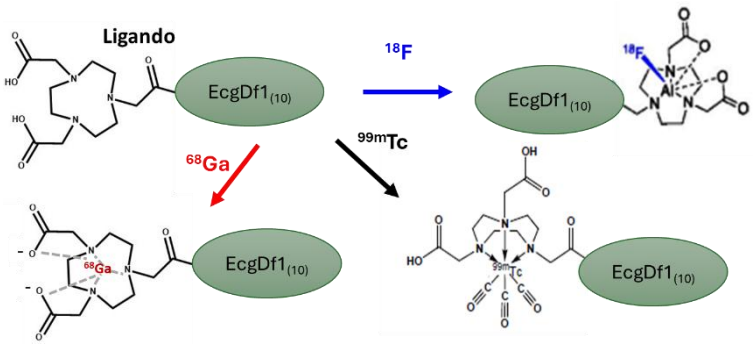
[2]Departamento de Radiofarmacia, CUDIM, Montevideo, Uruguay.

[3]Microbiología, IQB, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay

j.vosorio93@gmail.com

La visualización de focos ocultos de infección es un problema relevante de salud pública que en la actualidad no cuenta con un diagnóstico óptimo. Una posibilidad es el uso de imágenes moleculares, para esto, en el marco de la tesis de doctorado se propuso el desarrollo de una biblioteca de complejos obtenidos a través de diferentes estrategias químicas de radiomarcado. Uno de los farmacóforos estudiados es EcgDf1$_{(10)}$ (GHCRGFRRRC), un análogo sintético de la defensina EcgDf1, péptido antimicrobiano identificado en *Erythrina crista-galli* (Ceibo).

Este fue derivatizado con el agente quelante bifuncional Ácido 1,4,7-triazaciclononano-1,4,7-triacético (NOTA) el cual puede ser marcado con radionucleidos ampliamente usados en imagenología molecular como ^{68}Ga, ^{99m}Tc, ^{18}F.



Se realizó la optimización de los radiomarcados que se obtuvieron con alta pureza radioquímica (PRQ >90%) además se evaluó las propiedades fisicoquímicas y biológicas más relevantes. [^{68}Ga]Ga-NOTA-K-EcgDf1$_{(10)}$ mostró una elevada estabilidad el medio de reacción, en plasma humano y en presencia de (DTPA) (PRQ> 90%, 4hs). [^{99m}Tc]Tc(CO)$_3$-NOTA-K-EcgDf1$_{(10)}$ fue estable en el medio de reacción por 4hs y con histidina 10x por 3hs. Sin embargo, mostró una baja estabilidad en plasma humano (PRQ< 60% en 1h). Ambos complejos mostraron un comportamiento hidrofílico (log p: -2,5±1,7 y -1,2±2,4) y valores intermedios de unión a proteínas plasmáticas (42,8±1,7% y 52,5±2,4%). Para el complejo de ^{68}Ga se evaluó su capacidad de unión *in vitro* a cultivos de microorganismos (*C. albicans*: 28,1±5,1%, *A. niger*: 71,3±5,9%) y fue evaluado *in vivo* en modelo animal, donde se obtuvieron imágenes que permitieron diferenciar tejidos sanos de infecciones (Coeficiente captación T/NT: infección *C. albicans*: 4,5±0,5 / infección *A. niger*: 5,3±0,6 / *inflamación estéril*: 2,1±0,2).

[^{68}Ga]Ga-NOTA-K-EcgDf1$_{(10)}$ presentó propiedades fisicoquímicas y biológicas adecuadas como potencial radiotrazador para la detección de infecciones. [^{99m}Tc]Tc(CO)$_3$-NOTA-K-EcgDf1$_{(10)}$ presentó una baja estabilidad en plasma humano, se evaluarán otros agentes quelantes para este radionucleido. Actualmente se está trabajando en la optimización y purificación del complejo [^{18}F]AlF-NOTA-K-EcgDf1$_{(10)}$.

Tungstovanadatos contra enfermedades tropicales desatendidas

Rodrigo Moreira[1,2,3]; Jonathan Bastidas[1,4]; Gonzalo Hernández[5]; Ignacio Machado[6]; Leticia Pérez Díaz[4]; María Cruz Mollo[7]; Mariela Bollini[7]; Gonzalo Scalese[1,8]; Dinorah Gambino[1]

[1]*Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay*
[2]*Programa de Posgrado de Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay*
[3]*PEDECIBA – Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas, Uruguay*
[4]*Sección Genómica Funcional, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Uruguay*
[5]*Laboratorio de RMN, DQO, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay*
[6]*Área Química Analítica, DEC, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay*
[7]*Laboratorio de Química Medicinal, Centro de Investigaciones en Bionanociencias (CIBION), CONICET, Argentina*
[8]*Laboratorio de Biología Redox de Tripanosomas, Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay*

rmoreira@fq.edu.uy

Las enfermedades tropicales desatendidas son un grupo de 20 afecciones médicas provocadas por diversos patógenos, incluidos virus, bacterias, protozoos y helmintos. Dos de estas, la enfermedad de Chagas y el Dengue, de origen parasitario y viral, afectan a 6 y 390 millones de personas, respectivamente. Los polioxometalatos (POMs) son un grupo de compuestos formados principalmente por metales de los grupos 5 y 6, los cuales han mostrado una variedad de efectos biológicos [1]. En el presente trabajo se evaluaron 4 POMs basados en tungsteno y vanadio contra las fases infectivas y no infectivas de *Trypanosoma cruzi*, agente etiológico de la enfermedad de Chagas, y contra la proteasa de Dengue DV2Pro. Se encontraron mejoras en la actividad *in vitro* contra la fase infectiva de *Tryoanosoma cruzi* y sobre la DV2Pro, respecto a las especies monoméricas VO_4^{3-} y WO_4^{2-}. Particularmente, se encontraron actividades del orden nanomolar en la proteasa de Dengue para algunos de los POMs estudiados.

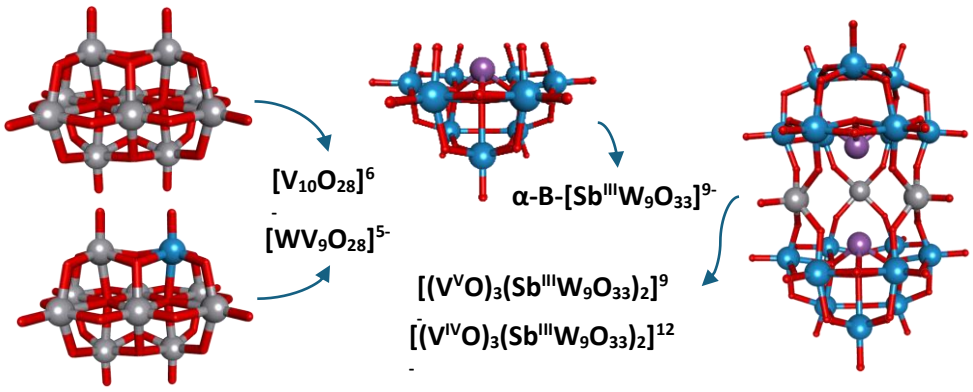


Figura 1. Estructura de los POMs formados por V y W.

Además, se estudió la especiación de los compuestos sintetizados mediante espectroscopias ^{51}V RMN y visible en los medios de cultivo utilizados para *Trypanosoma cruzi* (BHI y RPMI) y buffer (10 mM Tris-HCl, 20% glicerol, 1 mM CHAPS, pH 8,5).

[1] Aureliano, M.; *et al. Coord Chem Rev 447*, 214143 (2021)

Caracterización farmacocinética de agentes antitumorales: predicciones ADMET, estabilidad a distintos pH y distribución subcelular

Belén Dávila[1]; Wesley Gouveia[2]; Lídia Moreira Lima[2]; Alejandra Dagrosa[3]; Hugo Cerecetto[1,4]; Marcos Couto[1]

[1]*Grupo de Química Orgánica Medicinal, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, UdelaR, Uruguay*

[2]*Laboratório de Avaliação e Síntese de Substâncias Bioativas, Instituto de Ciências Biomédicas, Centro de Ciências de lá Salud, UFRJ, Brasil.*

[3]*División Medicina Nuclear, Comisión Nacional de Energía Atómica, UBA, Argentina.*

[4]*Radiofarmcia, Centro de Investigaciones Nucleares, Facultad de Ciencias, UdelaR, Uruguay.*

bdavila@fcien.edu.uy

Los gliomas malignos representan la forma más frecuente y agresiva de tumores cerebrales primarios en adultos, con un pronóstico especialmente adverso en el caso de los glioblastomas. Hasta el momento, no se dispone de tratamientos realmente efectivos. (1) Sin embargo, ha sido propuesta como nueva estrategia terapéutica la conjunción de terapia dirigida, como son los receptores con actividad tirosina quinasa (TKR), blanco terapéutico en glioblastomas, y la terapia por captura neutrónica de boro basada en la captura de neutrones por el nucleido estable ^{10}B, que desencadena una reacción nuclear llevando a la generación de cationes de $^{4}He^{+2}$ y $^{7}Li^{+3}$, ambos con elevada transferencia lineal de energía como para destruir la célula tumoral. (2,3)

En este sentido, hemos trabajado en la preparación de análogos estructurales del fármaco erlotinib, un reconocido inhibidor de proteínas con actividad tirosina quinasa, y en la incorporación sobre estos de un farmacóforo adecuado para BNCT.

De manera de ahondar en las propiedades tipo fármaco de las entidades generadas se presentarán resultados en cuanto a su estabilidad química y metabólica en presencia y ausencia de cofactores donde los compuestos evaluados fueron estables en tres diferentes pH, pero metabolizados en presencia de un sistema catalizador. Por otro lado, para lograr una eficaz BNCT es necesaria una determinada acumulación de boro dentro de la célula, la cual fue cuantificada por ICP-AES a diferentes tiempos sobre la línea humana de glioblastoma U-87MG, presentando acumulación hasta las 24 horas en distintas fracciones subcelulares.

Referencias:

(1) McKinnon, C. et al. *Glioblastoma: clinical presentation, diagnosis, and management*. British Medical Journal. 2021.
(2) Couto, M. et al. *Small-Molecule Kinase-Inhibitors-Loaded Boron Cluster as Hybrid Agents for Glioma-Cell-Targeting Therapy*. Chemistry a European Journal. 2017
(3) Cerecetto, C. et al. *Medicinal Chemistry of Boron-Bearing Compounds for BNCT- Glioma Treatment: Current Challenges and Perspectives*. Contemporary Diagnostic and Therapeutic Approaches. 2018

Caracterización de compuestos fenólicos en mieles de Montes del Queguay mediante metabolómica dirigida y no dirigida por HRMS y su asociación con el perfil polínico

Selva Cora[1]; Sandra Zapata[1]; Romina Curbelo[2]; Tiziana Nardin[3]; Roberto Larcher[3]; Gloria Daners[4]; Gabriela Tamaño[1]; Eduardo Dellacassa[2]

[1]ApiUTEC–Laboratorio de Tecnología de la Miel y Productos Apícolas, UTEC, Paysandú, Uruguay
[2]Laboratorio de Biotecnología de Aromas, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química-UdelaR, Montevideo, Uruguay
[3]Centro Trasferimento Tecnologico, Fondazione Edmund Mach, San Michele all'Adige (TN), Italy
[4]Instituto de Ciencias Geológicas, Facultad de Ciencias-UdelaR, Montevideo, Uruguay

selva.cora@utec.edu.uy

El parámetro más comúnmente considerado para la identificación botánica de la miel es la composición polínica, es decir, la proporción de polen dominante. Sin embargo, es importante señalar que algunas plantas están subrepresentadas en términos de contenido de polen, como los cítricos, acacia y lavanda. Por otra parte, la composición polínica de la miel depende del origen botánico, de la distancia recorrida por las abejas y del método de muestreo utilizado. En consecuencia, los resultados del análisis del polen dependen de muchos factores, además del origen botánico. En este sentido, el estudio metabolómico de polifenoles en mieles representa una herramienta para profundizar en el conocimiento de su composición química, calidad y propiedades funcionales. A través del análisis no dirigido mediante LC-MS/MS, es posible identificar y cuantificar una amplia gama de compuestos fenólicos que actúan como marcadores de origen botánico y geográfico, además de contribuir a las propiedades antioxidantes y bioactivas de la miel. Este enfoque permite evaluar variaciones asociadas al entorno floral, condiciones climáticas y prácticas apícolas, aportando evidencia científica robusta para diferenciar productos, proteger denominaciones de origen y promover su valorización comercial. Asimismo, el enfoque metabolómico brinda información fundamental para investigar el potencial terapéutico de la miel y su uso como fuente natural de compuestos bioactivos.

El objetivo de este trabajo fue evaluar la composición en polifenoles de miel producida en diferentes cosechas en la zona protegida de Montes del Queguay mediante UHPLC-ESI-MS/MS y explorar la posible relación entre el patrón de polifenoles y el origen botánico.

Los perfiles metabolómicos permitieron identificar compuestos fenólicos característicos y diferenciadores de las mieles estudiadas, evidenciando su utilidad como herramienta complementaria para la caracterización botánica y funcional.

Síntesis biológica de nanopartículas de plata por *Xanthophyllomyces dendrorhous*

Camila Rodríguez[1,2]; Diego M. Roldán[1]; María E. Vila[2]; Claudia Lareo[2]; Silvana Alborés[1]

[1]*Laboratorio de Biotecnología, Área de Microbiología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Departamento de Ingeniería Bioquímica y Bioprocesos, Instituto de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

crodriguez@fing.edu.uy

La síntesis biológica de nanopartículas ha cobrado gran relevancia en los últimos años debido a sus múltiples ventajas frente a la síntesis química, como su menor impacto ambiental, simplicidad del proceso y mayor estabilidad de las nanopartículas obtenidas. En este contexto, levaduras como *Xanthophyllomyces dendrorhous* resultan especialmente atractivas por su capacidad para actuar como agentes reductores en la biosíntesis de nanopartículas metálicas, además de ser reconocidas por su potencial biotecnológico en la producción de carotenoides como la astaxantina. En el marco de una estrategia de aprovechamiento de la biomasa residual obtenida para la producción de carotenoides, este trabajo evaluó la capacidad de *X. dendrorhous* para la síntesis de nanopartículas de plata biogénica. Para ello se realizó, por un lado, el protocolo de síntesis reportado por el grupo para otros hongos, a partir de la biomasa obtenida en escala matraz, empleando la cepa *Xanthophyllomyces dendrorhous* DSM5626. Además, la síntesis se evaluó también empleando la biomasa obtenida mediante fermentación en biorreactor de 1 L utilizando un medio sintético, con una concentración de oxígeno disuelto mínima del 10%, incubando durante 7 días a 20 °C. En ambos casos, la biomasa se incubó en agua estéril (0,1 g/mL) durante 24 horas para obtener un exudado fúngico que fue filtrado, mezclado con una solución de nitrato de plata (5 mM) e incubado a 28 °C durante 7 días. La síntesis fue monitoreada mediante espectrofotometría UV-Vis (200–800 nm), observándose la aparición progresiva del pico de resonancia de plasmón superficial (~420 nm), indicativo de la formación de nanopartículas de plata. Luego de centrifugar, lavar y resuspender en agua estéril, se confirmó el tamaño de las nanopartículas purificadas, así como su baja polidispersidad mediante medidas de DLS. Estos resultados permiten confirmar la capacidad de *X. dendrorhous* para mediar la síntesis biogénica de nanopartículas de plata, sentando las bases para el aprovechamiento integral de esta levadura tanto en la producción de astaxantina como en la generación de nanomateriales de interés biotecnológico.

Agradecimientos: PEDECIBA, ANII, CSIC, Posgrado en Biotecnología-UDELAR

Análisis de comunidades microbianas de suelos antárticos con potencial desnitrificante mediante ensayos de microcosmos

Micaela González Steffano[1]; Patricia Bovio-Winkler[1]; Angela Cabezas[2]; Claudia Etchebehere[1]

[1]Laboratorio de Ecología Microbiana, Departamento Bioquímica y Genómica Microbianas, Instituto de Investigaciones Biológicas Clemente Estable, Montevideo, Uruguay.

[2]Laboratorio Microbiología Ambiental y Biotecnología, Unidad Tecnológica de Recursos Naturales, Universidad Tecnológica del Uruguay, Durazno, Uruguay.

mgsteffano16@gmail.com

La desnitrificación es una ruta metabólica clave del ciclo del nitrógeno, en la cual compuestos nitrogenados reactivos (NO_3^- y NO_2^-) son utilizados como aceptores terminales de electrones en condiciones anaeróbicas, y se reducen secuencialmente a NO, N_2O y N_2. Este proceso microbiano regula el balance global de nitrógeno, pero también es la principal fuente biológica de óxido nitroso (N_2O), un gas de efecto invernadero con un potencial de calentamiento global 310 veces mayor que el CO_2. Factores como temperatura, pH, oxígeno y disponibilidad de sustratos afectan la eficiencia del proceso y los productos generados. En ambientes fríos como la Antártida, se ha observado una mayor acumulación de N_2O, posiblemente asociada a la baja presencia o expresión reducida del gen *nosZ*, que codifica la enzima óxido nitroso reductasa. El objetivo de este estudio es caracterizar las comunidades microbianas presentes en suelos antárticos potencialmente involucradas en la desnitrificación. Se llevaron a cabo ensayos de microcosmos anaerobios utilizando medio mínimo suplementado con acetato y nitrato de potasio, ajustado a pH 7. Se tomó una muestra de 6 puntos diferentes de la Antártida marítima que se inocularon en el medio de cultivo y se incubaron a 4ºC. Se realizaron subcultivos sucesivos conforme se consumía el nitrato y nitrito del medio. Todas las muestras presentaron crecimiento y consumo de nitrato y nitrito en 7 a 9 días, estos resultados sugieren una gran capacidad de desnitrificación a bajas temperaturas. Se analizó la composición de las comunidades microbianas mediante secuenciación de amplicones del gen ARNr 16S en muestras de suelo original, primer subcultivo y cuarto subcultivo, provenientes de Half Three Point (HTP; suelo sin impacto) y Playa de la BCAA (PBCAA; suelo con impacto). El análisis de las comunidades microbianas está aún en proceso, estos resultados nos indicarán cuáles son los microorganismos que están llevando a cabo la desnitrificación a bajas temperaturas.

Financiamiento ANII-FCE_1_2023_1_176290

Agradecimientos: Instituto Antártico Uruguayo

Avances en la preparación y en la caracterización ex situ e in situ de óxidos tipo perovskita para electrodos de oxígeno en celdas de electrólisis de óxido sólido para la producción de hidrógeno verde

Santiago Pioli[1]; Natasha Di Benedetto[1,2]; Joaquín Grassi[1,3]; Piotr Winiarz[4]; Konrad Swierczek[4]; Leopoldo Suescun[1]

[1]Cryssmat-Lab/Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay,
[2]Department of Advanced Materials for Energy, Catalonia Institute for Energy Research, Barcelona, España,
[3]Centro Tecnológico EnergyLab, Vigo, España,
[4]Faculty of Energy and Fuels, AGH University of Science & Technology, Cracovia, Polonia,

spioli@fq.edu.uy

Las Celdas de Electrólisis de Óxido Sólido (SOEC) representan una vía prometedora para la producción de hidrógeno verde. Están compuestas por un electrolito sólido que conduce iones oxígeno (O^{2-}) o protones (H^+), flanqueado por dos electrodos sólidos. Estos electrodos, fundamentales para facilitar la descomposición electroquímica del agua en H_2 (en el electrodo de combustible) u oxidación a O_2 (en el electrodo de oxígeno), requieren conductividad mixta iónica-electrónica y alta actividad catalítica. En el Cryssmat-Lab/DETEMA se ha implementado un método de síntesis por auto-combustión que permite reducir la temperatura de preparación de materiales nanoestructurados tipo fluorita y perovskita. Esto mejora la microestructura de electrodos y electrolitos, impactando positivamente en sus propiedades catalíticas en todo tipo de Celdas de Óxido Sólido (SOC), particularmente en sistemas reversibles SOFC/SOEC. Este estudio se centra en materiales potenciales para electrodos de oxígeno en SOEC: $Ba_{0.5}Sr_{0.5}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-\delta}$ (BSFCu) y $La_{0.6}Sr_{0.4}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-\delta}$ (LSFCu), combinados con un 20% de CeO_2 dopado con lantano. Se realizaron análisis estructurales y electroquímicos, incluyendo refinamiento tipo Rietveld para caracterizar la evolución estructural y difracción de rayos X de polvo con radiación sincrotrón en la línea PAINEIRA. Además, se determinaron los coeficientes de expansión térmica cristalográficos para evaluar la compatibilidad estructural electrodo-electrolito. Los electrodos microestructurados preparados muestran un desempeño muy prometedor en condiciones de operación reversible.

Los autores agradecen a la ANII por los proyectos ANII_FMV_2021 _168994, Cooperación regional ANII_TE_2023_1012611 y a PEDECIBA Química.

Referencias:

[1] Grassi J, et al. Electrochim. Acta 2023, 464, 142931. [2] Grassi J, et al. J. Mater Sci. Tech. Res. 2021, 8 82-91. [3] Vázquez S, et al. J. Solid State Chem 2015, 228, 208. Acta Cryst. C 71, 3-8.

Desarrollo, evaluación fisicoquímica, sensorial y reológica de bebidas vegetales a base de quinoa, arroz y avena

Melissa Romero[1]; Alexander Lopez[1]; Mariela Piston[2]; Ignacio Vieitez[1]; Tomas López Pedemonte[3]; Adriana Gámbaro[1]

[1]*Ciencia y Tecnología de Alimentos, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo Uruguay.*

[2]*Área Química Analítica-DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo Uruguay.*

[3]*Unidad Tecnológica de Lácteos, Departamento de Alimentos, Instituto Tecnológico Regional Suroeste, UTEC, Colonia La Paz, Uruguay.*

melissaromero@fq.edu.uy

El mercado de bebidas vegetales ha crecido de forma constante en los últimos años, impulsado por el aumento de alergias a la proteína de la leche de vaca (0.5%–3.5%), la alta prevalencia de intolerancia a la lactosa (65%–75%) y la adopción de dietas sin lácteos o veganas. Estas tendencias han generado la necesidad de desarrollar alternativas que respondan a estas nuevas demandas. Este trabajo se enfoca en el desarrollo de una bebida vegetal elaborada con avena, arroz y quinoa, a la que más adelante se le aplicará un tratamiento de altas presiones hidrostáticas (HPP) para prolongar su vida útil sin afectar su calidad nutricional ni sensorial. Se realizaron distintas elaboraciones utilizando distintas proporciones de ingredientes y niveles de sólidos totales (5%, 10%, 15% y 20%), definiéndose finalmente una fórmula con 15% de sólidos totales y empleando el siguiente procedimiento: se muelen los tres componentes hasta obtener una harina fina y se mezclan con el agua donde se procesan en un robot de cocina (Taurus MyCook Easy. La mezcla final se filtra con un filtro de tela para obtener la bebida vegetal. En base a estudios fisicoquímicos y sensoriales se definieron cuatro formulaciones: Fórmula 1 (F1: 4.5% arroz, 2.5% avena, 8% quinoa blanca), Fórmula 2 (F2: 2.5% arroz, 4.5% avena, 8% quinoa blanca), Fórmula 3 (F3: sin avena, 7% arroz, 8% quinoa blanca) y Fórmula 4 (F4: sin arroz, 7% avena, 8% quinoa blanca). Estas formulaciones fueron evaluadas desde el punto de vista nutricional, sensorial y de textura. Se determinó el contenido de proteínas por el método de Kjeldahl y el contenido de minerales (Na, K, Ca, Mg, Fe, Mn, P, Zn y Cu) usando un espectrómetro de emisión óptica de plasma inducido por microondas modelo 4210 (MP-AES, Agilent Technologies). Se evaluaron propiedades reológicas (viscosidad aparente μ_a, comportamiento de flujo n) en un reómetro de esfuerzo controlado Anton Parr, utilizando geometría de cilindros concéntricos CC39. También, se llevó a cabo un estudio sensorial con 11 jueces entrenados quienes evaluaron 11 descriptores con escalas no estructuradas de 10 cm. Se utilizó análisis de varianza (ANOVA) seguido de test de Tukey para identificar diferencias significativas entre formulaciones ($p < 0.05$). La fórmula con mayor concentración proteica fue la F4, con un 0.94±0.04%, seguida por F2 con 0.85±0.01%, F1 con 0.68±0.10% y finalmente F3 con 0.51±0.04% ($p<0.05$). Los principales minerales presentes en las muestras fueron el P (entre 201.0 – 271.8 mg/L), el K (143.8 – 152.0 mg/L) y el Mg (108.0 – 148.25 mg/L). Desde el punto de vista sensorial, F3 presentó el menor olor a cereal/semilla, mientras que F4 se destacó por un sabor más persistente. Por su parte, F2 fue la que mostró mayor astringencia ($p<0.05$). En cuanto a la viscosidad, F2 y F4 fueron percibidas como las más viscosas o espesas ($p<0.05$). Esto concuerda con los resultados de μ_a a una tasa de corte de 50 s^{-1}, altamente correlacionado con el esfuerzo percibido al tragar (Ross et al, 2019), se encontró que la F4 presentó la mayor viscosidad (39.30±0.40) mPa·s; seguida de F2 (23.00±0.60) mPa·s, F3 (12.77±0.10) mPa·s y F1 (11.55 ±0.10) mPa·s ($p<0.05$). Se observó también que las bebidas siguen un comportamiento pseudoplástico. En general, las bebidas con mayor proporción de avena mostraron mayores niveles de proteínas, mayor viscosidad y una mayor persistencia en el sabor. Con base en estos resultados, se seleccionarán las formulaciones 2 y 4, para luego someterlas al tratamiento de HPP y continuar con su desarrollo.

Presentaciones Orales

Sesión 5 (Viernes 24/10 – 11:30-12:30)

Auditorio Mario Benedetti

PO.17A-QO Romina Curbelo - *Evaluación de la variabilidad fenotípica y enológica en plantas de Albariño (Vitis vinifera L.) en Uruguay: un enfoque quimiométrico*

PO.18A-BQ Ana Clara Muniz - *Las nanopartículas de plata biogénicas actúan como adyuvantes vacunales de manera dosis-dependiente*

PO.19A-BQ Natalia Mattos - *Potencial antimicrobiano en mieles de un área protegida de Uruguay*

PO.20A-BQ Guillermo Zinola - *Valorización de residuos de granjas avícolas mediante codigestión anaerobia*

Sala Idea Vilariño

PO.17B-FQ Pilar Vilaro - *Preparación de nuevos materiales a partir de cáñamo: fibras e hidrogeles*

PO.18B-FQ Anabela Martinez - *Oxidación de compuestos volátiles de selenio: impacto en la química atmosférica y en la biodisponibilidad*

PO.19B-QO Rossina Figliolo Mederos - *Desarrollo de una metodología analítica para la determinación de residuos de pesticidas en tilo in natura mediante LC-MS/MS*

PO.20B-QO Lucía Almeida Kutscher - *Valorización, diferenciación y control de autenticidad de la miel de Eucalyptus de Uruguay*

Evaluación de la variabilidad fenotípica y enológica en plantas de Albariño (*Vitis vinifera* L.) en Uruguay: un enfoque quimiométrico

Romina Curbelo[1]; Andres Coniberti[2]; Rossana Zaino[1]; Martin Gervasini[2]; Emilia Patarino[3]; Gerardo Echeverria[4]; Francisco Carrau[5]; Laura Fariña[5]; Eduardo Boido[5]; Eduardo Dellacassa[1]

[1]*Laboratorio de Biotecnología de Aromas, DQO, Facultad de Química-UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[2]*Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria, Las Brujas, Canelones, Uruguay*

[3]*Escuela Superior de Vitivinicultura, El Colorado, Canelones, Uruguay*

[4]*Departamento de Producción Vegetal, Facultad de Agronomía-UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[5]*Area Enologia y Biotecnología de Fermentaciones. CYTAL, Facultad de Química-UdelaR, Montevideo, Uruguay*

rcurbelo@fq.edu.uy

El cambio climático afecta la producción vitivinícola de forma variable según la región, exigiendo estrategias de adaptación basadas en variedades locales y nuevas introducciones. En Uruguay, la variedad Albariño (*Vitis vinifera* L.), originaria de Galicia y el norte de Portugal, ha ganado relevancia por su potencial enológico. A pesar de su creciente popularidad, la selección genética del Albariño es reciente y limitada a unos pocos clones certificados.

Dado el rendimiento variable observado localmente respecto a sus regiones de origen, se ha promovido la plantación mediante selección masal, de la cual han surgido vinos exitosos. Sin embargo, se desconoce si este material representa una única genética o un conjunto diverso. En la temporada 2023/24 se evaluaron 435 plantas madre mediante análisis fenotípico, revelando variabilidad en brotación, floración, maduración, rendimiento y composición del fruto. Los vinos obtenidos fueron analizados sensorialmente y, en los diferenciados, se estudió el perfil volátil (HS-SPME-GC/MS) (1). Los resultados obtenidos muestran que la magnitud de la variabilidad sugiere una posible diversidad genética aún no caracterizada.

Referencias:

1. Mestre, M. V., Maturano, Y. P., Gallardo, C., Combina, M., Mercado, L., Toro, M. E., Carrau, F., Vazquez, F., Dellacassa, E. Fermentation 2019, 5, 65-79

Las nanopartículas de plata biogénicas actúan como adyuvantes vacunales de manera dosis-dependiente

Ana Clara Muniz-Lagos[1,2]; Silvana Alborés[2]; Gustavo Mourglia-Ettlin[1]

[1]Área Inmunología, DEPBIO. Facultad de Química, Universidad de la República. Montevideo, Uruguay
[2]Área Microbiología, DEPBIO. Facultad de Química, Universidad de la República. Montevideo, Uruguay

anac1196@gmail.com

Las vacunas de segunda generación, principalmente aquellas que utilizan proteínas recombinantes como antígenos, se consideran óptimas en términos de bioseguridad. Sin embargo, requieren del uso de adyuvantes para ser efectivas, y, desafortunadamente, en la actualidad son pocos los adyuvantes aprobados para uso clínico. En este sentido, las nanopartículas de plata (AgNPs) se han sugerido como potenciadoras de la inmunogenicidad para antígenos proteicos, y, por ello, previamente exploramos el valor como adyuvante vacunal para nueve AgNPs distintas sintetizadas partiendo de los hongos *Phanerochaete chrysosporium*, *Penicillium expansum* y *Punctularia atropurpurascens*, cada uno crecido en tres medios de cultivo diferentes (PDB, MEB y MGYP). Así, su posible acción adyuvante se evaluó en ratones inmunizados con ovoalbúmina (OVA) -antígeno proteico modelo- mezclada con las AgNPs, y, luego de determinar los títulos IgG séricos específicos para OVA, observamos que cuatro AgNPs mostraron actividad adyuvante significativa a la dosis ensayada ($2x10^9$ AgNPs/kg, denominada "dosis 1x"). Asimismo, resultó particularmente interesante la capacidad polarizadora de las respuestas hacia IgG2a, una subclase de IgG de alto valor inmunológico. La capacidad adyuvante observada para dichas AgNPs, si bien resultó promisoria, requiere de una acción dosis-dependiente para poder predecir y controlar su efecto inmunoestimulante, permitiendo de esa forma ajustar su dosis para que se alcance una eficacia óptima sin generar gran toxicidad y/o efectos adversos no deseados. Por ello, en el presente trabajo, se realizó un estudio comparativo del desempeño como adyuvante vacunal de las AgNPs según la dosis administrada. Para ello, se seleccionaron tres AgNPs: PePDB y PaPDB (ambas con acción adyuvante a dosis 1x), y PchPDB (sin actividad adyuvante a dosis 1x), cuyas biocompatibilidades debieron corroborarse en primer lugar realizando ensayos *in vivo* de toxicidad aguda aplicando una dosis 200x. Luego, se realizó un esquema de inmunización con OVA análogo al realizado originalmente, pero utilizando dosis 6x y 60x de las AgNPs. Los resultados mostraron que PePDB y PaPDB indujeron títulos de IgG específica para OVA mayores con el aumento de dosis de AgNPs; mientras que PchPDB siguió una tendencia similar alcanzando actividad adyuvante significativa a la dosis 60x. Asimismo, para las tres AgNPs estudiadas, se observaron alteraciones en la polarización de las subclases de IgG inducidas según la dosis de AgNPs ensayada. En resumen, los resultados obtenidos respaldan el trabajo con AgNPs biogénicas obtenidas por micosíntesis como nuevos adyuvantes vacunales, sugiriendo que las mismas presentan una interesante versatilidad funcional en base a la dosis de trabajo utilizada.

Potencial antimicrobiano en mieles de un área protegida de Uruguay

Natalia Mattos[1,2,3]; Selva Cora[2,3]; Sandra Zapata[2]; Gabriela Tamaño[2]; Silvana Alborés[1]

[1]*Laboratorio de Biotecnología, Área de Microbiología, DEPBIO, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*ApiUTEC - Laboratorio de Tecnología de la Miel y Productos Apícolas, LAA–ITRSO, Universidad Tecnológica, Paysandú, Uruguay.*

[3]*Posgrado en Química, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

natalia.mattos@utec.edu.uy

La creciente resistencia de las bacterias a los antibióticos ha impulsado la búsqueda de alternativas terapéuticas, y la miel ha surgido como una opción prometedora debido a sus propiedades curativas, especialmente en el tratamiento de heridas y quemaduras. Su capacidad antimicrobiana se atribuye a una combinación de factores, incluyendo su alto contenido de carbohidratos, osmolaridad, pH, producción de peróxido de hidrógeno y compuestos fenólicos. La actividad antimicrobiana de la miel también está influenciada por su origen botánico y geográfico. Este estudio se centró en las mieles de Montes del Queguay en Paysandú, un área protegida de Uruguay donde se fomenta la apicultura. Dado que gran parte de la miel uruguaya se exporta a granel sin diferenciación, esta investigación busca contribuir a identificar y valorizar mieles con atributos distintivos. Se recolectaron muestras en verano de 2022 y 2023, y se analizaron mediante melisopalinología para determinar su origen floral, cuantificando su contenido de fenoles totales con el método de Folin-Ciocalteu. La actividad antimicrobiana fue evaluada por el método estandarizado de microdilución, determinando la concentración mínima inhibitoria y bactericida, y por la capacidad de inhibir la formación de biofilms. Se trabajó con las cepas *Staphylococcus aureus* ATCC 6538P, *Escherichia coli* ATCC 25922 y *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 15422. Los resultados destacan las mieles de especies nativas como *Scutia buxifolia*, *Blepharocalyx salicifolius* y *Terminalia australis*, que presentaron concentraciones de fenoles totales en un rango de 725 a 1.661 mg ác. gálico/Kg. Estas mieles demostraron capacidad para inhibir la formación de biofilms, además de exhibir tanto efectos bacteriostáticos como bactericidas. Se observó una tendencia en el potencial antibacteriano de las mieles en función de su origen botánico. Con base en esta investigación, se sugiere que estas mieles poseen un potencial terapéutico, atributo que contribuye a la valorización, lo cual resulta alentador para ampliar estudios en su diferenciación.

Agradecimientos: Programa I+D - UTEC y PEDECIBA Química, UDELAR.

Valorización de residuos de granjas avícolas mediante codigestión anaerobia

Guillermo Zinola[1,2], Claudia Etchebehere[2]

[1]*Departamento de Sostenibilidad Ambiental, Universidad Tecnológica del Uruguay (UTEC), Uruguay.*

[2]*Laboratorio de Ecología Microbiana, Departamento de Bioquímica y Genómica Microbiana, Instituto de Investigaciones Biológicas Clemente Estable (IIBCE), Uruguay.*

guillermo.zinola@utec.edu.uy

La producción avícola en Uruguay se concentra en el sur del país, donde la producción de huevos y pollos generan el 26% de los residuos agroindustriales, siendo los principales la Cama de Crianza (CC) y Gallinaza (GA), alcanzando 81.000 y 3.300 tonST/año, respectivamente (Benzano, 2016). Si bien los residuos sólidos han sido utilizados como fertilizante, han generado la sobrecarga de nutrientes en la cuenca. En este contexto, se plantea la valorización de CC y GA mediante digestión anaerobia (DA) para la producción de biogás y digestato. La estrategia de investigación consiste en evaluar la viabilidad tecnológica, económica y ambiental de la implementación de proyectos centralizados de codigestión anaerobia (CoDA) de estos residuos. En el caso de la GA, se consideraron tres sistemas diferentes de producción de huevos para determinar el efecto de la gestión de residuos en las posibilidades de recuperación. Estos incluyen el sistema free-range (FR), que contempla un confinamiento parcial, el sistema automatizado (AUT), en el que los excrementos se eliminan diariamente de debajo de las jaulas, y el modo convencional (CONV), donde los excrementos se almacenan en los galpones por períodos prolongados. Se utilizó el Potencial Bioquímico de Metano (PBM) para determinar la producción máxima de metano que podría generar un residuo sólido en condiciones óptimas. En este caso, el PBM se determinó individualmente para cada residuo (CC, GA-FR, GA-AUT y GA-CONV), y para dos mezclas CC:GA (de cada sistema de producción). Las mezclas se definieron con diferentes proporciones para evaluar el efecto de cada residuo en el proceso de CoDA. La proporción CC:GA se estableció en función de la relación entre la producción anual de CC y GA en el país en sólidos totales (24:1) y fracciones de esta (12:1 y 1:1). El ensayo de PBM se realizó según la Norma VDI 4630:2016 (VDI, 2016) y Holliger et al. (2016, 2021). Consiste en pruebas en lote bajo condiciones anaerobias, utilizando un inóculo metanogénico aclimatado (Steinmetz et al., 2016). Las pruebas se desarrollaron a 37°C utilizando el equipo AMPTS II (Bioprocess Control) que contiene reactores de mezcla completa, una unidad de lavado de gases y un sistema de medición y registro de CH_4 en línea. Los resultados de PBM mostraron el impacto del sistema de producción de huevos en la producción de metano. El sistema FR genera el mayor PBM (336±14 $NmLCH_4/gVS$), seguido por el sistema AUT (317±40 $NmLCH_4/gVS$), mientras que el sistema CONV produce el residuo con menor potencial (259±17 $NmLCH_4/gVS$). El PBM de todas las mezclas estudiadas fue inferior al resultado obtenido para CC, dada su relación C/N más adecuada. En el caso de las mezclas CC:GA-CONV, se observó que el PBM parece ser superior al de la GA utilizada de forma individual, en contraste con el comportamiento de las mezclas compuestas por GA-FR y GA-AUT. Por otro lado, ningún escenario de codigestión presentó diferencias significativas en el PBM, ya sea considerando los distintos sistemas de producción o las proporciones entre CC y GA (24:1, 12:1 y 1:1). Sin embargo, dado que la generación anual de CC es mucho mayor que la de GA, el potencial máximo de producción de metano se obtendrá en los escenarios con proporciones de 24:1 (CC:GA), si se considera la cantidad de energía generada y los residuos valorizados.

Preparación de nuevos materiales a partir de cáñamo: fibras e hidrogeles

Pilar Vilaró[1,2]; Ana Laura Reyes[3]; Marcia Braga[4], Gabriela Gurau[2,5]; Robin Rogers[2,5];

Guillermo Moyna[6]

[1]Espacio de Ciencia y Tecnología Química, CENUR Noreste, Universidad de la República Tacuarembó, Uruguay
[2] Department of Chemistry & Biochemistry, The University of Alabama, Tuscaloosa, USA
[3]Unidad de Microscopía Electrónica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo,
[4]Instituto Superior de Estudios Forestales, CENUR Noreste, Universidad de la República, Tacuarembó, Uruguay
[5]525 Solutions, Inc., P.O. Box 2206, Tuscaloosa, AL 35403, USA
[6]Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay

pilar.vilaro@cut.edu.uy

Tras la aprobación de nuevas regulaciones sobre *Cannabis sativa* en 2013, la industria del cáñamo en Uruguay experimentó un crecimiento sostenido. No obstante, actualmente se comercializa solamente la flor para uso medicinal, dejando el resto de la planta desaprovechada. Con el objetivo de incrementar el valor agregado de este cultivo y favorecer su sostenibilidad económica, proponemos en este trabajo un enfoque no tradicional para la obtención de productos como hidrogeles y fibras a partir de los residuos de cáñamo, utilizando líquidos iónicos (LIs).

Residuos de biomasa de la empresa Innovaterra (Salto, Uruguay), se trataron con [C_4mim]Cl, [C_2mim][OAc], con tratamiento a pulsos de microondas y en baño de aceite a 80°C, y posterior centrifugación, y por intercambio con agua-acetona para obtener una fracción rica en celulosa (MCR). Se obtiene así un material de partida que se utiliza tal cual como hidrogeles para biorremediación. 50 mg de hidrogel (base seca), fueron colocados en soluciones acuosas de 20 mL que contenían 5 mg/mL de azul violeta (VB), midiendo la concentración residual de CV por absorbancia a 560 nm.

Los hidrogeles obtenidos lograron una reducción del contenido de CV del torno de 1500-2000 mg/mL, que corresponden a una eficiencia de reducción del 86 al 98%. A su vez se realizaron fibras continuas en concentraciones 2-4% un sistema de laboratorio, con estiramiento en baño de agua. Las mejores fibras se lograron por doble estiramiento, y a partir del producto MCR reconstituido al 2%. Las fibras así obtenidas se secaron utilizando el secado al aire, el secado al vacío a 40 °C y el secado con tensión mecánica a 40 °C en un horno similar a los utilizados en hilanderías. Las fibras más finas y más homogéneas son las fibras realizadas por secado con tensión. La calidad de las fibras obtenidas se determinó por SEM y por estudio de la tensión mecánica para evaluar la homogeneidad de las mismas, por tratamiento de imágenes.

En suma, en la presente contribución se logró la revalorización de un desperdicio de biomasa de un material lignocelulósico no tradicional con aplicaciones como nuevas fibras textiles y para uso médico, e hidrogeles con fines de biorremediación.

Oxidación de compuestos volátiles de selenio: impacto en la química atmosférica y en la biodisponibilidad

Anabela Martínez[1]; Luna Cartayrade[2]; Alejandro L. Cardona[1,2]; Sonia Taamalli[2]; Florent Louis[2]; Marc Segovia[1]; Mauricio Vega-Teijido[1]; Oscar N. Ventura[1]

[1]CCBG, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

[2]Univ. Lille, CNRS, UMR 8522, PhysicoChimie des Processus de Combustion et de l'Atmosphère – PC2A, F-59000 Lille, France

anabela@fq.edu.uy

La deficiencia de selenio, un oligoelemento esencial, se ha relacionado con diversas enfermedades como la esclerosis múltiple, la distrofia muscular, las cardiopatías, las alteraciones del sistema inmunitario, el cáncer y los trastornos reproductivos. [1a] Su biodisponibilidad en la dieta humana, al igual que la de su análogo el azufre, depende en gran medida de su contenido en los suelos agrícolas, que, a su vez, está fuertemente influenciado por la deposición atmosférica. [1b] Los compuestos volátiles de Se pueden provenir de fuentes naturales, como la biosfera marina y la actividad volcánica, así como de fuentes antropogénicas, como la combustión del carbón. [1] Se estima que entre 500 y 1000 millones de personas presentan deficiencia de selenio debido a su baja concentración en suelos agrícolas. [1b] Sin embargo, el comportamiento y el destino de las especies de Se en la atmósfera aún no se comprenden completamente. Es fundamental profundizar en el estudio de los ciclos atmosféricos del azufre y el selenio. De esta forma, se podrían evaluar estrategias para mitigar los riesgos de insuficiencias nutricionales de este ultimo elemento. [1] En este trabajo se estudiaron teóricamente las oxidaciones en fase gaseosa del seleniuro de hidrógeno (H_2Se), [2] seleniuro de metilo (CH_3SeH) y seleniuro de dimetilo (CH_3SeCH_3) iniciadas por átomos de cloro (radical altamente reactivo y abundante en la atmósfera), mediante métodos de estructura electrónica. Se determinaron los mecanismos de reacción y la cinética de degradación mediante optimizaciones de puntos estacionarios y estados de transición con DFT (M06-2X y ωB97X-D) y el conjunto de bases aug-cc-pV(T+d)Z. Para hacer una buena estimación de la velocidad de reacción se analizan las etapas con estado de transición y sin barrera, usando el método compuesto SVECV-F12. [3] Los coeficientes de velocidad se calcularon con teoría del estado de transición variacional (VTST) usando el software Polyrate. Para las tres especies se identificaron vías de reacción dominantes y coeficientes de velocidad compatibles con datos experimentales, aportando información valiosa sobre su destino atmosférico y posible impacto ambiental.

Bibliografía:

[1] a) Rayman M. P. et al., 2000, doi: 10.1016/S0140-6736(00)02490-9. b) Gupta H. et al., 2024, doi: 10.9734/ijecc/2024/v14i13855

[2] Segovia M.E. et al., 2025, doi: https://doi.org/10.1021/acs.jpca.4c07002

[3] Ventura O.N. et al., Int. J. Quantum. Chem, 2021, 121(18), (doi: 10.1002/qua.26745)

Desarrollo de una metodología analítica para la determinación de residuos de pesticidas en tilo *in natura* mediante LC-MS/MS

Rossina Figliolo[1,2]; Verónica Cesio[3,4]; Natalia Besil[2]; Horacio Heinzen[3]

[1]Programa de Posgrados de la Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

[2]Grupo de Análisis de Compuestos Traza (GACT), Departamento de Química del Litoral, CenUR Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay.

[3]GACT, Farmacognosia y Productos Naturales, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

[4]PDU Abordaje Holístico al estudio del impacto de pesticidas en alimentos y en el ambiente- CenUR Litoral Norte, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

mariarossinafigliolo@gmail.com

En Uruguay, el tilo se posiciona como una de las plantas medicinales de mayor consumo a nivel nacional [1] debido a sus propiedades ansiolíticas y sedantes suaves. Dado este contexto de consumo masivo, resulta pertinente abordar su inocuidad en relación con la posible presencia de residuos de pesticidas.

El objetivo de este trabajo fue ajustar y validar una metodología específica para determinar residuos de pesticidas en el género Tilia spp., utilizando como método de preparación de muestra QuEChERS AOAC-2007.1. La determinación se realizó mediante LC-MS/MS en modo Monitoreo de Reacciones Múltiples. La validación del método se efectuó siguiendo los lineamientos del documento SANTE/11312/2021 [2].

De los 25 pesticidas seleccionados para su estudio, el 76% cumplieron con los criterios de validación en al menos dos niveles de concentración analizados por quintuplicado. El rango de linealidad evaluado fue de 2 a 100 µg/kg obteniéndose rangos lineales variables entre los analitos dependiendo de su ajuste a los *back calculated concentration* (BCC). Los porcentajes de recuperación estuvieron entre 70-108%. La precisión se evaluó como repetibilidad a cada nivel de concentración evaluado y precisión intermedia obteniéndose desviaciones estándares relativas inferiores a 20%.

Actualmente se encuentra en curso el análisis de muestras reales provenientes de canales comerciales y de producción agroecológica. Se buscará identificar, cuantificar y evaluar, según especificaciones, la presencia de los pesticidas validados, aportando así información relevante sobre la seguridad de esta planta medicinal de alto consumo.

Referencias: [1]-Figliolo, R., et al. (2023). Control de calidad preliminar de hierbas *in natura* comercializadas en Uruguay. Casos de estudio: manzanilla, marcela y tilo. INNOTEC, (26 jul-dic), e643. https://doi.org/10.26461/26.05. [2]-Laboratorio de Referencia de la Unión Europea- EURL (2021). Control de calidad analítico en alimentos y piensos para análisis de residuos de plaguicidas y procedimientos de validación de métodos. SANTE/11312/2021v2.

Valorización, diferenciación y control de autenticidad de la miel de *Eucalyptus* de Uruguay

Lucía Almeida[1]; Sofia Raffaelli[2]; Silvana Alborés[2]; Gloria Dahners[3]; Gonzalo Hernández[4]; Laura Fariña[1]

[1]*Laboratorio de Biotecnología de Aromas, CYTAL, Facultad, UDELAR, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Área de Microbiología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, UDELAR, Montevideo, Uruguay.*

[3]*Departamento de Paleontología, Instituto de Ciencias Biológicas , Facultad de Ciencias, UDELAR, Montevideo, Uruguay.*

[4]*Laboratorio de Resonancia Magnética Nuclear, Facultad de Química, UDELAR, Montevideo, Uruguay.*

lalmeidak@fq.edu.uy

El 90 % de la producción de miel de Uruguay se destina a exportación y aproximadamente el 30 % de esta cantidad pertenece a miel monofloral de *Eucalyptus.* En el país hay más de un millón de hectáreas de plantaciones forestales dominadas por este género, lo que permite obtener una miel característica y pura en cuanto a su calidad y método de producción.

A pesar de sus características distintivas, no hay suficiente información sobre este tipo de miel en Uruguay, por lo que el objetivo de este trabajo es la valorización de la miel de *Eucalyptus* de Uruguay mediante la caracterización integral y búsqueda de propiedades que la distingan de otras mieles.

Se llevó a cabo un estudio con 45 muestras de miel de *Eucalyptus* recolectadas durante tres años consecutivos, que incluyó análisis melisopalinológicos, caracterización fisicoquímica (pH, acidez, conductividad, humedad, color, hidroximetilfurfural, diastasa, cenizas y azúcares), determinación de peróxidos, propiedades nutracéuticas como polifenoles totales y capacidad antioxidante (ABTS y ORAC), y actividad antimicrobiana contra distintas cepas de interés. También se analizó el perfil aromático mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas y se llevó a cabo un análisis preliminar para evaluar la idoneidad de diferentes técnicas de qNMR para identificar y cuantificar azúcares minoritarios.

Los valores obtenidos en los análisis fisicoquímicos cumplieron con las normativas internacionales en todas las muestras. Se detectaron marcadores específicos de la miel de *Eucalyptus* de Uruguay, lo que permite diferenciar estas mieles de otras comerciales. Se identificaron las variables fisicoquímicas que más contribuyen a la actividad biológica de las muestras y se optimizó un método para cuantificar la manosa utilizando qNMR.

La miel de *Eucalyptus* de Uruguay tiene un perfil fisicoquímico, volátil y espectroscópico único que la distingue de otras mieles comerciales. Tiene una marcada actividad antimicrobiana y propiedades nutracéuticas que permiten aumentar su valor agregado.


POSTERS

Posters

Sesión 1 (Miércoles 22/10 – 8:30-11:00)

S1.P01_BQ Josefina Diaz; Belén Islas - *Desarrollo de biocatalizadores en fase sólida por adsorción de lacasa fúngica en soportes silíceos mesoporosos*

S1.P02_BQ Gabriel Anderson; Camila Bueno; Sol Tenca - *Estudio del priming en el sistema Glycine Max - Rachiplusia Nu mediante análisis metabolómico basado en ^{1}H RMN*

S1.P03_BQ Natacha Collins - *Efecto de compuestos bioactivos producidos por Hanseniaspora vineae sobre Saccharomyces cerevisiae: cómo mejorar la complejidad aromática en vinos usando diversas estrategias de inoculación en cultivos mixtos*

S1.P04_BQ Andrea Martínez Pereyra - *De los reactores de laboratorio a la industria: estudio metagenómico de microorganismos acumuladores de polifosfato (PAOs) involucrados en la remoción biológica de fósforo*

S1.P05_BQ Andrés López-Radcenco - *Evaluación de la flexibilidad metabólica en vacas lecheras frente a cambios en el manejo nutricional*

S1.P06_BQ Bruna Cizmic - *Microbioma de suelos y raíces de raigrás bajo aplicación de lodos de Plantas de Tratamiento de Aguas Residuales como mejoradores de suelo*

S1.P07_BQ Cintya Perdomo - *Caracterización preliminar del veneno de la "tarántula de la carretera" Eupalaestrus weijenberghi, y de sus propiedades bioactivas*

S1.P08_BQ Elisa Dalmas - *Actividad estrogénica en productos de uso cotidiano en la Base Científica Antártica Artigas (Isla Rey Jorge/25 de Mayo) como potencial fuente de liberación de disruptores endocrinos al ambiente*

S1.P09_BQ Natalia Gutierrez Dalfolo - *Actividad metanogénica metilotrófica en sedimentos de represas del Río Negro*

S1.P10_BQ Agostina Galliazzi - *Identificación directa de microorganismos a partir de hemocultivos utilizando espectrometría de masas MALDI-TOF*

S1.P11_BQ Cecilia Ortiz - *Reprogramación celular para la síntesis eficiente y sustentable de (S)-equol*

S1.P12_IA Sabrina Maccio - *Electrodos con nanoflores de oro para determinación de Bisfenol A*

S1.P13_BQ Magdalena Ripoll - *Expresión heteróloga de UPRT en E. coli y evaluación de la espectroscopía UV/Vis para el monitoreo de reacciones*

S1.P14_IA Guillermo Roth - *Implementación de una metodología de análisis en flujo por inyección secuencial para la determinación automatizada de paracetamol*

S1.P15_IA Valentina Lembo - *Optimización de la marcación con ^{99m}Tc de un complejo derivado de Erlotinib para imagenología en cáncer de mama triple negativo*

S1.P16_IA Romina Rossi - *Evaluación biológica in vitro de un complejo tricarbonílico de ^{99m}Tcderivado de Erlotinib*

S1.P17_BQ Victoria Martínez - *Análisis computacional de imágenes de lámina completa de secciones histológicas de trombos de accidente cerebro vascular isquémico*

S1.P18_IA Juan Diego Llona - *Estudio preliminar de la exposición a plaguicidas en el cinturón hortifrutícola de Salto*

S1.P19_IA Eliana Daleve - *Análisis de parámetros químicos del suelo asociados a usos del territorio en Salto, Uruguay*

S1.P20_IA Agustina Balatti - *Evaluación de estrategias químicas para el control de Pyrenophora teres f. teres en cebada: impacto en rendimiento y residuos de fungicidas*

S1.P21_IA Florencia Poggi - *Desarrollo y evaluación de un potencial radiofármaco de 99mTc derivado de la laminina 111 para diagnóstico de cáncer de mama triple negativo*

S1.P22_IA Florencia Estevez - *Elucidación estructural de dos complejos de ^{99m}Tc derivados de la linagliptina para imagenología molecular de la proteína activadora de los fibroblastos*

S1.P23_IA Belén Alvarez - *Diseño y caracterización estructural de complejos de Ga(III) con derivados de fenantrolina y ácido 1,1-ciclobutanodicarboxílico*

S1.P24_IA Ignacio Pires - *Degradación de colorantes contaminantes usando polímeros impresos con complejos de Fe(III)*

S1.P25_IA Ignacio Guidobono - *Complejos de Fe(III) con (tio)semicarbazonas como catalizadores de la degradación oxidativa de colorantes contaminantes*

S1.P26_IA Diego Aldao - *Materiales de emisión dual basados en carbon dots encapsulados en metal-organic frameworks*

S1.P27_QO Anabel Bianchi; Paulina Rodriguez - *Síntesis y evaluación de benzamidas y tiazolidinas como potenciales nematicidas.*

S1.P28_FQ Pablo D. Dans - *Modelado y simulaciones de ácidos nucleicos modificados*

S1.P30_FQ Santiago Veiga - *Fabricación de soportes cerámicos estructurados para catálisis utilizando impresión 3D de resinas fotocurables*

S1.P31_QO Mariana Seveso - *Comparación y optimización de parámetros en sistemas de colecta de compuestos orgánicos volátiles en muestras de frutales*

S1.P32_QO Magdalena Nieves - *Desarrollo de metodología analítica para detección de antihelmínticos y sus metabolitos en matriz parasitaria de Haemonchus contortus*

S1.P33_QO Estefany Hespindola Soares - *Liposomas enriquecidos con xilano y chalcona: un estudio de interacciones moleculares para la fotoprotección*

S1.P34_QO Ana Paula Bertoni - *Diversidad química regional del aceite esencial de Eupatorium buniifolium en Uruguay: una experiencia de ciencia colaborativa con escuelas rurales*

S1.P35_QO Gastón Martínez - *Evaluación de la absorción de Zinc en hojas de Carya illinoinensis utilizando microscopía óptica y microscopía confocal*

S1.P36_QO Ana Larocca - *Desarrollo de dispensadores de liberación controlada de semioquímicos y su aplicación en el manejo integrado de Cyrtogenius luteus*

S1.P37_QO Victoria Barros - *Influencia del medio de cultivo y la temperatura en la motilidad de larvas L4 de Haemonchus contortus: avances hacia un sistema de screening automatizado*

S1.P38_QO Josefina Menéndez - *Síntesis de heterociclos y aminoácidos claves para la obtención de péptidos con permeabilidad celular*

S1.P39_QO Ignacio González Ayup - *Evaluación de compuestos híbridos carborano–tetrazina con potencial quimioterapéutico en carcinoma anaplásico de tiroides*

S1.P40_QO Tiago Tassano - *Evaluación in vitro del efecto antiinflamatorio de furilnitroalquenos derivados de la biomasa en astrocitos reactivos asociados a la Enfermedad de Alzheimer*

S1.P41_QO Clara Bianchi - *Moléculas que modulan el cerebro: buscando nuevos inhibidores de la D-aminoácido oxidasa*

S1.P42_QO Micaela Escobal - *Valorización de carnes uruguayas: péptidos menores a 5KDa*

S1.P43_QO Lucía Collela - *Desarrollo de nitroalquenos bioactivos considerando principios de química verde*

S1.P44_QO Julieta Wagner - *Desarrollo de una metodología para la determinación y cuantificación de aminoácidos en diversas matrices por ^{19}F-RMN.*

S1.P45_QO Camila Bertinat; Nahuel Cabrera; Florencia Mahy - *Evaluación de actividad antioxidante de extractos de diferentes variedades de Cannabis sativa* L.

S1.P46_QO Joice C. de O. Andrade - *Synthesis of 4-quinolone-3-hydroxamic acids derivatives with potential anti-Alzheimer activity*

S1.P47_QO Josefina Pereyra - *Desarrollo de Red-B, una nueva sonda de peroxinitrito para el estudio de las respuestas oxidativas dependientes del oxígeno*

S1.P48_QO Lucía Galeazzi - *Aproximación a la síntesis de éteres cíclicos basados en productos naturales*

S1.P49_QO Inés Telles - *Estudio preliminar de la actividad acaricida de una quimioteca sobre diferentes estadios de Rhipicephalus microplus*

S1.P50_QO Victoria Scorza - *Optimización de la síntesis de ciclotetrapéptidos análogos a productos naturales con acción herbicida e inhibidores de cianobacterias.*

S1.P51_QO Isabella Jauregui - *Desarrollo de una síntesis estereoselectiva, concisa y eficiente, para la preparación de (-)-MK7607 y 1-epi-(-)-MK7607*

S1.P52_QO Pablo Vignolo - *Carboranos como bioisósteros no clásicos del grupo fenilo en inhibidores del receptor del factor de crecimiento epidérmico (EGFR).*

S1.P53_QO Florencia Rocca - *Inhibidores de Mpro del SARS-CoV-2: estudio de selenosemicarbazonas y tiosemicarbazonas*

S1.P54_QO Victoria Valiente - *Búsqueda de moléculas con potencial de modular vías neuroinflamatorias implicadas en la Enfermedad de Alzheimer*

Desarrollo de biocatalizadores en fase sólida por adsorción de lacasa fúngica en soportes silíceos mesoporosos

Josefina Díaz[1]; María Belén Islas[1]; Elisa Leoncini[1]; Fabrizio E. Viale[2]; Francisco E. da Silva[3]; Francisco G. Hayala Silveira Pinto[3]; Mariele I. S. de Mello[3]; Sibele B. C. Pergher[3]; Gabriel O. Ferrero[2]; Karen Ovsejevi[1]; Larissa Gioia[1]

[1]Area Bioquímica, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

[2]Centro de Investigación y Tecnología Química, Facultad Regional de Córdoba, Universidad Tecnológica Nacional, CONICET, Córdoba, Argentina

[3]LABPEMOL-Laboratorio de Peneiras Moleculares, Instituto de Química, Universidad Federal de Rio Grande del Norte, Brasil

diazbarreto21@gmail.com

Las enzimas son catalizadores eficientes y amigables con el medio ambiente, extensamente utilizados en procesos biotecnológicos. Entre las enzimas con mayor campo de aplicaciones se destacan las lacasas, dado que su baja especificidad les permite actuar sobre un amplio rango de sustratos, pudiendo incluso oxidar compuestos complejos empleando mediadores en la transferencia electrónica. Sin embargo, su aplicación a nivel industrial está limitada por su inestabilidad en solución y la imposibilidad de ser reutilizada. La inmovilización es la estrategia más empleada para superar estas desventajas y por ello, las lacasas han sido inmovilizadas por muy variados métodos y sobre diferentes matrices [1]. Dentro de los métodos de inmovilización más sencillos se encuentra el de adsorción, donde el biocatalizador interacciona en forma no covalente con el soporte.
Por otra parte, por sus propiedades fisicoquímicas, los materiales nanoporosos han sido foco de estudios para aplicaciones tecnológicas y catalíticas. Dentro de ellos, las zeolitas son los más conocidos, sin embargo, al ser microporosas presentan una limitación cuando moléculas grandes están involucradas en la reacción [2]. Esto, dio origen a la síntesis de nuevos materiales mesoporosos en base a silicio, entre ellos el SBA-15 (Santa Barbara Amorphous) [3]. Dado el potencial biotecnológico de un biocatalizador insoluble en base a lacasa, en este trabajo se reporta la inmovilización y caracterización cinética del proceso de adsorción de lacasa de *Dichosterum sordulentum* en SBA-15 sin modificar, modificado con cobre incorporado en su superficie (metal que la lacasa utiliza como cofactor) y funcionalizado con grupos tiol (posibilitando un cambio en el microambiente de la enzima).

1. Daronch, N. A., Kelbert, M., Pereira, C. S., de Araújo, P. H. H., & de Oliveira, D. (2020). Chemical Engineering Journal, 397(May), 125506.
2. Taguchi, A., & Schüth, F. (2005). Microporous and Mesoporous Materials, 77(1), 1–45.
3. Zhao, D., Huo, Q., Feng, J., Chmelka, B. F., & Stucky, G. D. (1998). Journal of the American Chemical Society, 120(24), 6024–6036. https://doi.org/10.1021/ja974025i

Estudio del priming en el sistema *Glycine Max* - *Rachiplusia Nu* mediante análisis metabolómico basado en ^{1}H RMN

Gabriel Anderson[1]; Camila Bueno[1]; Sol Tenca[1]; Silvina Abbate[2]; Ximena Cibils[3]; Andrés Lopez-Radzenco[1]; Florencia Parpal[1]; Guillermo Moyna[1]

[1]Laboratorio de Química Orgánica, Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, UdelaR, Paysandú, Uruguay

[2]Departamento de Protección Vegetal, Facultad de Agronomía, UdelaR, Paysandú, Uruguay

[3]Instituto de Investigación Agropecuarias La Estanzuela, El Semillero, Colonia, Uruguay

gabimiemp@gmail.com; camilabueno1910@gmail.com; solyamilatencacavani@gmail.com

La soja (*Glycine max*) es el cultivo de verano más extendido en Uruguay. Una de sus principales plagas es la lagarta medidora (*Rachiplusia nu*), cuyas larvas causan una defoliación significativa. Las estrategias tradicionales de manejo estas y otras plusias han dependido en gran medida del uso de pesticidas, los cuales generan diversos problemas a nivel ambiental y agronómico. En consecuencia, los enfoques alternativos de control de plagas se han convertido en una prioridad de investigación. El priming es un mecanismo de defensa que coloca a las plantas en un estado de alerta tras la exposición a elicitores ambientales, como volátiles inducidos por herbívoros o señales sistémicas de daños previos.[1] Este estado fisiológico permite respuestas más rápidas y robustas a ataques posteriores, y puede implementarse en programas de manejo integrado de plagas (MIP). Se ha propuesto que la herbivoría moderada podría actuar como un estímulo natural de priming sin afectar seriamente el rendimiento de los cultivos.[2] En este estudio, utilizamos metabolómica basada en RMN para caracterizar los cambios en el metaboloma de hojas de *G. max* bajo diferentes niveles de infestación, considerando tanto condiciones de exposición previa como sin exposición. En paralelo se estudió el metaboloma de la hemolinfa de *R. nu* implicada en los experimentos de defoliación de soja. Los análisis multivariados mostraron perfiles metabólicos distintivos asociados con la intensidad de la infestación y el priming (infestación previa). En soja, metabolitos como el 2-hidroxiisobutirato y el carbazúcar pinitol se correlacionaron con la densidad de infestación, mientras que la colina, el GABA y el pinitol se asociaron con la exposición previa al insecto. En la hemolinfa de larvas también se observaron cambios metabólicos significativos en relación a las variables estudiadas. Destacan variaciones en los niveles de putrescina, trehalosa, glicina, e histidinas relacionadas con la densidad de infestación, mientras que los niveles de fosfocolina y glicina fueron influenciados por la exposición previa. Estos resultados contribuyen a la identificación de vías metabólicas involucradas en el priming inducido por herbivoría en el sistema *G. max* - *R. nu*. Combinado con estudios sobre defoliación mecánica y tratamientos con fitohormonas, nuestros hallazgos son herramientas promisorias en el desarrollo de estrategias de MIP novedosas y sostenibles.

1. Frost, C. J.; Mescher, M. C.; Carlson, J. E.; De Moraes, C. M. *Plant Physiol.* **2008**, *146*, 818-824.
2. Kim, J.; Felton, G. W. *Insect Sci.* **2013**, *20*, 273-285.

Efecto de compuestos bioactivos producidos por *Hanseniaspora vineae* sobre *Saccharomyces cerevisiae*: cómo mejorar la complejidad aromática en vinos usando diversas estrategias de inoculación en cultivos mixtos.

Natacha Collins[1]; Eduardo Boido[1]; Eduardo Dellacassa[2]; Francisco Carrau[1,3]; María José Valera[1,3,4]

[1] *Área de Enología y Biotecnología de las Fermentaciones, Departamento de Ciencia y Tecnología de los Alimentos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2] *Laboratorio de Biotecnología de Aromas, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[3] *Centro de Investigaciones Biomédicas (CEINBIO), Facultad de Medicina, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[4] *Programa en Alimentos y Salud Humana (PAyS), Departamento de Bioquímica, Facultad de Medicina, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

Collins.s.natacha@gmail.com

El uso predominante de *Saccharomyces cerevisiae* en vinificación ha generado perfiles aromáticos similares, limitando la diversidad sensorial. Para contrarrestarlo, se utilizan cultivos mixtos con levaduras no-*Saccharomyces*, como *Hanseniaspora vineae*, que aporta compuestos volátiles distintivos, especialmente en variedades neutras como *Vitis vinifera* cv. Ugni blanc (Olivera et al. 2024; Carrau et al. 2023). Algunos de estos compuestos poseen potencial bioactivo, pudiendo afectar el crecimiento de *S. cerevisiae* (Avbelj et al. 2016).

Se fermentó un símil mosto con *H. vineae* M12/196F y se identificaron compuestos volátiles mediante GC-MS a 24, 48 y 72 horas. Se seleccionaron moléculas con posible efecto bioactivo y se evaluaron sobre siete cepas de *H. vineae* y siete de *S. cerevisiae* en lector de placas. Las concentraciones de acetato de 2-feniletilo y el triptofol producidas a las 24 horas de fermentación estimularon el crecimiento de *S. cerevisiae*, mientras que la concentración de ácido hexanoico producida a las 48 horas lo inhibió. En fermentaciones con *S. cerevisiae* TS28 y adición exógena de estos compuestos, el ácido hexanoico aumentó la velocidad fermentativa pese a su efecto inhibitorio en cultivo aislado en placas.

Fermentaciones mixtas con co-inoculación e inoculación secuencial mostraron que inocular *S. cerevisiae* a las 24 horas de iniciada la fermentación con *H. vineae* optimizó la producción de etanol y el perfil aromático, generando aromas florales, frutales y especiados característicos de vinos blancos de calidad.

Avbelj, Martina, Jure Zupan, y Peter Raspor. 2016. *Applied Microbiology and Biotechnology* 100 (18): 7841-52. https://doi.org/10.1007/s00253-016-7758-3.

Carrau, Francisco, Eduardo Dellacassa, Eduardo Boido, Karina Medina, Maria Jose Valera, Laura Fariña, Gabriel Perez, Valentina Martin, Fernando Alvarez-Valin, y Lucia Balestrazzi. 2023. *FEMS Yeast Research* 23 (enero):foad010. https://doi.org/10.1093/femsyr/foad010.

Olivera, Valentina, María José Valera, Eduardo Boido, Remi Schneider, Eduardo Dellacassa, y Francisco Carrau. 2024.. *American Journal of Enology and Viticulture* 75 (2): 0750025. https://doi.org/10.5344/ajev.2024.24025.

De los reactores de laboratorio a la industria: estudio metagenómico de microorganismos acumuladores de polifosfato (PAOs) involucrados en la remoción biológica de fósforo

Andrea Martínez Pereyra[1]; Florencia Caro[2]; Axel Ríos[2]; Agustina Yelpo[2]; Nahuel Maidana[2]; Claudia Santiviago[2]; Ángela Cabezas[3]; Elena Castelló[2]; Claudia Etchebehere[1]

[1]Laboratorio de Ecología Microbiana, Departamento de Bioquímica y Genómica Microbianas, Instituto de Investigaciones Biológicas Clemente Estable, Montevideo, Uruguay.
[2]Biotecnología de Procesos para el Ambiente, Instituto de Ingeniería Química, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.
[3]Laboratorio de Microbiología Ambiental y Biotecnología, Instituto Tecnológico Regional Centro Sur, Universidad Tecnológica, Durazno, Uruguay.

amartinez@iibce.edu.uy

El fósforo (P) es un elemento esencial para la vida, pero su exceso en cuerpos de agua puede causar eutrofización. Por ello, resulta cada vez más relevante avanzar en estrategias sostenibles para su remoción y recuperación a partir de las aguas residuales. En Uruguay, país con fuerte base agroindustrial y uso intensivo de fertilizantes fosfatados, la remoción biológica de fósforo mediante la tecnología EBPR (*Enhanced Biological Phosphorus Removal*) representa una solución prometedora. En este proceso, microorganismos acumuladores de polifosfato (PAOs) capturan y almacenan P intracelularmente. Si bien *Ca.* Accumulibacter es el PAO mejor caracterizado, otros géneros han sido propuestos como posibles PAOs, aunque su rol funcional *in situ* permanece incierto.

Este trabajo evaluó la dinámica microbiana en reactores SBR (*Sequencing Batch Reactor*) a escala de laboratorio, operados bajo distintas estrategias, utilizando como inóculos lodos activados de industrias locales (maltería, avícola y alimentaria). El mejor desempeño se obtuvo utilizando un inóculo de maltería y una alimentación de acetato y propionato, logrando una remoción biológica completa y estable. Bajo esta estrategia, *Ca.* Accumulibacter alcanzó una abundancia relativa del 3,8 % (secuenciación del gen 16S rRNA) a los 42 días de operación. También se detectaron otros géneros propuestos como PAOs (*Tetrasphaera*, *Thiotrix*) aunque su potencial metabólico y relevancia en la remoción de P aún no han sido confirmados.

Mediante un enfoque metagenómico, se logró reconstruir MAGs (*Metagenome-Assembled Genomes*) de alta calidad, clasificados como géneros de PAOs confirmados o propuestos. Estos MAGs presentaron genes clave para la acumulación de polifosfato y la síntesis e hidrólisis de polihidroxialcanoatos (PHA), así como genes asociados a rutas metabólicas de fermentación y desnitrificación.

Actualmente, se monitorea un reactor a escala real en una industria de maltería que ha implementado la remoción biológica de P, lo cual permitirá validar estos hallazgos en condiciones operativas reales.

Evaluación de la flexibilidad metabólica en vacas lecheras frente a cambios en el manejo nutricional

Andrés López-Radcenco[1]; Alberto Casal[2]; Guillermo Moyna[1]

[1]*Laboratorio de Química Orgánica, Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, UdelaR, Paysandú, Uruguay*

[2]*Departamento de Producción Animal y Pasturas, Facultad de Agronomía, UdelaR, Paysandú, Uruguay*

alopez@fq.edu.uy

Las dietas basadas en ración total mezclada (TMR por su sigla en inglés) mejoran el balance energético de las vacas lecheras, aumentando la producción de leche, la condición corporal, y la performance reproductiva. Por otro lado, las dietas a base de pasturas son más rentables, aportan otros nutrientes, y promueven el bienestar animal y la sostenibilidad ambiental. La transición de una dieta 100% TMR a una basada en pasturas más suplementos implica una rápida adaptación metabólica por cambios en la ingesta de nutrientes. La metabolómica basada en RMN permite evaluar estas adaptaciones,[1,2] y en este estudio se utilizó para analizar cambios en el metaboloma, el equilibrio energético, y la movilización de nutrientes. Se estudiaron perfiles metabólicos de suero, orina, y otros biofluidos de 12 vacas multíparas en lactancia media alimentadas con 100% TMR desde el parto hasta los 180 días de lactancia, y luego de pasar una dieta 90% pasturas. Las muestras se tomaron luego del ordeñe de la mañana, durante la fase 100% TMR y a los dos y diez días de la salida a pastoreo. El análisis de componentes principales (PCA) de los perfiles de ^{1}H RMN mostró separación entre ambos sistemas. Aunque la mayor parte del nitrógeno urinario se encuentra como urea, el análisis discriminante de proyecciones sobre estructuras latentes ortogonales (OPLS-DA) detectó variaciones en compuestos nitrogenados minoritarios como hipurato, creatina, *N*-metilaminas, y trimetilamina-N-óxido (TMAO). También se observaron alteraciones en los niveles de colina, betaína, dimetilglicina, y metilaminas en suero. Además, se identificaron cambios en metabolitos energéticos como lactato, β-hidroxibutirato, alanina, acetato, e isobutirato. Estos hallazgos subrayan la estrecha relación entre el metabolismo del nitrógeno y la dieta, particularmente en dietas ricas en pasturas con altas concentraciones de proteína.[3,4] Asimismo, destacan la utilidad del análisis metabolómico como herramienta para evaluar y desarrollar sistemas de alimentación y manejo rentables y sostenibles que garantizan la salud y bienestar animal.

1. López-Radcenco, A.; Adrien, L.; Ruprechter, G.; de Torres, E.; Meikle, A.; Moyna, G. *Dairy* **2021**, *2*, 356-366.
2. Eom, J. S.; Kim, E. T.; Kim, H. S.; Choi, Y. Y.; Lee, S. J.; Lee, S. S.; Kim, S. H.; Lee, S. S. *Animal Biosci*. **2021**, *34*, 1930-1939.
3. Ferreira, M.; Delagarde, R.; Edouard, N. *Animal* **2023**, *17*, 100976.
4. Ruiz, R.; Tedeschi, L. O.; Marini, J. C.; Fox, D. G.; Pell, A. N.; Jarvis, G.; Russell, J. B. *J. Dairy Sci*. **2002**, *85*, 2986-2999.

Microbioma de suelos y raíces de raigrás bajo aplicación de lodos de Plantas de Tratamiento de Aguas Residuales como mejoradores de suelo

Bruna Cizmic[1]; Cecilia Ghiazza[1]; Lautaro Lagarde[1]; Gimena Arrarte[2]; LucíaFerrando[1]

[1] *Laboratorio de Ecología Microbiana Medioambiental, Departamento de Biociencias, Facultad de Química (UdelaR), Montevideo, Uruguay.*

[2] *Departamento de Suelos y Aguas, Facultad de Agronomía (UdelaR), Montevideo, Uruguay.*

cizmicbruna@gmail.com

La aplicación de lodos generados en Plantas de Tratamiento de Aguas Residuales (PTAR) en suelos agrícolas es una estrategia de economía circular que busca valorizar ese pasivo ambiental, reduciendo la aplicación de fertilizantes químicos y mejorando la fertilidad y estructura del suelo.

Este trabajo abordó el impacto de la aplicación de lodos PTAR como enmiendas orgánicas en las comunidades microbianas de suelo y asociadas a raíces de plantas mediante técnicas dependientes e independientes de cultivo. Se muestrearon 5 suelos de Florida (predio particular habilitado para la aplicación de lodos) con diferentes historias de aplicación (frecuencia, número y concentración de lodo aplicado) y un testigo sin manejo agrícola ni enmienda. La caracterización fisicoquímica de suelos y análisis PCA mostraron diferencias entre el testigo y los suelos con diferente aplicación de lodos que responden principalmente al contenido de P, K y NH_4^+. El contenido de fósforo, parámetro limitante para poder aplicar lodos, fue alto (~30 mg/kg) y similar en la mayoría de los tratamientos, excepto para suelo con dos aplicaciones de lodo (61,2 mg/kg) y el testigo (4,5 mg/kg). La abundancia de heterótrofos en suelo, del orden de 10^7 heterótrofos g peso seco^{-1}, no presentó diferencias entre tratamientos. La abundancia de indicadores de contaminación fecal (Coliformes fecales) no fue significativa y no se detectó *Salmonella spp.* en 25 g de suelo.

A partir de los suelos muestreados se estableció un ensayo de crecimiento de plantas de raigrás en invernáculo durante 3 meses: diseño DCA, 6 tratamientos (6 suelos + testigo comercial fertilizado), tres réplicas. Las plantas crecidas en suelos con aplicación reciente (6 meses) y con aplicación doble (49 meses) mostraron mayores rendimientos que un suelo con manejo agrícola sin aplicación, el testigo comercial fertilizado y testigo. Desde las raíces de raigrás desinfectadas superficialmente, se evaluó la abundancia de heterótrofos y fijadores de nitrógeno (medio RMR, confirmación ensayo ARA) endófitos, encontrándose en torno a 10^4 y 10^1 ufc (g peso seco)$^{-1}$, respectivamente. La abundancia de coliformes fecales asociados a raíces fue ≤10^2 g peso seco^{-1} y no se detectó *Salmonella spp.* en 1g.

La secuenciación masiva de amplicones (gen 16S rARN, región V4, Illumina) realizada a partir de ADN extraído mostró diferencias significativas en el microbioma de los suelos con diferente aplicación de lodos (NMDS y PERMANOVA). De forma similar, el análisis del microbioma endófito de raíces de raigrás obtenido del ensayo en invernáculo mostró diferencias entre las comunidades endófitas de raíces de raigrás de los distintos tratamientos, aunque menos marcadas que para los suelos. Además, se revelaron diferencias en los perfiles funcionales del microbioma edáfico y endófito presente en los diferentes tratamientos de aplicación de lodos (FAPROTAX y PICRUSt2).

Caracterización preliminar del veneno de la "tarántula de la carretera" *Eupalaestrus weijenberghi*, y de sus propiedades bioactivas

Cintya Perdomo[1]; Cecilia Pérez[2]; Gisella García[5]; Cristina Olivaro[3]; Pilar Vilaró[3];

Fernando Pérez-Miles[4]; Guzmán Álvarez[1]; Jorge Gil[5]; Carolina Fontana[2]

[1] CENUR Litoral Norte – UdelaR, Departamento de Ciencias Biológicas, Laboratorio de Moléculas Bioactivas, Paysandú, Uruguay
[2] CENUR Litoral Norte – UdelaR, Departamento de Química del Litoral, Laboratorio de Química Orgánica, Paysandú, Uruguay
[3] CENUR Noreste – UdelaR, Espacio Ciencia y Tecnología Química, Tacuarembó, Uruguay
[4] Facultad de Ciencias –Sección Entomología, Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay
[5] CENUR Litoral Norte – UdelaR. Facultad de Veterinaria. Laboratorio de Reproducción Animal "Dr. Alfredo Ferraris", Producción y Reproducción de Rumiantes, Departamento de Ciencias Biológicas, Paysandú, Uruguay.

cuquis266@gmail.com

Eupalaestrus weijenberghi, es una especie de tarántula común en pastizales de Uruguay, cuyos machos se desplazan activamente en busca de hembras en la temporada reproductora (febrero a mayo), por lo que es común encontrarlas en las carreteras. Su veneno constituye una fuente poco explorada de compuestos con potencial farmacológico y biotecnológico. En este trabajo se presentan los primeros avances experimentales orientados a su caracterización química y evaluación bioactiva. La extracción del veneno se realizó mediante estimulación eléctrica, con una tasa de supervivencia de los ejemplares del 100 %. El perfil proteico fue evaluado mediante SDS-PAGE, evidenciando la presencia de estructuras proteicas de entre 10 y 60 kDa. El perfil de metabolitos de bajo peso molecular fue caracterizado directamente a partir del extracto crudo liofilizado, empleando espectroscopía de RMN. Se observó actividad hemoaglutinante del extracto crudo sobre eritrocitos de cordero, lo que sugiere la presencia de lectinas. El fraccionamiento del veneno se llevó a cabo mediante cromatografía de exclusión por tamaño, y las fracciones correspondientes a los compuestos de bajo peso molecular se analizaron por espectrometría de masas en tándem (MS^2). Tanto las fracciones obtenidas como el extracto crudo se evaluaron en relación a su actividad antimicrobiana, su capacidad para inhibir el crecimiento de *Trypanosoma cruzi* y su citotoxicidad sobre espermatozoides de rumiantes. Estos estudios permitirán aportar evidencia sobre el potencial bioactivo del veneno de *E.weijenberghi.*

Actividad estrogénica en productos de uso cotidiano en la Base Científica Antártica Artigas (Isla Rey Jorge/25 de Mayo) como potencial fuente de liberación de disruptores endocrinos al ambiente.

Elisa Dalmas[1]; Germán Azcune[2]; Gissell Lacerot[1]; Javier García-Alonso[3,4]

[1] *Departamento Interdisciplinario de Sistemas Costeros y Marinos. Centro Universitario Regional del Este. Universidad de la República, Maldonado, Uruguay.*

[2] *Departamento de Desarrollo Tecnológico. Centro Universitario Regional del Este. Universidad de la República, Rocha, Uruguay.*

[3] *Departamento de Ecología y Gestión Ambiental. Centro Universitario Regional del Este. Universidad de la República, Maldonado, Uruguay.*

[4] *Instituto de Ciencias Oceánicas, Universidad de la República, Uruguay.*

elisadalmasbustos@gmail.com

Los contaminantes emergentes con actividad estrogénica presentes en productos de cuidado personal y limpieza representan una preocupación creciente por sus efectos sobre organismos acuáticos y su persistencia en el ambiente (Marlatt et al, 2022). Estos compuestos generan alteraciones reproductivas sobre todo en animales acuáticos incluso a concentraciones muy bajas. En este trabajo se analiza la actividad estrogénica de productos utilizados en la Base Científica Antártica Artigas, situada en la Península Fildes (Isla Rey Jorge), a partir del bioensayo YES (Yeast Estrogen Screen). Es una herramienta *in vitro* que emplea levaduras modificadas genéticamente con el receptor estrogénico humano (hERα) y un gen reportero lac-Z, como alternativa al empleo de vertebrados. Ante la presencia de compuestos estrogénicos, las levaduras expresan β-galactosidasa, cuya actividad se detecta colorimétricamente. Se analizaron 20 productos de limpieza y cuidado personal empleados durante la Campaña de Verano Antártica 2023/24. Se utilizó una curva patrón de 17β-estradiol (E2) como control positivo y se estimaron la concentración efectiva 50% (EC_{50}) y la concentración equivalente de estradiol (EEQ). Se definió un límite de detección, y se consideraron estrogénicos los productos cuyas EEQ superaron el umbral (Boqué, 2004). Ocho productos (40%) presentaron actividad estrogénica detectable. Aquellos con mayor grado de estrogenicidad incluyeron jabones, artículos de limpieza y shampoos. Existe una potencial liberación al ambiente de disruptores endocrinos por los efluentes de la Base, y una directa exposición de las personas que los utilizan. Se está analizando la estrogenicidad en sedimentos de los cuerpos de agua receptores para establecer si existe un impacto en el ambiente. Estos resultados ponen de manifiesto el empleo de una gran cantidad de productos estrogénicos que potencialmente se liberan al ambiente antártico, por lo que es necesario regular el uso de estrogénicos y promover un enfoque preventivo en la gestión ambiental.

Referencias:
Marlatt, V.L. et al., Environ. Res. 2022, 208, 112584.
Boqué, R., Quim. Anal. 2004, 23(1), 56–65..

Actividad metanogénica metilotrófica en sedimentos de represas del Río Negro

Natalia Gutierrez Dalfolo; Luciana Pereira Mora

Laboratorio de Ecología Microbiana y Microbiología Ambiental, DEPBIO, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

ngutierrez@fcien.edu.uy

El metano (CH_4) es un potente gas de efecto invernadero y el segundo con mayor potencial de calentamiento global después del dióxido de carbono (CO_2). El 65% de las emisiones de metano provienen de fuentes antropogénicas, que incluyen los biocombustibles y combustibles fósiles, la agricultura y aguas dulces continentales entre otras. Dentro de estas últimas se encuentran las represas que producen aproximadamente un 2% del metano total.
El metano se produce en los sedimentos anóxicos, durante la degradación anaerobia de la materia orgánica por archaeas metanogénicas. Estos microorganismos son anaerobios y cumplen un importante rol en el ciclo del carbono, mineralizando compuestos orgánicos producidos por microorganismos fermentadores. Existen diferentes vías para la producción de metano por parte de estos microorganismos, la acetoclástica, la hidrogenotrófica y la metilotrófica, que utilizan como sustrato acetato, H_2 + CO_2, metanol o metilamina (dependientes o no de H_2). La vía metilotrófica ha cobrado mayor relevancia últimamente ya que se ha detectado su presencia en sedimentos de lagos y de océanos, pero pocos de los microorganismos que la realizan han podido ser aislados. A pesar de ser un ambiente poco estudiado en cuanto sus emisiones de metano, se ha encontrado que existe producción microbiana de metano en los sedimentos de las represas hidroeléctricas y que esta es dependiente del uso de la tierra en la cuenca.

En este trabajo estudiamos la actividad metilotrófica de las archaeas metanogénicas presentes en los sedimentos de las represas hidroeléctricas de Palmar y Rincón del Bonete, de los cuales se extrajeron muestras en el mes de marzo. A partir de los sedimentos se realizaron ensayos de actividad metanogénica potencial en microcosmos sin suplementar y suplementado con los sustratos metanogénicos acetato, H_2 y CO_2, metanol, H_2 y metanol, metilamina, y H_2 y metilamina. Se determinó el metano acumulado en los viales mediante cromatografía gaseosa con detector de ionización de llama hasta que se comprobó un 90% de conversión de los sustratos a metano.

Se comprobó que los sedimentos de ambas represas tienen la capacidad de producir metano a partir de la vía metilotrófica, y que la velocidad de producción fue mayor en Palmar que en Rincón del Bonete. Además, se observaron diferencias al incubar con los diferentes sustratos metilados, ya que en Palmar es más rápida la producción de metano a partir de metanol que de metilamina y en Rincón del Bonete a la inversa.

Identificación directa de microorganismos a partir de hemocultivos utilizando espectrometría de masas MALDI-TOF

Agostina Galliazzi[1,2]; Enrique Savio[1]; Romina Medeiros[2]

[1]Laboratorio del Hospital Regional de Salto, Salto, Uruguay
[2]Departamento BIOCLIN, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

agostina.galliazzi@gmail.com

Introducción. La microbiología clínica requiere métodos diagnósticos confiables, rápidos y económicamente rentables para la identificación de patógenos, con el objetivo de optimizar el tratamiento y reducir el uso empírico de antibióticos de amplio espectro [1]. El hemocultivo constituye el método de referencia para el diagnóstico de infecciones del torrente sanguíneo, sin embargo, los métodos fenotípicos tradicionales (coloración de Gram, cultivo en medios selectivos y pruebas bioquímicas) pueden demorar hasta 48 horas en brindar un resultado definitivo. En este contexto, la tecnología MALDI-TOF MS (Matrix-Assisted Laser Desorption Ionization–Time of Flight Mass Spectrometry) ha cobrado relevancia en los laboratorios de microbiología por su capacidad para identificar de forma rápida y precisa bacterias, micobacterias, hongos y levaduras mediante el análisis de perfiles proteicos [2]. Su implementación no sólo acelera el diagnóstico microbiológico, sino que también se ha asociado a una reducción en la mortalidad vinculada a bacteriemias y a una disminución en la duración de la internación en unidades de cuidados intensivos [3]. Diversos estudios han explorado su aplicación directa en muestras clínicas. Este estudio tuvo como objetivo evaluar la utilidad del MALDI-TOF para la identificación directa de microorganismos desde hemocultivos positivos, analizando la concordancia con la identificación por cultivo y comparando los tiempos promedio de obtención del resultado.
Metodología. Se llevó a cabo un estudio descriptivo donde se seleccionaron todos los hemocultivos detectados como positivos por el sistema automatizado BD BACTEC™ en un periodo de 2 meses. Todas las muestras provinieron de pacientes que consultaron o fueron hospitalizados en el Hospital Regional de Salto. La identificación del microorganismo se realizó directamente desde la botella de hemocultivo y a partir del subcultivo (colonia aislada) por MALDI-TOF (BD™ Bruker MALDI Biotyper® System). Se realizó un análisis de concordancia en la identificación y del tiempo necesario para la obtención de un resultado.
Resultados. En el 78% de los hemocultivos se obtuvo una identificación de microorganismos directamente por MALDI-TOF MS. El tiempo promedio para la identificación directa fue de 10 horas en comparación a una media de 37 horas cuando se identificó por subcultivo (colonia aislada).
Conclusión. Los resultados obtenidos confirman la utilidad del MALDI-TOF MS para acelerar con buen desempeño la identificación de microorganismos directamente desde muestras clínicas, con el potencial de mejorar el manejo clínico de pacientes con bacteriemia.
Referencias. [1] Singhal N et al. MALDI-TOF mass spectrometry: an emerging technology for microbial identification and diagnosis. Front Microbiol. 2015. [2] Sierra E et al. Identificación directa de microorganismos a partir de muestras de orina y hemocultivos utilizando MALDI-TOF. Infect. 2019. [3] Uzuriaga M et al. Clinical Impact of Rapid Bacterial Microbiological Identification with the MALDI-TOF MS. Antibiotics. 2023.

Reprogramación celular para la síntesis eficiente y sustentable de *(S)-equol*

Tomás Tejera[1,2]; Blas Blázquez[3]; Bruno Manta[2]; Juan Nogales[3]; Cecilia Ortiz[1]

[1] *Laboratorio de Biotecnología, Universidad ORT Uruguay, Montevideo, Uruguay*

[2] *Grupo de Metabolismo y Genética Microbiana, Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay*

[3] *Departamento de Biología de Sistemas, Centro Nacional de Biotecnología CSIC, Madrid, España*

ortiz_c@ort.ed.uy

El (S)-equol es un metabolito bioactivo generado por la microbiota intestinal a partir de isoflavonas presentes en la soja. A pesar de sus efectos beneficiosos para la salud, como actividad antioxidante y estrogénica, solo entre el 25–50 % de la población puede producirla de forma endógena, lo que vuelve necesario su suplemento externo. Actualmente, su síntesis química es costosa, ineficiente y poco sostenible, lo que impulsa la búsqueda de alternativas biológicas viables y sostenibles. En este trabajo se desarrolló un biocatalizador microbiano orientado a la producción eficiente y sustentable de (S)-equol, integrando herramientas de biología sintética e ingeniería metabólica. Se ensambló una ruta biosintética policistrónica con cuatro enzimas clave, ver Figura 1, bajo un sistema de control transcripcional dual: un promotor inducible por ramnosa (*PrhaBAD*) y un biosensor flavonoide-responsivo (*Pflav*), permitiendo una expresión génica dinámica y controlada.

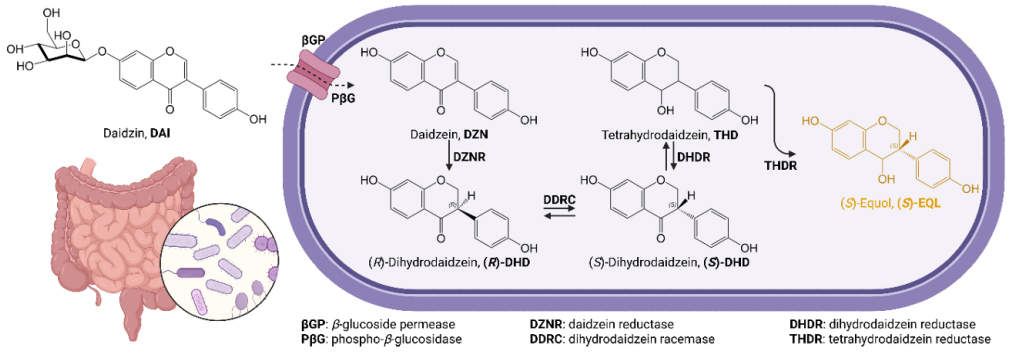


Figura 1: Esquema de la ruta natural de biosíntesis de (S)-equol adaptada a *E. coli*.

Además, la reprogramación metabólica mediante la eliminación del gen *pgi* redirigió el flujo de carbono hacia la generación de NADPH, cofactor esencial para la biosíntesis de (S)-equol. Ensayos con un biosensor de NADPH demostraron un aumento de 2.8 veces en la señal de NADPH en la cepa *Δpgi* respecto a la silvestre, confirmando una mayor disponibilidad del cofactor. Para contrarrestar la disminución en la tasa de crecimiento causada por esta modificación, se aplicó evolución adaptativa (ALE), obteniendo variantes con tasas de crecimiento recuperadas sin comprometer el pool de NADPH. Asimismo, se evaluaron variantes plasmídicas con diferente número de copias, lo que permitió ajustar la carga metabólica y optimizar el balance entre expresión génica y *fitness* celular, mejorando así el rendimiento global del sistema. Este enfoque multidimensional que integró el control dinámico de la expresión de la vía, la redirección de flujos metabólicos hacia la producción de poder reductor, la evolución adaptativa y el ajuste de carga genética, sienta las bases para el desarrollo de un biocatalizador robusto, escalable y sustentable para la producción industrial de (S)-equol.

Electrodos con nanoflores de oro para determinación de Bisfenol A

Sabrina Maccio[1]; Fernanda Cerdá[1]; Pablo Fagúndez[2]

[1]*Laboratorio de Biomateriales, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Unidad de Bioquímica Analítica, Centro de Investigaciones Nucleares, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

sabrina.maccio@fcien.edu.uy

El bisfenol A (BPA) es un compuesto orgánico que actúa como disruptor endócrino (1). Este contaminante emergente es muy utilizado en la producción de plásticos de policarbonato y resinas epoxi que recubren latas de alimentos. A pesar de las restricciones implementadas en varios países, este compuesto sigue siendo utilizado en productos no etiquetados como "libres de BPA". El BPA está relacionado con los microplásticos (MPs), ya que puede liberarse durante su degradación o adherirse a MPs que actúan como vectores de transporte (2). Los métodos actuales para su determinación, como FTIR y HPLC-MS (3), implican largos tiempos de análisis y equipamiento sofisticado y costoso. En este contexto, las técnicas electroanalíticas ofrecen ventajas como reducción de tiempos de análisis y volúmenes requeridos, menores costos y portabilidad. En este trabajo se propone el uso de electrodos serigrafiados de grafito (c-ES) modificados con nanoflores de oro (AuNFs) para la determinación de BPA.

Se sintetizaron AuNFs utilizando $HAuCl_4$ como precursor y sal sódica de HEPES (0,1 M, pH 7,4) como agente reductor y estabilizante. Éstas se depositaron sobre c-ES mediante drop-casting. Se caracterizó el electrodo c-ES-AuNFs mediante voltamperometría cíclica (VC) y espectroscopía de impedancia electroquímica (EIE) utilizando el par redox $Fe(CN)_6^{3-/4-}$. Posteriormente se estudió el comportamiento electroquímico del BPA en buffer fosfato (PBS), empleando VC a diferentes velocidades de barrido de potencial (v) y valores de pH.

Los c-ES-AuNFs presentaron aumento del área electroactiva y efecto electrocatalítico. Para el análisis de BPA, se seleccionó PBS pH 7,3 como electrolito soporte, observándose un comportamiento electroquímico irreversible, con una señal de oxidación en 0,4 V (vs. pseudo-referencia de Ag). El análisis de la dependencia de la intensidad de corriente de pico anódica ($I_{p,a}$) con $v^{1/2}$ mostró un mecanismo predominantemente difusional para el proceso del electrodo, además de un incremento del 25% en las $I_{p,a}$, con respecto a los c-ES, indicando una mejora en la sensibilidad.

Los resultados preliminares sugieren que la modificación de c-ES con AuNFs mejora la respuesta electroquímica hacia BPA. Se proyecta continuar el desarrollo de una metodología electroanalítica utilizando voltamperometrías de pulso para obtener curvas de calibración, con cifras de mérito comparables a la bibliografía.

(1) Rochester JR. Reproductive toxicology 42 (2013): 132-155.
(2) Chen X, Sweetman AJ. Environmental Technology & Innovation 35 (2024): 103662.
(3) Ballesteros-Gómez A, Rubio S, Pérez-Bendito D. Journal of Chromatography A 1216 (2009): 449-469.

Expresión heteróloga de UPRT en *E. coli* y evaluación de la espectroscopía UV/Vis para el monitoreo de reacciones

Magdalena Ripoll[1]; Peter Neubauer[2]; Lorena Betancor[1]; Sarah Westarp[2]

[1]*Laboratorio de Biotecnología, Departamento de Biotecnología, Facultad de Ingeniería, Universidad ORT Uruguay, Montevideo, Uruguay*

[2]*Bioprocess Engineering, Institute of Biotechnology, Faculty III, Technische Universität Berlin, Berlin, Germany*

ripoll_m@ort.edu.uy

Los análogos halogenados de bases se utilizan ampliamente en la terapia contra el cáncer debido a su capacidad de convertirse selectivamente en compuestos citotóxicos dentro de las células tumorales[1,2]. Esta bioactivación depende de enzimas como la uracil fosforribosiltransferasa (UPRT), que cataliza de manera natural la formación reversible de uridina-5'-monofosfato (UMP) a partir de uracilo y 5-fosfo-α-D-ribosil-1-pirofosfato (PRPP) en presencia de Mg^{2+} (Figura 1)[3], pero que también puede actuar sobre análogos halogenados como el 5-fluorouracilo[4]. Sin embargo, la aplicación más amplia de estrategias basadas en UPRT sigue estando limitada por dos principales cuellos de botella: la necesidad de disponer de cantidades suficientes de la enzima activa y estable, y la falta de un método confiable y de alto rendimiento para monitorear la formación de nucleótidos.

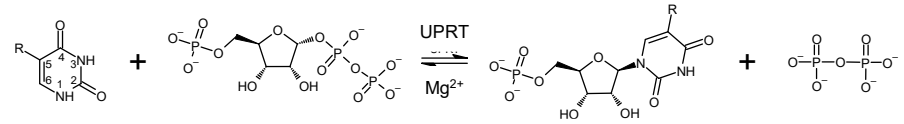


Figura 1. Reacción catalizada por UPRT. PRPP (5-fosfo-α-D-ribosil-1-pirofosfato). PPi (pirofosfato inorgánico). Adaptado de Villela et al.[3]. R – H para el sustrato natural uracilo, F para el agente terapéutico 5-fluorouracilo.

En este trabajo, una UPRT de *Thermus thermophilus* fue expresada de manera heteróloga en *E. coli* BL21iq mediante una estrategia fed-batch con glucosa, alcanzando altas densidades celulares (OD_{600} = 37,45), con un rendimiento de 4,9 ± 0,1 $mg/g_{peso\ húmedo}$ y alta pureza confirmada por SDS-PAGE. Posteriormente, evaluamos si un método basado en espectroscopía UV/Vis, desarrollado originalmente para monitorear la conversión enzimática entre nucleósidos y bases nitrogenadas[5], podía aplicarse también al seguimiento de reacciones que involucran nucleótidos y bases. En particular, se evaluó su desempeño en el seguimiento de la conversión de uracilo a UMP. El método demostró ser una alternativa de bajo costo y alto rendimiento frente al análisis convencional por HPLC para este tipo de reacción.

1. Zaoui et al (2012). DOI: 10.1038/cgt.2011.75
2. Tibensky et al (2022). DOI: 10.3390/cancers14030735
3. Villela et al. (2013). DOI: 10.1371/journal.pone.0056445
4. Del Arco et al. (2018). DOI: 10.1002/cctc.201701223
5. Kaspar et al (2019). DOI: 10.3390/mps2030060

Implementación de una metodología de análisis en flujo por inyección secuencial para la determinación automatizada de paracetamol

Guillermo Roth; Mariela Pistón; Florencia Tissot; Moisés Knochen

Área Química Analítica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

groth@fq.edu.uy

El paracetamol es un fármaco con propiedades analgésicas y antipiréticas, presente en numerosas formas farmacéuticas de venta libre. Para garantizar la seguridad y eficacia terapéutica de estos medicamentos, es necesario poder determinar cuantitativamente el paracetamol mediante métodos analíticos de adecuada precisión, veracidad y frecuencia analítica. En este contexto, el presente trabajo se centra en la transferencia de un método colorimétrico en *batch* previamente reportado a una técnica automatizada de análisis en flujo para la determinación cuantitativa de paracetamol en productos farmacéuticos.

Se seleccionó para este fin la técnica de Análisis por Inyección Secuencial (SIA), empleando un analizador miniSIA-1. Este instrumento integra un *manifold* monolítico de 10 puertos, una bomba de flujo bidireccional de cuatro pistones, una bobina de retención termostatizada y un sistema de detección espectrofotométrico. La aplicación de SIA en este estudio se fundamenta en la miniaturización en el manejo de fluidos y en la gran versatilidad que ofrece para la automatización del análisis. Esto conlleva una reducción en el consumo de reactivos y en la generación de residuos.

La reacción utilizada para el desarrollo de color se basa en el acoplamiento oxidativo entre el paracetamol y la 4-aminoantipirina, mediado por persulfato en medio básico[1]. Las determinaciones se realizaron a 442 nm, dado que a esta longitud de onda se maximiza el cociente entre las absorbancias del analito y del blanco. Una vez programada la secuencia de trabajo en el software del instrumento (FloZF) y halladas las condiciones operativas más adecuadas, se aplicó el método a la determinación de paracetamol en comprimidos.

Se verificó una respuesta lineal hasta 100 mg L^{-1}. En las muestras comerciales, tras la extracción del analito con etanol 95 % (v/v), se determinó una concentración de paracetamol de 92 % respecto al valor declarado por el fabricante, cumpliendo con la especificación de USP (90–110 %), con un RSD de 5 %. Este sistema automatizado genera 1,5 mL de residuos por muestra analizada, y puede analizar 18 muestras por hora, mostrando un desempeño ventajoso frente a la química clásica en *batch.*

Esta implementación preliminar evidencia el potencial del enfoque SIA para el análisis de paracetamol en productos farmacéuticos. Como perspectiva inmediata, se avanza en su aplicación al estudio de este analito como contaminante emergente en matrices ambientales, como las aguas residuales.

Agradecimientos: CAP (BDMX_2025_1)

Referencias: [1] Al-Abachi, M. Q., Sinan, R., & Falah, Z. (2008). *Iraqi J. Sci., 49(2*), 12–20.C

Optimización de la marcación con ^{99m}Tc de un complejo derivado de Erlotinib para imagenología en cáncer de mama triple negativo

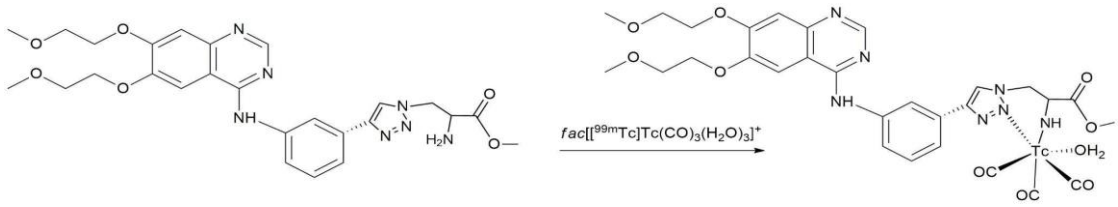
Valentina Lembo; Joaquín Afonso; Ana Rey; Ma. Emilia Tejería

Radioquímica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

vlembo@fq.edu.uy

El cáncer de mama triple negativo se caracteriza por ser agresivo, tener una alta tasa de crecimiento y recidiva. Se da en mujeres jóvenes y actualmente la única terapia disponible es la quimioterapia convencional. Por esta razón, resulta crucial encontrar nuevos blancos moleculares que permitan un mejor diagnóstico y una alternativa de tratamiento. Algunos estudios han demostrado que alrededor del 60% de los casos de cáncer de mama triple negativo sobreexpresan el receptor del factor de crecimiento epidérmico (EGFR). Este receptor es, por tanto, el blanco molecular seleccionado para este trabajo.

El presente trabajo tiene por objetivo la optimización de la marcación con ^{99m}Tc de un ligando derivado de Erlotinib (inhibidor de dicho receptor) previamente sintetizado por el grupo. La marcación con ^{99m}Tc implica dos etapas: por un lado, la formación de un precursor adecuado, en este caso el precursor tricarbonílico *fac*-$[^{99m}Tc(I)(CO)_3(H_2O)_3]^+$ y por otro, la sustitución con el ligando correspondiente. En este caso, el ligando posee un conjunto de átomos donadores de electrones N,N que se unen al radiometal formando un complejo tricarbonílico de Tc(I) al sustituir dos moléculas de agua.



Para optimizar la marcación se varió la molaridad del marcado ($8{,}25\times10^{-4}$ M a 1.27×10^{-2} M), el tiempo (15, 30, 45 min) y la temperatura (ambiente, 50, 75 y 95 °C). Las mejores condiciones de marcación fueron las siguientes: concentración 2.60×10^{-3} M del ligando, una actividad de 2 mCi por 15 min a 75 °C. La pureza radioquímica (PRQ) del complejo fue evaluada por un sistema HPLC fase reversa, obteniéndose. una especie mayoritaria con tiempo de retención 19.1 min y una PRQ mayor al 90% luego de la purificación. Como conclusión, se logró optimizar la marcación con ^{99m}Tc obteniéndose un complejo de PRQ mayor al 90%. Se continuará el trabajo estudiando la estabilidad del mismo y realizando estudios fisicoquímicos. Asimismo, en un futuro se pretende incorporar un coligando monodentado inerte para completar la esfera de coordinación para obtener un complejo del tipo 2+1.

Agradecimientos: ANII (POS_NAC_2022_1_173941), Gonzalo Carrau, Daniela Gamenara, Centro de Medicina Nuclear e Imagenología Molecular del Hospital de Clínicas, Consultorio Ferrari Ferrando Páez.

Evaluación biológica *in vitro* de un complejo tricarbonílico de ^{99m}Tcderivado de Erlotinib

Romina Rossi; Ana Rey; Ma. Emilia Tejería

Área Radioquímica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

rrossi@fq.edu.uy

El cáncer de mama triple negativo constituye una problemática relevante en el ámbito de la salud pública por su impacto en mujeres jóvenes premenopáusicas menores de 40 años, que representan aproximadamente el 15-20% de todas las pacientes con cáncer de mama. Se caracteriza por su agresividad, rápida progresión, alta tasa de recurrencia y mortalidad.
El receptor del factor de crecimiento epidérmico (EGFR), se encuentra sobreexpresado en aproximadamente el 60 % de los casos de esta patología, siendo por tanto un blanco molecular prometedor para la mejora del diagnóstico y la terapia.

El Área Radioquímica se encuentra desarrollando una familia de radiotrazadores derivados del Erlotinib (agonista del EGFR) para imagenología molecular en cáncer de mama triple negativo. El objetivo de este trabajo es el desarrollo de los ensayos biológicos *in vitro* del primer radiotrazador obtenido por el grupo.

La obtención del radiotrazador se llevó a cabo en dos etapas: la preparación del precursor tricarbonílico *fac*-$[^{99m}Tc(I)(CO)_3(H_2O)_3]^+$ y la sustitución por el ligando (0.12 mg de L 2.5mCi) actividad) durante 30 minutos a 75 °C. La pureza radioquímica (PRQ) se evaluó mediante cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) en fase reversa obteniéndose una especie principal de tiempo de retención 19,2 min y una Pureza Radioquímica (PRQ) mayor al 90% luego de la purificación. Los estudios biológicos *in vitro* fueron realizados en células de cáncer de mama triple negativo MDA-MB-231 que expresan el EGFR y en células MCF-7 como control negativo. La primera evaluación consistió en variar la actividad del radiotrazador (10-50 µCi) manteniendo el tiempo de incubación (1 hora) y el número de células ($1,8x10^5$). El % de unión a membrana plásmatica fue de 0.31±0.03 y 0.40±0.03 para células MCF-7 y MDA-MB-231, respectivamente. El % de internalización para ambas líneas celulares fue de 0.24 ±0.03. A pesar del aumento de la actividad del radiotrazador no se observó aumento de la unión e internalización. El % de unión a membrana fue levemente superior en el caso de las células MDA-MB-231 pero dicha diferencia no es significativa. En este momento, se está estudiando la variación del % de unión e internalización al variar el tiempo de incubación.

Estos primeros estudios muestran un bajo % de unión e internalización en células EGFR+, no diferenciándose de las células usadas como control negativo. A futuro, se pretende evaluar otros radiotrazadores desarrollados por el grupo que son también derivados de Erlotinib pero poseen diferentes unidades quelantes.

Agradecimientos: Joaquín Afonso ANII (POS_NAC_2022_1_173941), Gonzalo Carrau, Daniela Gamenara, Centro de Medicina Nuclear e Imagenología Molecular del Hospital de Clínicas, Consultorio Ferrari Ferrando Páez, Ana María Duhagon, Paula Arbilidi y Gustavo Mourglia.

Análisis computacional de imágenes de lámina completa de secciones histológicas de trombos de accidente cerebro vascular isquémico

Victoria Martínez[1]; Adriana Gómez[2]; Matías Negrotto[2,3]; Alejandra Jaume[2]; Mariana Romero[2]; Francisco Garagorry[3]; Juan Barcia[3]; Elizabeth López[1]; Viviana Escobar[3]; Romina Medeiros[1]

[1]Laboratorio Central Hospital Maciel, Unidad de Bioquímica Clínica y Hematología (BIOCLIN), Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

[2]Centro de Intervencionismo Vascular (CIVASA), Sanatorio Americano, Montevideo, Uruguay.

[3]Laboratorio de Anatomía Patológica, Hospital de Clínicas, Facultad de Medicina, Universidad de la República.

victoria.martinez0013@gmail.com

El accidente cerebrovascular (ACV) isquémico es una de las principales causas de discapacidad y muerte a nivel mundial. La trombectomía mecánica ha posibilitado el acceso a trombos para su análisis histológico, permitiendo estudiar su composición y relacionarla con la etiología del evento, que a menudo es incierta. Este trabajo describe un flujo de trabajo computacional para el análisis de trombos obtenidos de pacientes con ACV isquémico, mediante trombectomía mecánica[1,2,3]. Se analizaron trombos recuperados por trombectomía mecánica, clasificados clínicamente mediante el score TOAST. Las muestras fueron teñidas con hematoxilina-eosina, escaneadas como imágenes de diapositiva completa (WSI) y procesadas con Orbit Image Analysis para segmentar los principales componentes: glóbulos rojos (RBC), agregados de fibrina-plaquetas (FP) y glóbulos blancos (WBC). La composición porcentual se calculó mediante un modelo automatizado, y se extrajeron descriptores radiómicos y texturales con PyRadiomics, considerando tanto características intranucleares como extranucleares de WBC. El flujo de trabajo combina técnicas de inteligencia artificial con pasos semi-automatizados que requieren validación del operador[1]. Se procesaron siete trombos, obteniendo el porcentaje de RBC, FP y WBC para cada muestra. Los trombos cardioembólicos mostraron una proporción más elevada de FP, mientras que el único caso aterotrombótico presentó un equilibrio RBC/FP. El trombo clasificado como criptogénico mostró un patrón inverso, con predominio de RBC. Este análisis preliminar sugiere que la composición histológica puede correlacionarse con la etiología. Se estableció una metodología computacional para el análisis cuantitativo de trombos de ACV isquémico. Los resultados iniciales evidencian tendencias de composición según la etiología y sientan las bases para el desarrollo de modelos de clasificación automática. Estudios futuros con un mayor número de muestras y análisis detallados de WBC podrían mejorar la discriminación entre diferentes subtipos etiológicos.

Referencias

1. Patel, T. R., et. al. (2023). Biologically informed clot histomics are predictive of acute ischemic stroke etiology. Stroke: Vascular and Interventional Neurology, 3(6), 737–749.
2. Aliena-Valero, Alicia, et. al. Clot composition analysis as a diagnostic tool to gain insight into ischemic stroke etiology: a systematic review. Journal of stroke 23, no. 3 (2021): 327.
3. Niesten, Joris M., et. al. Histopathologic composition of cerebral thrombi of acute stroke patients is correlated with stroke subtype and thrombus attenuation. PLoSOne 9, no. 2 (2014): e88882.

Estudio preliminar de la exposición a plaguicidas en el cinturón hortifrutícola de Salto

Juan Diego Llona[1], Gabriel Fernández[1], Alexandra Bozo[2], Elena Alvareda[2], Lucía Pareja[1]

[1] *Grupo de Análisis de Compuestos Trazas, Departamento de Química del Litoral, Centro Universitario Regional Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay*

[2] *Laboratorio de agua y suelo, Departamento del Agua, Centro Universitario Regional Litoral Norte, Universidad de la República, Salto, Uruguay*

dllona@fq.edu.uy

A nivel global, la detección de residuos de plaguicidas en matrices biológicas y ambientales es un área de creciente interés, intensificada en los últimos años por su potencial impacto crónico en la salud humana [1]. En Uruguay, esta problemática es especialmente relevante en zonas rurales de alta actividad agrícola, donde las políticas de monitoreo ambiental son escasas. En este contexto, el presente estudio tiene como objetivo generar información sobre la exposición humana a plaguicidas en una región de alta intensidad productiva del norte de nuestro país: el "cinturón hortofrutícola de Salto". La investigación se centra en trabajadores rurales y sus familias, mediante el análisis de orina y agua de pozo. Se desarrollaron metodologías analíticas avanzadas para la detección y cuantificación de 84 plaguicidas y alguno de sus metabolitos. En el caso de las aguas subterráneas del Sistema Acuífero Salto – Formación Arapey, utilizadas para consumo y riego, se aplicaron estrategias miniaturizadas, rápidas y sensibles, adecuadas para cubrir un amplio espectro de compuestos. En paralelo, para el análisis de orina -una matriz biológica compleja- se compararon diferentes metodologías con el fin de optimizar el desempeño analítico y minimizar las interferencias. El método validado para agua permitió determinar 72 plaguicidas y 12 metabolitos, con parámetros de validación adecuados. Se analizaron 34 pozos, en los cuales se identificaron los compuestos carbendazim, 3-hidroxi-carbofurano, malaoxon, metalaxil, acetamiprid, clotianidina, diazinon, fenhexamida y metoxifenocida en concentraciones en el rango de 5-100 µm/L. En cuanto a la matriz orina se estableció la metodología analítica, actualmente se encuentra en proceso de validación y análisis de las muestras. La aplicación de estas herramientas permitirá generar evidencia científica sobre presencia y niveles de plaguicidas, identificar posibles vías de exposición, y contribuir al desarrollo de estrategias orientadas a reducir riesgos sanitarios para poblaciones rurales expuestas.

[1] Hakme, E., Poulsen, M.E., Lassen, A. D. A. Journal of agricultural and food chemistry, (2024), 72, 32, 17706-17729, [2] Pareja, L., Martínez Bueno, M.J., Cesio, V., Heinzen, H., Fernández-Alba, A.R., Journal of Chromatography A, 1218 (2011) 4790-4798.

Análisis de parámetros químicos del suelo asociados a usos del territorio en Salto, Uruguay

Eliana Daleve[1]; Sofía Da Rocha[1]; Andrés Saracho[1]; Diego Llona[2]; Pablo Gamazo[1]; Rafael Navas[1]; Elena Alvareda[1]

[1]Departamento del Agua, Centro Universitario Regional Litoral Norte, Universidad de la República, Salto, Uruguay

[2]Departamento de Química del Litoral, Centro Universitario Regional Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay

alvareda@fq.edu.uy

El estudio de Elementos Potencialmente Tóxicos (EPT) en suelos ha ganado relevancia en las últimas décadas, dada la importancia del suelo en los ecosistemas como reservorio de nutrientes y soporte de vida y actividades humanas. Este trabajo analiza EPT, fósforo total (P), porcentaje de carbono orgánico (%CO) y pH en 10 sitios a lo largo del arroyo San Antonio (SA), Salto, Uruguay, evaluando su origen natural y antrópico.

El arroyo SA es la principal fuente de agua en la región. La presencia del vertedero municipal y talleres mecánicos a lo largo de la cuenca contribuyen a la descarga de aguas residuales y disposición de residuos sin tratamiento [1]. Estudios previos reportan contaminantes como arsénico, fósforo, zinc y plomo en aguas y sedimentos del SA, indicando distintos niveles de contaminación [1].

Los valores analizados incluyen: pH 5,99 – 7,87; %CO 5,11 – 5,77; P 1,3 – 30,0 mg kg^{-1}; Pb 11,44 – 105,6 mg kg^{-1}; Cr 7,10 – 63,9 mg kg^{-1}. Ante la falta de normativa específica en Uruguay, se consideró la referencia canadiense para sedimentos *"Guidelines for Identifying, Assessing and Managing Contaminated Sediments in Ontario"* [2], que establece niveles de efecto para Pb y Cr.

Los resultados sugieren una influencia predominantemente antrópica en la presencia de EPT, especialmente en sitios cercanos al vertedero municipal y talleres mecánicos, donde los niveles de Pb superan el nivel de efecto más bajo establecido por la guía canadiense [2]. Aunque algunos elementos podrían tener contribuciones geogénicas, la coincidencia espacial entre fuentes puntuales de contaminación y valores elevados de Pb y P refuerza la hipótesis de origen antrópico. Estos hallazgos subrayan la necesidad del monitoreo continuo y gestión integrada del territorio para proteger los recursos suelo y agua en la cuenca del arroyo San Antonio.

[1] Alvareda, E., Gimenez, M., Ramos, J., Borrero, A., Texo, A., Bessone, L., ... & Gamazo, P. (2025). Hydrochemical analysis and evaluation of water quality in the Salto-Arapey aquifer and San Antonio Creek, Salto, Uruguay, as a diagnosis for water resources management. Environmental Monitoring and Assessment, 197(6), 674.

[2] Guidelines for Identifying, Assessing and Managing Contaminated Sediments in Ontario. Canada (2008), pp. 1-69.

Evaluación de estrategias químicas para el control de *Pyrenophora teres f. teres* en cebada: impacto en rendimiento y residuos de fungicidas

Agustina Balatti [1]; Sofia Curbelo [1]; Malena Alemany [2]; Cintia Palladino [2]; Lucía Pareja [1]

[1] *Laboratorio de Compuestos Trazas, Departamento de Química del Litora, CENUR Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay*

[2] *Unidad de Fitopatología, Departamento de Protección Vegetal, Facultad de Agronomía, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay*

agusbalatti@gmail.com

En el cultivo de cebada, la mancha reticular tipo red (MRtr), provocada por *Pyrenophora teres f. teres* (Ptt), es una de las enfermedades de mayor relevancia. El control de Ptt se logra mediante un manejo integrado, que comprende la utilización de variedades resistentes, la rotación de cultivos, un adecuado manejo de los rastrojos y la aplicación de fungicidas. Sin embargo, en los últimos años, se ha observado un incremento en la presión de la enfermedad, resultando en un aumento en la cantidad y frecuencia de las aplicaciones de fungicidas. Esta intensificación del uso de fungicidas puede generar la presencia de residuos en los granos de cebada. En este contexto, el objetivo del presente estudio fue evaluar diferentes estrategias de manejo químico para el control de MRtr en el cultivo de cebada. Para ello, se condujo un experimento de campo utilizando un diseño factorial incompleto en bloques completos al azar, con cuatro repeticiones. Se evaluaron 12 tratamientos con distintos fungicidas foliares (epoxiconazol + fluxapiroxad + piraclostrobin; azoxistrobina + cyproconazol; o bioestimulante), curasemillas (fluxapiroxad + triticonazol; bioestimulante; o sin aplicación), y momentos de aplicación (al alcanzar el nivel crítico; o 15 días posteriores al mismo). Además, se incluyeron dos testigos, uno sin aplicación y otro con aplicación de fungicidas cada 20 días desde macollaje. Se cuantificó la cantidad de MRtr, el rendimiento de grano y la presencia de residuos de fungicidas. En cuanto a los fungicidas evaluados, el estudio abordó específicamente el impacto de los curasemillas y la influencia del momento de aplicación de distintas mezclas de fungicidas foliares. Los resultados en los granos analizados hasta el momento muestran ausencia de los fungicidas aplicados en los tratamientos evaluados. No obstante, se encontraron concentraciones de deoxinivalenol (micotoxina del grupo de los tricotecenos) en el rango 80-600 µg/kg. En principio no se había detectado presencia de *Fusarium* en el cultivo, por lo que no se esperaba presencia de micotoxinas. Este hallazgo subraya la importancia de monitorear estos compuestos en matrices alimentarias, dado su potencial impacto en la salud humana.

Desarrollo y evaluación de un potencial radiofármaco de ^{99m}Tc derivado de la laminina 111 para diagnóstico de cáncer de mama triple negativo

Florencia Poggi; Ma. Emilia Tejería; Ana Rey

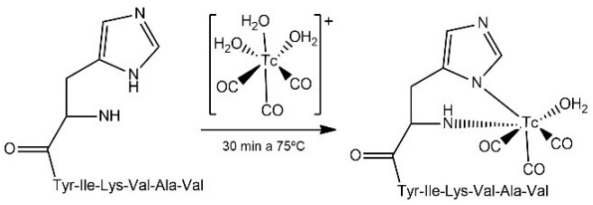
Área de Radioquímica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

flopoggi.149@gmail.com

El cáncer de mama triple negativo es un tipo de cáncer agresivo, que ocurre a muy temprana edad, tiene una alta velocidad de crecimiento, una alta tasa de recurrencia y mortalidad. En la actualidad la quimioterapia convencional es la única terapia disponible, por lo que es crucial la búsqueda de nuevos blancos moleculares que estén expresados y que permitan una mejora en el diagnóstico y el tratamiento. En este sentido, las lamininas son un componente fundamental de la matriz extracelular y ejercen su acción mediante la interacción con el receptor de integrinas influyendo en la invasión tumoral, la angiogénesis y la generación de metástasis.

El objetivo de este trabajo es desarrollar y evaluar un complejo tricarbonílico de ^{99m}Tc con un péptido derivados de laminina 111 para imagenología molecular en cáncer de mama triple negativo. El péptido utilizado es el HYIKVAV que contiene la secuencia activa de la laminina y al cual se le incorporo el aminoácido histidina para la coordinación con el radiometal.

La marcación con ^{99m}Tc se realizó en dos etapas: obtención del precursor *fac*-$[^{99m}Tc(I)(CO)_3(H_2O)_3]^+$ (6-15 mCi) y sustitución con el péptido. La optimización de la marcación se realizó variando la masa del péptido, la actividad, el tiempo y la temperatura llegando a que las mejores condiciones son concentración del péptido $1.7x10^{-3}$ M, 2mCi, 30min y 75ºC, obteniendo una especie mayoritaria de tiempo de retención de 19,1 min y una pureza radioquímica (PRQ) de 91% evaluada por cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) en fase reversa. En este momento se están realizando los estudios de estabilidad del complejo obtenido en el medio de reacción y en plasma humano. Asimismo, se va a determinar la lipofilicidad expresada como log P (coeficiente de partición entre octanol y buffer fosfato 0,1M, pH=7,4) y la unión a proteínas plasmáticas a través de técnicas de exclusión molecular. En un futuro cercano se realizarán los estudios en células MDA-MB-231 de cáncer de mama triple negativo.



Agradecimientos: Valentina Lembo, Luciana Malavolta y Leonardo Fuscaldi Facultad de Ciencias Médicas de Santa Casa, Centro de Medicina Nuclear e Imagenología Molecular del Hospital de Clínicas, Consultorio Ferrari Ferrando Páez.

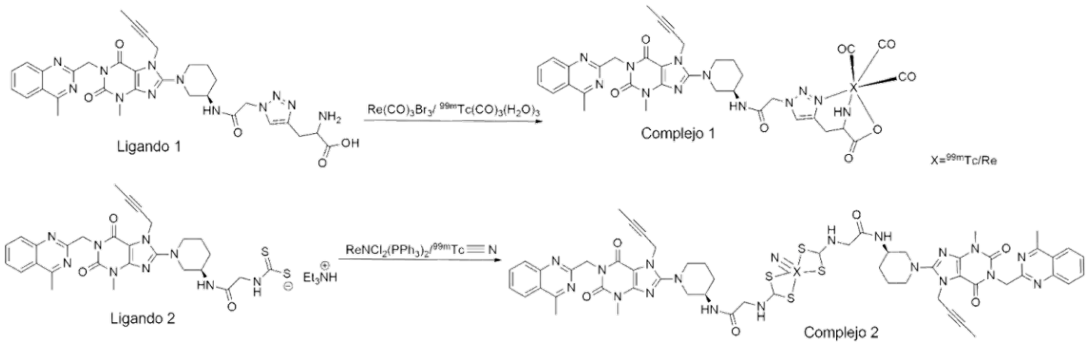
Elucidación estructural de dos complejos de ^{99m}Tc derivados de la linagliptina para imagenología molecular de la proteína activadora de los fibroblastos

Florencia Estevez; Ma. Emilia Tejería; Ana Rey

Área Radioquímica, Facultad de Química, Universidad de la República (UdelaR), Montevideo, Uruguay.

flopief@hotmail.com

La elucidación estructural de los complejos de ^{99m}Tc no puede realizarse en forma directa ya que este metal radiactivo se obtiene de un generador ^{99}Mo/^{99m}Tc en concentraciones muy bajas (10^{-7} y 10^{-10} M). Al no existir un isótopo del tecnecio estable, se deben preparar los complejos análogos utilizando renio estable por su similitud química con el tecnecio, siendo la estructura de ambos complejos la misma en la mayoría de los casos. El objetivo de este trabajo es realizar la elucidación estructural de dos complejos de ^{99m}Tc derivados de la linagliptina, fármaco inhibidor de la proteína activadora de los fibroblastos la que se encuentra, sobreexpresada en diferentes tipos de cáncer. El complejo 1 de fórmula $Re(CO_3)L1$ se preparó mediante reacción del precursor $Re(CO)_3Br_3$ ($1{,}35x10^{-5}$ moles, 0,5 equivalentes) con el Ligando 1, L1 (2,69x10-5 moles, 1 equivalente) durante 2,5 horas a 110°C. El ligando 1 posee un conjunto de átomos donadores de electrones N,N,O que permiten su coordinación con el metal a través de la formación de un complejo tricarbonílico. El complejo 2 de fórmula $ReN(L2)_2$ se obtuvo por reacción del precursor $ReNCl_2(PPh_3)_2$ (2,69 x 10-5 moles, 1 equivalente) con el ligando 2, L2 (2,69 x10-5 moles, 1 equivalente) durante 3 horas a 60°C. El ligando 2 posee un grupo ditiocarbamato para la coordinación con el metal formando nitrido complejos. El avance de ambas reacciones se evaluó por cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) en fase reversa utilizando un detector UV. En ambos casos a medida que avanza la reacción se observa la desaparición de la especie correspondiente al complejo precursor ($Re(CO)_3Br_3$ con tr:15,1 min y $ReNCl_2(PPh_3)_2$ a los tr:10,4 min) y a la especie correspondiente al ligando (L1 tr:18,75 min y L2 tr:11,5 min) y la aparición de una nueva especie que coincide con el tiempo de retención del complejo análogo de ^{99m}Tc (Complejo 1 de ^{99m}Tc tr:20,65 minutos y Complejo 1 de Re tr:20,27 minutos, Complejo 2 de ^{99m}Tc tr:10,9 minutos y Complejo 2 de Re tr:10,8 minutos). La evaluación de ambos complejos de renio se realizó por espectroscopia Infrarroja (IR) confirmando la formación del core (C1 bandas del CO a los 2023,81, 1888,80 y 1881,62 cm^{-1}, C2 desaparición de la banda Re-O en 968 cm^{-1}). Se están realizando otras técnicas espectroscópicas para terminar de evaluar la forma de unión del metal con el ligando correspondiente.



Diseño y caracterización estructural de complejos de Ga(III) con derivados de fenantrolina y ácido 1,1-ciclobutanodicarboxílico

Belén Alvarez[1]; Carlos Y. Fernández[1]; Gianella Facchin[1]

[1]Laboratorio de Inorgánica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

belalvarez24@gmail.com

Los complejos de Ga(III) representan una estrategia prometedora en el desarrollo de agentes terapéuticos alternativos al platino. Este ion metálico, al compartir similitudes estructurales con el Fe(III), puede interferir en procesos biológicos clave sin inducir toxicidades severas [1,2]. En este trabajo se reporta la síntesis y caracterización estructural de nuevos complejos de Ga(III) con ligandos diimínicos (NN) como lo son: 1,10-fenantrolina, 4-metil-1,10-fenantrolina, neocuproína y 3,4,7,8-tetrametil-1,10-fenantrolina, junto con el ácido 1,1-ciclobutanodicarboxílico (CBDCA), un ligando dicarboxilato que ha demostrado utilidad clínica como agente quelante en complejos tipo carboplatino [3,4]. La elección del ligando CBDCA se fundamenta en su estabilidad, solubilidad y precedentes farmacológicos, mientras que la modificación del entorno aromático de la fenantrolina permite evaluar el efecto estérico y electrónico sobre la estabilidad y posible interacción biológica de los complejos. Se obtuvieron tres nuevos complejos de formula general $[Ga(CBDCA)(NN)_2]PF_6$, los cuales fueron caracterizados en estado sólido mediante espectroscopía IR y análisis elemental. La caracterización en solución de los complejos se estudió a partir de espectroscopía RMN de ^1H donde se determinó que el complejo en solución mantiene una coordinación similar a la observada en estado sólido. Asimismo, se estudió la estabilidad de los complejos en solución por 48 horas usando espectroscopía RMN de ^1H donde se observó que los complejos se mantienen estables en el tiempo de estudio. Se realizaron estudios preliminares de actividad citotóxica de los complejos en células MCF-7 (adenocarcinoma de mama), mostrando que los complejos presentan una elevada actividad.

Referencias:

[1] L. Bernstein, 31Ga Therapeutic Gallium Compounds, in: Met. Drugs Met.-Based Diagn. Agents Use Met. Med., 2005: pp. 259–277. https://doi.org/10.1002/0470864052.ch14.
[2] M. Gielen, E.R.T. Tiekink, NetLibrary, Inc, eds., Metallotherapeutic drugs and metal-based diagnostic agents: the use of metals in medicine, Wiley, Hoboken, N.J, 2005. https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/0470864052 (accessed July 30, 2023).
[3] Shehata, M. R. (2001). Mixed ligand complexes of diaquo (2, 2′-bipyridine) palladium (II) with cyclobutane-1, 1-dicarboxylic acid and DNA constituents. *Transition Metal Chemistry*, *26*(1), 198-204.
[4] Nemati Kharat, A., Tamaddoni Jahromi, B., Mohammadifar, E., & Zareyi, J. (2017). Synthesis of Cis-Diammine (1, 1-cyclobutane dicarboxylate) Platinum (II). *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering (IJCCE)*, *36*(4), 39-43.

Degradación de colorantes contaminantes usando polímeros impresos con complejos de Fe(III)

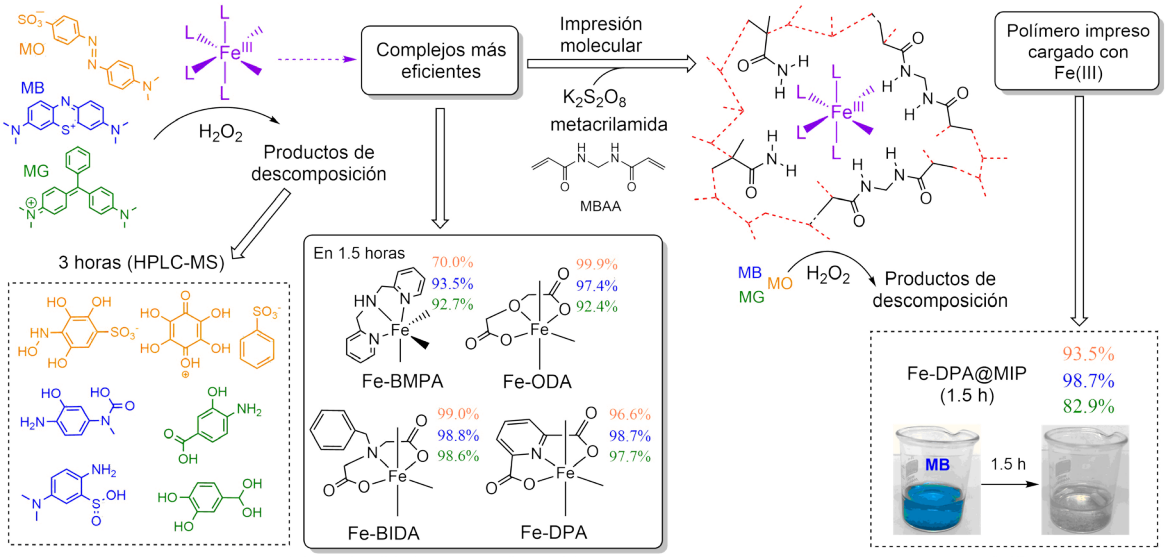
Ignacio Pires Quintas[1]; Paulina Haller[1]; Leticia Pérez-Díaz[2]; Guillermo Valdomir[3]; Julia Torres[1]; Ignacio Machado[4]; Nicolás Veiga[1]

1. *Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*
2. *Sección Genómica Funcional, Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*
3. *Química Farmacéutica, DQO, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*
4. *Química Analítica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*

ipiresquintas@fq.edu.uy

La descarga de efluentes con colorantes textiles ha incrementado la contaminación de los ecosistemas. Como alternativa de tratamiento, los procesos oxidativos avanzados catalizados por hierro surgen como tecnología prometedora. Este trabajo se enfocó en inmovilizar complejos de Fe(III) en polímeros impresos molecularmente (MIPs), generando catalizadores heterogéneos eficientes de la degradación de los colorantes en presencia de H_2O_2.[1] Se evaluaron varios complejos metálicos con ligandos comerciales y económicos frente a la degradación oxidativa de los contaminantes naranja de metilo (MO), azul de metileno (MB) y verde de malaquita (MG) (Figura 1). Los más eficaces degradaron >70 % del colorante en 1,5 h, y se elucidaron el mecanismo catalítico y los productos de degradación por ESI-MS. Los mejores complejos se usaron para imprimir cavidades catalíticas en MIPs, obteniendo materiales robustos, fáciles de aislar y con alta eficiencia de degradación (>82 % de decoloración en 1,5 h). Finalmente, se evaluó la citotoxicidad de los productos en células VERO: los MIPs de Fe-BMPA, Fe-BIDA y Fe-DPA generaron productos menos citotóxicos para ciertos colorantes. Estos resultados posicionan a estos MIPs como candidatos prometedores para el tratamiento eficiente y económico de efluentes textiles.

Figura 1. Estrategia general de trabajo. Los porcentajes de degradación se incluyen en color.



[1] P. Haller, I. Machado, J. Torres, A. Vila, N. Veiga, Polymers, 2021, 13, 3127.

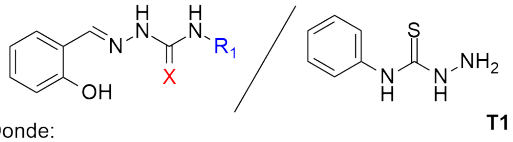
Complejos de Fe(III) con (tio)semicarbazonas como catalizadores de la degradación oxidativa de colorantes contaminantes

Ignacio Guidobono; Ignacio Pires Quintas; Santiago Rostán; Nicolás Veiga

Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR. Av. Gral. Flores 2124, 11800 Montevideo.

ignaciog.villalba@gmail.com

La calidad de las aguas naturales está en continuo deterioro debido al crecimiento de industrias que emplean colorantes, como las que producen telas, papel, cosméticos, plásticos, gomas, cuero, fármacos y alimentos. En la búsqueda de nuevas estrategias de descontaminación de efluentes, nuestro grupo desarrolla polímeros impresos molecularmente (MIPs) que contienen complejos de Fe(III) capaces de catalizar la degradación de colorantes en presencia de H_2O_2.[1] En este trabajo, sintetizamos una serie de ligandos (tio)semicarbazonas (Figura 1) y evaluamos la actividad catalítica de sus complejos con Fe(III) para seleccionar los mejores candidatos en el diseño de MIPs.



T1

Donde:
X = O (L1), S (L2, L3, L4).
R_1 = H (L1,L2), Metilo (L3), Etilo (L4).

Figura 1- Estructura generalizada de los Ligandos

Los ligandos se prepararon a partir de salicilaldehído y el derivado correspondiente de una tio o semicarbazona, en etanol absoluto a 70 °C por 2 horas. Fueron además caracterizados de forma integral mediante resonancia magnética nuclear (RMN), espectroscopía infrarroja (FT-IR) y análisis elemental de elementos livianos.

La capacidad catalítica de los complejos se evaluó frente a tres colorantes industriales: anaranjado de metilo (AM), azul de metileno (AZ) y verde de malaquita (VM). Se emplearon soluciones equimolares de metal y ligando, a las que se agregó el colorante y H_2O_2, monitoreando espectroscópicamente la absorción del colorante en función del tiempo. Los resultados para los complejos con L1–L4 (Tabla 1) mostraron una degradación eficiente de AM y VM (73-98% / 33-71% en 3 horas), pero menor para AZ (4-30%). Un resultado interesante es que cuando los experimentos se repiten usando como ligando el reactivo comercial T1 (Figura 1), los colorantes son degradados en más del 70% en solo una hora. Esta eficiencia decrece cuando se bloquea el haz de luz del espectrofotómetro entre medidas, lo que sugiere un mecanismo fotocatalítico (Tabla 1). Actualmente estamos preparando los MIPs correspondientes a partir de los complejos de mejor desempeño.

Tabla 1. Porcentajes de degradación de los colorantes para cada sistema luego de 3 horas.

Colorante	L1	L2	L3	L4	T1*
AZ	3.8	29.9	16.6	10.5	74.1 (16.3)
AM	76.4	73.4	82.0	97.8	93.7 (59.6)
VM	33.5	44.1	53.8	71.1	70.4 (29.4)

*Resultados a 1 hora. Se listan entre paréntesis los valores cuando se bloquea el haz de luz del espectrofotómetro entre medidas.

1. P. Haller, I. Machado, J. Torres, A. Vila, N. Veiga, *Polymers*, 2021, **13**, 3127.

Materiales de emisión dual basados en *carbon dots* encapsulados en *metal-organic frameworks*

Diego Aldao[1]; Martín Esteves[2]; Julia Torres[1]
[1]*Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*
[2]*Área Física, DETEMA, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

daldao@fq.edu.uy

La obtención de materiales de emisión dual apunta al diseño de sensores que puedan permitir su autocalibración en base a la modificación selectiva de una de sus señales en presencia de un analito. En este trabajo se presenta la preparación de nanomateriales basados en la encapsulación de *carbon dots* (CD) en *metal organic frameworks* (MOFs) conteniendo europio(III). Las estrategias sintéticas principales consisten en encapsular los CD preparándolos directamente en los poros de nanoMOFs o en cristalizar los MOFs sobre una suspensión estable de CD. Se optimizaron los procedimientos sintéticos para la obtención de cada componente con buen rendimiento y reproducibilidad, seleccionando también los materiales con tamaño y perfil óptico adecuados. En particular, se prepararon CD a partir de polivinilpirrolidona y quitosano, así como Eu-MOF (de europio(III) y ácido trimésico) y EuMIL-53 (MOF de aluminio(III) dopado con europio(III) y ácido tereftálico).[1-2] Las suspensiones de material nanométrico fueron evaluadas mediante dispersión dinámica de luz, y espectroscopia UV-vis y fluorescencia. Los materiales sólidos se caracterizaron mediante espectroscopia IR, análisis elemental y difracción de rayos X de polvo. Los CD obtenidos a partir de quitosano muestran un perfil de emisión intenso y dependiente de la longitud de onda de excitación (ver Figura 1a, excitando a 350 nm). Dicho perfil no se superpone con la emisión característica del Eu(III) (ver Figura 1b para ambos MOFs, excitando el ligando cromóforo en el mismo intervalo de excitación del CD, cercano a 350 nm), dando lugar a la exploración de emisores duales. Además de las estrategias sintéticas para la preparación de CD@MOF, se evalúa comparativamente en este trabajo la eficiencia de sensibilización de la emisión del europio en los diferentes sistemas ensayados.

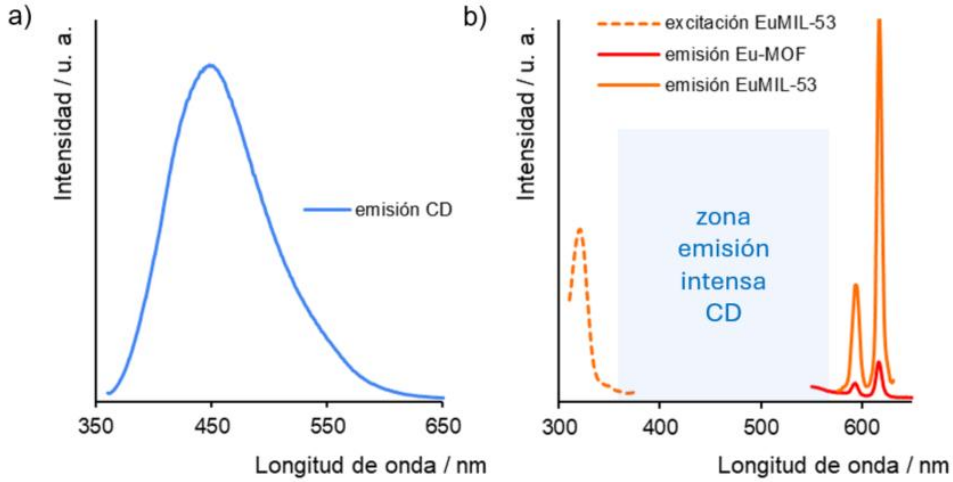


Figura 1- Perfiles de emisión de a) CD obtenido a partir de quitosano (excitación 350 nm) y b) MOFs.

1. S. J. Qin, B. Yan, (2018) *Sensors and Actuators B: Chemical*, **273**, 133
2. Y. Dong, J. Cai, Q. Fang, X. You, Y. Chi, (2016) *Analytical Chemistry*, **88**, 1748

Síntesis y evaluación de benzamidas y tiazolidinas como potenciales nematicidas

Anabel Bianchi[1]; Paulina Rodriguez[1]; Franco Vairoletti[1,2]; Natalia Álvarez; Graciela Mahler; Gustavo Salinas y Cecilia Saiz[1]

[1]*Laboratorio de Química Farmacéutica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

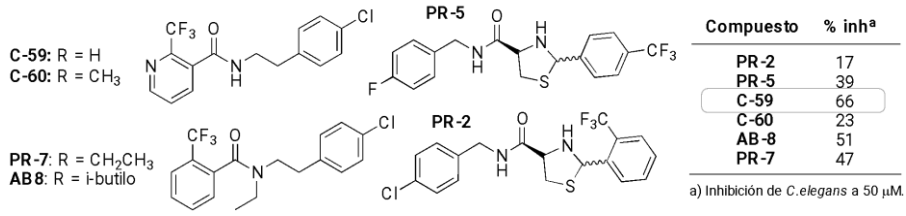
[2]*Laboratorio de Biologia de gusanos, Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay.*

[3]*Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, Udelar*

anubianruiz@gmail.com, rodriguezpauli2702@gmail.com

Los nematodos parásitos de plantas (nematodos fitopatógenos) son gusanos microscópicos que, al ser parásitos, precisan de un huésped para completar su ciclo de vida. Las plantas son huéspedes de estos parásitos: al ser infectadas, disminuyen su producción generando grandes pérdidas en los cultivos. Existen en el mundo más de 4.000 especies de nematodos que infectan plantas. El nematodo del género *Meloidoyne* ocupa el primer lugar en el ranking mundial de nematodos fitopatógenos, debido a su importancia económica y científica, afectando cultivos de tomates, morrón, zapallito, papa, entre otros.[1] En Uruguay, *Meloidogyne spp.* es también el nematodo más importante y por eso en este proyecto nos enfocamos en la búsqueda de nuevas moléculas capaces de controlarlos.

Recientemente se han desarrollado nuevas familias de moléculas, siendo las benzamidas una de las más importantes. Nuestro trabajo busca sintetizar y evaluar nuevas benzamidas y tiazolidinas para lograr compuestos con mejor actividad (más potentes) y menor eco-toxicidad. En la figura se muestran las moléculas diseñadas, sintetizadas y evaluadas en este trabajo:



Compuesto	% inh[a]
PR-2	17
PR-5	39
C-59	66
C-60	23
AB-8	51
PR-7	47

a) Inhibición de *C.elegans* a 50 μM.

La biblioteca de compuestos preparada se evaluó en *C. elegans*, nematodo de vida libre ampliamente utilizado como modelo en la búsqueda de nematicidas.[2] Los resultados del ensayo mostraron que las tiazolidinas no presentan actividad nematicida. De las benzamidas *N*-sustituídas, PR7 y AB8, presentaron poca actividad. La piridina sin sustituir resultó activa a 50 μM. Este ensayo se utiliza como screening preliminar: los compuestos más activos se evaluarán en un ensayo in vitro contra *Meloidogyne spp*.

[1] Jones JT et al. *Mol Plant Pathol.* 2013; 14(9):946-61. doi: 10.1111/mpp.12057. [2] Vairoletti F et al. 2021. Increased sensitivity of an infrared motility assay for nematicide discovery. *microPublication Biology*. 10.17912/micropub.biology.000500.

Modelado y simulaciones de ácidos nucleicos modificados

Pablo D. Dans[1,2]

[1] Grupo de Biofísica Computacional. Departamento de Ciencias Biológicas, CENUR Litoral Norte, Universidad de la República, Uruguay.

[2] Unidad de Bioinformática. Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay.

pablo.dans@unorte.edu.uy; pdans@pasteur.edu.uy

Las modificaciones químicas de los nucleótidos naturales que componen el ADN y el ARN están mucho más extendidas de lo que se pensaba. Estas modificaciones, que amplían el alfabeto de 4 letras (A, T/U, C, G) a cientos de nuevos nucleótidos, cumplen funciones clave en procesos biológicos fundamentales como la regulación génica, la diferenciación celular, la determinación del sexo y la respuesta al estrés. Los nucleótidos modificados están en la base de dos niveles de control celular vitales que conocemos como el epigenoma y el epitranscriptoma. Por otro lado, las modificaciones químicas han surgido como una vía terapéutica prometedora. Vacunas de ARN, mini plásmidos, oligonucleótidos antisentido, ARN de interferencia y aptámeros, todos incorporan nucleótidos modificados para protegerse de nucleasas, para dirigirse a sitios específicos, o para mayor estabilidad, abriendo nuevas oportunidades para la industria farmacéutica.

En esta contribución presentamos 5 estrategias de modelado y simulación multiescala que hemos desarrollado para estudiar el efecto de los nucleótidos modificados. Se aborda, cómo ciertas modificaciones epitranscriptómicas regulan la actividad ribosomal [1]; cómo las modificaciones epigenéticas 5-metilcitosina y 5-hidroximetilcitosina afectan la estructura de la doble hélice de ADN [2]; cómo el genoma de las levaduras se ve alterado por los efectos intrínsecos de la metilación del ADN [3,4]; y cómo una nueva marca epigenética en la histona H3 se vincula con la reparación del ADN [5]. Finalmente, se introducirá modXNA, un enfoque basado en fragmentos para el desarrollo de una librería de parámetros para modelado molecular que incluye 132.685 modificaciones de ADN y ARN, cubriendo todo el espectro conocido de modificaciones naturales y no naturales [6].

[1] M. Janin et al. Epigenetic Loss of RNA-Methyltransferase NSUN5 in Glioma Targets Ribosomes to Drive a Stress Adaptive Translational Program. *Acta Neuropathologica* **2019**, 1.
[2] F. Battistini et al. The Impact of the Hydroxymethylcytosine Epigenetic Signature on DNA Structure and Function. *PLoS Computational Biology* **2021**, e1009547.
[3] D. Buitrago et al. Impact of DNA Methylation on 3D Genome Structure. *Nature Communication* **2021**, 3243.
[4] M.V. Neguembor et al. MiOS, An Integrated Imaging and Computational Strategy to Model Gene Folding with Nucleosome Resolution. *Nature Structural & Molecular Biology* **2022**, 1011.
[5] N. Parisis et al. Histone H3 Serine-57 is a CHK1 Substrate Whose Phosphorylation Affects DNA Repair. *Nature Communication* **2023**, 2041.
[6] O. Love et al. modXNA: A modular approach to parametrization of modified nucleic acids for use with amber force fields. *Journal of Chemical Theory and Computation* **2024**, 9354.

Fabricación de soportes cerámicos estructurados para catálisis utilizando impresión 3D de resinas fotocurables

Santiago Veiga; Carolina De los Santos

Laboratorio de Fisicoquímica de Superficies, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

sveiga@fq.edu.uy

La impresión 3D, o fabricación aditiva, está revolucionando el diseño y producción de materiales funcionales, permitiendo obtener estructuras complejas de forma rápida, económica y precisa. Por ejemplo, en el área de la catálisis, esta tecnología permite diseñar soportes estructurados adaptados a distintos escenarios de aplicación, superando las limitaciones de estructuras simples tipo panal. De este modo, se pueden optimizar variables clave como el flujo de reactivos y su tiempo de residencia, la transferencia de calor y masa, y la accesibilidad a los sitios activos.

Una estrategia prometedora para la fabricación de soportes cerámicos mediante impresión 3D es la fotopolimerización de resinas cargadas con partículas cerámicas. Durante el proceso de impresión, la luz promueve la solidificación selectiva de la matriz polimérica, atrapando las partículas cerámicas en su interior. Posteriormente, la pieza impresa se somete a un tratamiento térmico que elimina los componentes orgánicos, resultando en una estructura cerámica que puede ser utilizada como soporte en aplicaciones catalíticas.

El diseño del soporte se realizó utilizando el software MSLattice, a partir de una estructura giroide cilíndrica de 20 mm de diámetro y 30 mm de alto. Se utilizó Al_2O_3 (Sigma-Aldrich, tamaño de partícula ≤ 10 µm), que fue mezclada con la resina (Elegoo Standard) en una proporción en peso Al_2O_3:resina = 1:2. En el software Chitubox se configuraron los parámetros de impresión óptimos. Se utilizó un espesor de capa de 0,05 mm y tiempos de exposición a la luz UV de 5 s y 30 s para las 10 capas inferiores. La impresora utilizada fue la Elegoo Saturn 4 Ultra. Se realizó un análisis termogravimétrico en atmósfera de aire de la mezcla resina/Al_2O_3, con el fin de diseñar un tratamiento térmico adecuado que permitiera obtener el soporte de Al_2O_3 sin formación de grietas ni defectos estructurales.

La Figura muestra un esquema del proceso y las imágenes de los soportes, junto con sus dimensiones (diámetro x alto) y masa, determinadas promediando 3 soportes de cada uno.

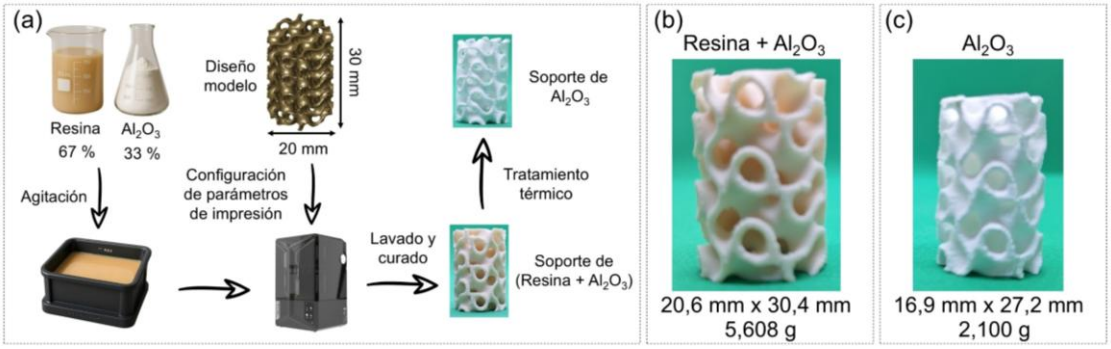


Figura: (a) Esquema del proceso. (b) Soporte resina + Al_2O_3. (c) Soporte de Al_2O_3.

Comparación y optimización de parámetros en sistemas de colecta de compuestos orgánicos volátiles en muestras de frutales

Mariana Seveso; María Eugenia Amorós; Carmen Rossini; Andrés González

Laboratorio de Ecología Química, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

m.seveso13@gmail.com

Los compuestos volátiles orgánicos (VOCs) son relevantes para el estudio de interacciones en sistemas biológicos. En el campo de la Ecología Química se realizan rutinariamente colectas de VOCs debido a su rol como semioquímicos mediadores de interacciones, en particular entre plantas e insectos herbívoros y benéficos. En este sentido, el objetivo del presente trabajo fue estudiar distintos sistemas de adsorción y desorción de VOCs y su desempeño comparativo.

Se utilizó como muestra en todas las colectas pulpa triturada de frutilla. Se evaluaron tres tipos de sistemas de adsorción y desorción: Desorción térmica (TD) con columnas de relleno Tenax®, elución líquida con columnas con relleno HayeSep® y microextracción en fase sólida (SPME) con dos fibras de diferente composición: polidimetilsiloxano (PDMS) y polidimetilsiloxano/divinilbenceno (PDMS/DVB). Las colectas se realizaron dentro de colectores de vidrio, utilizando un flujo de aire seco y filtrado para colectas TD y HayeSep®, y un sistema cerrado para las colectas con SPME. El análisis de las colectas se realizó mediante GC-FID y GC-MS.

Los resultados mostraron una mejor performance del sistema de desorción térmica, seguido por SPME con fibra PDMS/DVB. En el análisis cromatográfico se aprecia una mejor resolución de los picos obtenidos mediante TD, en particular para tiempos de retención bajos. Asimismo, el análisis por TD permite visualizar compuestos como el butanoato de metilo, que en la elución líquida quedan ocluidos por el solvente. En el caso de SPME, la ventaja de la ausencia de solvente se ve parcialmente limitada por la baja resolución al comienzo de la corrida, posiblemente debido a la modalidad *splitless* de inyección. Además de la resolución, se observaron diferencias importantes en la eficiencia de adsorción. Con integración automática de 50 compuestos y utilizando el área absoluta de los picos, se observa que TD posee una capacidad para capturar VOCs de frutilla 9 veces mayor a la de HayeSep®, 11 veces mayor que SPME-PDMS, y similar a la capacidad de SPME-PDMS/DVB. Para ciertos alcoholes y ésteres de interés en este sistema, esta diferencia llega a ser hasta 14 a 34 veces mayor en TD.

Si bien el sistema de TD muestra un mejor desempeño, el análisis destruye la muestra, al igual que con las colectas por SPME, lo que resulta una desventaja. Dada la importancia de HayeSep® como estrategia para obtener extractos de VOCs para estudios biológicos, continuaremos optimizando el sistema de colecta de HayeSep® evaluando tiempos de colecta y otras condiciones que puedan estar afectando su performance.

Desarrollo de metodología analítica para detección de antihelmínticos y sus metabolitos en matriz parasitaria de *Haemonchus contortus*

Magdalena Nieves[1,3,4]; Ignacio Migues[2,3,4]; Horacio Heinzen[2], Beatriz Munguía[1]

[1]*Área de Farmacología, CIENFAR, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Farmacognosia, DQO, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[3]*Programa de Posgrados de la Facultad de Química, Udelar, Uruguay*

[4]*Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas*

maganieves@fq.edu.uy

Haemonchus contortus es un nematodo parásito que afecta a pequeños rumiantes. Frente al creciente problema de resistencia a los antihelmínticos comercializados, contamos con bioensayos fisiología-guiados validados para la evaluación *in vitro* de nuevas moléculas con potencial actividad. Sin embargo, hemos observado diferencias en la sensibilidad al tratamiento con antihelmínticos según el estadio del parásito utilizado en el cribado, siendo el estadio larvario xL3 menos sensible que el adulto (*1*). Hipotetizamos que estas diferencias se deben a cambios en la farmacocinética del parásito entre estadios, particularmente en los mecanismos de detoxificación. Para explorar esta hipótesis, evaluamos el efecto del agregado de inhibidores del eflujo y metabolismo fases I y II sobre la actividad del bioensayo en el estadio xL3 (*2*). Actualmente estamos desarrollando una metodología de análisis por HPLC acoplado a espectrómetro de masas (MS) para evaluar concentraciones intraparasitarias *ex vivo* de los antihelmínticos y sus principales metabolitos, y así poder correlacionar con los resultados obtenidos de actividad *in vitro*.

Se optimizaron las condiciones de fraccionamiento de iones por inyección directa en MS triple cuadrupolo, para estándares de monepantel, monepantel sulfona, levamisol, albendazol, albendazol sulfóxido, valero-fenbendazol, fenbendazol, fenbendazol sulfóxido, ivermectina y mebendazol. Se incluyen estas optimizaciones en un método multi residuo (MRM) donde se busquen los iones de interés en un tiempo determinado, correspondiente al tiempo de elución detectado para un método cromatográfico realizado en gradiente. Actualmente se está desarrollando la metodología de análisis, evaluando parámetros de validación como ser linealidad en el rango de 6 a 100 ppb, límites de detección y cuantificación, efecto matriz (evaluando la matriz parasitaria del estadio adulto), entre otros, acorde a las guías SANTE y Bioanalytical Method Validation.

Dentro de las condiciones evaluadas, se pueden considerar lineales los ajustes para todos los analitos en las curvas metanólicas ($R^2 > 0.99$), a excepción de levamisol. La matriz parasitaria no afecta sustancialmente la linealidad de ninguno de los analitos.

Liposomas enriquecidos con xilano y chalcona: un estudio de interacciones moleculares para la fotoprotección

Estefany Hespindola Soares[1]; Desirée Magalhães dos Santos Costa[1]; Gabriel Jorge Sagrera[2,3]; Vânia Rodrigues de Lima[1]

[1]*Grupo de Investigação de Interações Moleculares em Membrana, Universidade Federal do Rio Grande, Escola de Química e Alimentos – PPGQTA, Rio Grande – RS – Brasil.*

[2]*Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[3]*Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

estefanyhuff@gmail.com

El cáncer de piel no melanoma constituye un grave problema de salud pública. En este contexto, la exposición a los rayos ultravioleta (UV) es uno de los principales factores de riesgo. Una forma de prevenir el cáncer de piel es mediante el uso de fotoprotectores, por lo que es fundamental desarrollar formulaciones y buscar materias primas eficaces con características físicas y químicas estables. El xilano contiene grupos cromóforos en su estructura, lo que refuerza las propiedades fotoprotectoras de estos sistemas. Las chalconas también poseen propiedades fotoprotectoras, actuando como filtros de la radiación UV. Por lo tanto, el uso de liposomas fotoprotectores preserva estas sustancias activas de la degradación, aumentando su tiempo de retención en el estrato córneo de la piel y bloqueando la radiación UV.

Medidas espectroscópicas permiten el estudio de las interacciones dentro del sistema y proporcionan informaciónes sobre la estructura, la conformación, el tamaño y la temperatura de transición de fase de los sistemas. Por lo tanto, este trabajo tiene como objetivo caracterizar liposomas que contienen asolecitina de soja, xilano y chalcona mediante FTIR y RMN. Los liposomas fueran obtenidos mediante el método de hidratación vesicular, añadiendo la chalcona (*E*)-3-(4-metoxifenil)-1-fenil-2-propen-1-ona y xilano derivado de maíz. Las chalconas fueran sintetizadas mediante condensación aldólica de acetofenona y benzaldehído. Las mediciones de FTIR se realizaron en modo de reflectancia total atenuada horizontal, y las mediciones de RMN de fósforo se realizaron a 161 MHz. Los datos de FTIR indicaron que la chalcona redujo el grado de hidratación del grupo fosfato lipídico y restringió la movilidad del grupo colina y la cadena hidrofóbica. La RMN mostró que la chalcona restringió la velocidad de rotación del grupo fosfato lipídico, reduciendo la anisotropía del desplazamiento químico en 1,92 ppm.

Los datos indican que la chalcona utilizada puede mantener estable un sistema liposomal basado en lípidos y xilano, y definir propiedades asociadas con la cinética de liberación del sistema.

Diversidad química regional del aceite esencial de *Eupatorium buniifolium* en Uruguay: una experiencia de ciencia colaborativa con escuelas rurales

Ana Paula Bertoni[1]; Camila Lamela[1]; Camila Medina[1]; Federico Rodrigo[1]; Carmen Rossini[1]

[1]*Laboratorio de Ecología Química, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

paula.bertoni2015@gmail.com

El arbusto nativo *Eupatorium buniifolium* (Asteraceae), comúnmente conocido como chirca, es una especie presente en pastizales regionales, y es considerado una maleza por su falta de valor agronómico. En búsqueda de su revalorización se ha evaluado previamente el potencial uso de su aceite esencial como biocontrolador de ácaros[1] y su inocuidad en cuanto a posibles efectos subletales en abejas[2]. Aunque la composición del aceite esencial ya ha sido caracterizada[1,3], la variabilidad de los metabolitos secundarios asociada a factores ecológicos locales hace necesario profundizar en el estudio de su diversidad química. El objetivo de este trabajo fue caracterizar la variación del perfil del aceite esencial de chirca en distintas regiones de Uruguay. Para esto se colectaron, en junio de 2023, partes aéreas de cinco plantas de chirca seleccionadas y marcadas en seis departamentos: Montevideo, Maldonado, Durazno, Paysandú, Florida y Colonia (n = 30). Las muestras de Florida y Colonia se obtuvieron en las escuelas rurales Nº 110 y Nº 69 respectivamente. El aceite esencial se extrajo mediante destilación por arrastre con vapor de agua de hojas frescas y tallo (2 h, P_{atm}). A la fracción obtenida se le realizó una extracción líquido-líquido con diclorometano (calidad HPLC, 3x26 mL) y se evaporó a presión reducida hasta 4 mL, concentrándose luego con nitrógeno a 2 mL. Los aceites esenciales obtenidos se analizaron por cromatografía gaseosa acoplada a espectrometría de masas (Shimadzu GC2010/QP2010 Plus). Los compuestos se identificaron comparando índices de retención y porcentaje de similitud con las bibliotecas disponibles, y se cuantificaron por porcentaje relativo de área. Los compuestos se agruparon en nueve clases químicas (incluyendo una de "no identificados"). Cinco clases (sesquiterpenos, orgánicos oxigenados, aromáticos, sesquiterpenos oxigenados e hidrocarburos) mostraron mayor poder discriminante (PLS, VIP score>1, p<0,1) entre las muestras según el departamento de origen. De los 127 compuestos cuantificados, 40 contribuyen significativamente a la diferenciación química regional (PLS, VIP score>1, p<0,1). Los 3 principales son β-elemeno[1,2,3], α-cadinol[1], reportados en bibliografía, y cubenol. Los resultados evidencian diferencias significativas en la composición de los aceites esenciales entre regiones, lo que puede señalar la influencia del entorno ecológico como factor determinante en la variabilidad química de esta especie.

[1]Umpiérrez, ML; Santos, E.; Mendoza, Y.; Altesor, P. & Rossini, C. Parasitology Research. **2013**, 112(10), 3389-3400.

[2]Rossini, C., Rodrigo, F., Davyt, B., Umpiérrez, M. L., González, A., Garrido, P. M., Cuniolo, A., Porrini, L. P., Eguaras, M. J., & Porrini, M. P.. PLoS ONE. **2020**, 15(11), e0241666.

[3]Lorenzo, D., Paz, D., Davies, P., Villamil, J., Vila, R., Cañigueral, S., & Dellacassa, E. (2005). Phytochemical Analysis. **2005**, 16(1), 39-44.

Agradecimientos: Alumnos y maestras Oriana Fernández y Vanessa Borges de la escuela N°110 de Florida, y Lidia Rosales y Silvana Irrigaray de la escuela N° 69 de Colonia.

Evaluación de la absorción de Zinc en hojas de *Carya illinoinensis* utilizando microscopía óptica y microscopía confocal

Gastón Martínez[1]; Marcelo Belluzzi[2]; Inés Carrera[3]; Facundo Ibañez[4]; Valery Bühl[2]; Mariela Pistón[2]

[1]*Laboratorio de Botánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Área Química Analítica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[3]*Laboratorio de Experimentación Animal, Departamento de Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[4]*Sistema Vegetal Intensivo, Estación Experimental Wilson Ferreira Aldunate, INIA Las Brujas, Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria (INIA), Ruta 48, km 10, 90200, Canelones, Uruguay.*

gastonmartinez@fq.edu.uy

El árbol de nuez pecán (*Carya illinoinensis* (Wangenh.) K. Koch), es una especie arbórea caducifolia originaria de América del Norte, perteneciente a la familia Juglandaceae. Es ampliamente valorada en la industria alimentaria y en las últimas décadas su cultivo se ha expandido a otras regiones del mundo, incluyendo América Latina. Ha sido documentado que la deficiencia de zinc afecta la fisiología y el desarrollo de la planta, lo que repercute en su productividad y en la calidad de los frutos [1]. Para subsanar esta problemática, se realiza la fertilización de los árboles utilizando sales inorgánicas o quelatos de Zn. Se han reportado estudios cualitativos en tejidos vegetales frescos con el objetivo de determinar la distribución de Zn en ellos [2]. Se realizaron ensayos en hojas frescas de plantas de *C. illinoinensis* previamente fertilizadas y sin fertilizar. Para ello se obtuvieron cortes transversales y paradermales de los folíolos en la región del haz vascular principal. Se realizaron pruebas histoquímicas por asperjado con disoluciones de Zincón (con Zn se forma un complejo azulado) y se observaron los preparados en microscopio óptico. Algunas secciones se trataron con N-(6-etoxi-8-quinolinil)-4-metilbencenosulfonamida (TSQ, el que forma un complejo fluorescente altamente selectivo con el Zn) y se observaron en un microscopio confocal. Aunque no se observaron diferencias notorias entre las hojas fertilizadas y sin fertilizar, se pudo distinguir una coloración azulada en cristales epidérmicos ubicados sobre el tejido vascular y en algunas fibras adyacentes al tejido floemático.

Referencias:

[1] Hu, H. and D. Sparks. (1990). Zinc deficiency inhibits reproductive development in Stuart' pecan. HortScience 25:1392–1396.
[2] Seregin, Kozhevnikova & Schat (2015). Histochemical detection of Zn in plant tissues. Bioprotocol, 5, 1-6

Desarrollo de dispensadores de liberación controlada de semioquímicos y su aplicación en el manejo integrado de *Cyrtogenius luteus*

Ana Larocca[1]; Gianna Zinola[1]; María Eugenia Amorós[1]; Helena Pardo[2]; Andrés González[1]

[1]*Laboratorio de Ecología Química, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Nanomateriales, Instituto Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

alarocca@fq.edu.uy

En los últimos años, diversas especies exóticas de escarabajos de corteza están afectando plantaciones de pino en Uruguay, generando importantes pérdidas en el sector. Dentro de estas especies, *Cyrtogenius luteus* cobra particular relevancia en el norte del país, con daños asociados a las galerías que excava en la zona del cambium al reproducirse. Hasta el momento, las herramientas utilizadas para su control son el manejo silvicultural y medidas preventivas, además de trampas con trementina y etanol como atrayentes genéricos de escolítidos. El uso de semioquímicos específicos, como feromonas de agregación, resultaría en una optimización de su monitoreo y control mediante trampeo masivo. Nuestros estudios previos mostraron que los machos de *C. luteus* emiten 1,8-menthadien-4-ol, una feromona atrayente para ambos sexos. El objetivo del presente trabajo fue evaluar el uso de dispensadores de emisión controlada de la feromona de agregación de *C. luteus*. Para ello, se estudiaron cuatro dispositivos: cebos monolíticos de ácido esteárico y caolina, septos de goma y sachets comerciales de polietileno de alta densidad, todos cargados con 100 mg de feromona, y en el caso de los últimos, también con 500 mg. Se realizaron ensayos de laboratorio para medir la emisión diaria y duración de los dispositivos tanto mediante gravimetría como por colecta de volátiles con posterior análisis cuantitativo en GC-FID (n=3). Además, se realizó un ensayo de trampeo de adultos en una plantación de pino con infestación natural, donde se utilizaron trampas de panel cruzado cebadas con los dispositivos en estudio combinados con trementina y etanol. Los resultados obtenidos en campo muestran capturas totales/trampa significativamente mayores para los cebos monolíticos (293 ± 47) y septos de goma (256 ± 151) -los que presentaron mayor variabilidad en las capturas-, seguidos por los sachets comerciales de 100 mg (173 ± 38) y de los sachets con 500 mg (112 ± 35), que no se diferenciaron significativamente de la trementina + etanol que actuó como control (138 ± 61) (promedio ± de, $p < 0.05$, GLM quassi-Poisson, n=5). En el laboratorio, se observa que el sachet cargado con 500 mg es el dispositivo que presenta una mayor tasa de emisión en 7 días (46 a 16 mg/día), seguido por el septo (24 a 7 mg/día), el sachet cargado con 100 mg (14 a 2 mg/día), y por último el cebo monolítico (6 a 1 mg/día). Los sachets son los que muestran mayor estabilidad en la emisión, seguidos por el cebo monolítico y finalmente por el septo de goma. Los resultados sugieren que la alta cantidad de feromona emitida por los sachets con 500 mg de feromona podría ser repelente para *C. luteus*. Asimismo, los cebos monolíticos con matriz de ácido esteárico se presentan como una herramienta promisoria para la dispensación de feromonas en el manejo de *C. luteus*.

Influencia del medio de cultivo y la temperatura en la motilidad de larvas L4 de *Haemonchus contortus*: avances hacia un sistema de screening automatizado

Victoria Barros; Gerardo Duarte; Magdalena Nieves; Beatriz Munguía

Área Farmacología, CIENFAR, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

mvbarben@gmail.com

Las infecciones por nematodos parásitos gastrointestinales constituyen uno de los problemas sanitarios más importantes en los sistemas de producción animal, generando grandes pérdidas económicas. *Haemonchus contortus* es un nemátodo hematófago altamente patógeno que afecta a ovinos (1). El uso extensivo de fármacos antihelmínticos como principal estrategia de control de estas infecciones ha favorecido el desarrollo de cepas resistentes a todos los antihelmínticos comercializados en Uruguay (2). De esto surge la importancia de encontrar nuevas moléculas con actividad antihelmíntica, lo que requiere de métodos de *screening* confiables. El objetivo del presente trabajo es comenzar a trabajar en el desarrollo de un ensayo automatizado fenotipo-guiado donde se evalúa la motilidad de larvas de *H. contortus* en el estadio L4. Este estadio es hematófago al igual que el gusano adulto, clínicamente relevante. Se optimizó la obtención *in vitro* de las larvas L4 a partir de larvas xL3 comparando el uso de distintos medios de cultivo, y se estudió su fenotipo de motilidad en los equipos WMicrotracker ARENA y WMicrotracker ONE. El ARENA emplea una matriz de microhaces infrarrojos y cámaras de vídeo para registrar el movimiento, admite placas de 6 y 24 pocillos y permite el control de la temperatura hasta 37°C. El ONE utiliza un sistema de detección por dispersión de dos haces de luz infrarroja, siendo compatible con placas de 96 y 384 pocillos lo que permite un alto rendimiento. Se evaluaron variables como el tipo de placa (24 y 96 pocillos), el medio de cultivo (RPMI o LB suplementados con suero ovino (SO)), la concentración de larvas (entre 300 y 2000 L4) y la temperatura de medida (temperatura ambiente, 37 °C y 40 °C). Los mayores valores de motilidad se obtuvieron utilizando placas de 96 wells, en medio LB suplementado con SO, a una concentración de 300 L4 por pocillo y una temperatura de medición de 40 °C. Además, las larvas cultivadas en medio LB suplementado con SO presentaron mayor tamaño y motilidad que las cultivadas en RPMI igualmente suplementado, lo que sugiere una posible influencia del medio en el desarrollo. Estos resultados permiten concluir que el control de temperatura es crucial para evaluar la motilidad en el estadio L4. A su vez se vio que el medio de cultivo resulta en diferencias morfológicas en las larvas L4 obtenidas. El siguiente paso será validar este modelo utilizando antihelmínticos comerciales con diferentes mecanismos de acción, estudiando su efecto sobre la motilidad en el estadio larvario L4.

Referencias:

(1)Thilakarathne, S. S., Taki, A. C., Wang, T., Nowell, C., Chang, B. C., & Gasser, R. B. (2025). Evaluation of Serum Supplementation on the Development of Haemonchus contortus Larvae In Vitro and on Compound Screening Results. *International Journal of Molecular Sciences*, *26*(3), 1118. DOI: https://doi.org/10.3390/ijms26031118

(2) MEDEROS, A., ORIHUELA, R., TAFERNABERRY, A., BAPTISTA, R., & BANCHERO, G. (2025). Aplicación del método Famacha@ para el control de parásitos gastrointestinales en ovinos. DOI: http://doi.org/10.35676/INIA/ST.274

Síntesis de heterociclos y aminoácidos claves para la obtención de péptidos con permeabilidad celular

Josefina Menéndez; Gloria Serra; Laura Posada

Laboratorio de Química Farmacéutica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

josefinamenro@gmail.com

Los péptidos cíclicos son estructuras que pueden interaccionar con blancos difíciles de apuntar mediante moléculas pequeñas, generando interacciones proteína-proteína más favorables,[1] lo que les confiere interés en el desarrollo de nuevos fármacos. Una de las dificultades del uso terapéutico de ciclopéptidos es su posible baja permeabilidad celular debido a su gran tamaño y número de grupos polares. Estudios recientes han demostrado que determinados heterociclos de ditiolano pueden funcionar como facilitadores del transporte de "cargas" (ej. péptidos) a través de la membrana celular. El mecanismo, no totalmente dilucidado, involucraría un intercambio de disulfuros con tioles de la superficie celular (figura 1A).[2]

En el presente trabajo se tuvo como objetivo la síntesis de moléculas que mejoren la permeabilidad de ciclopéptidos. Se exploraron diversas condiciones y grupos protectores para la síntesis del ditiolano cíclico ácido 4-amino-1,2-ditiolan-4-carboxílico (Adt) (figura 1B), a ser incorporado en péptidos con baja permeabilidad celular. Se presentarán los resultados obtenidos para los diferentes grupos protectores. Por otra parte, mediante síntesis en fase sólida se obtuvo un péptido de secuencia NH-Cys(Trt)-Ile-Cys(Trt)-Phe-Ser(tBu)-Gly-LysN_3-OH que servirá como control de permeabilidad para futuros estudios de la capacidad del Adt de inducir una mejora en la permeabilidad celular.

Lo desarrollado en este trabajo sirve como base para el posterior desarrollo de ciclopéptidos de utilidad biológica, y el estudio en la mejora de su permeabilidad celular.

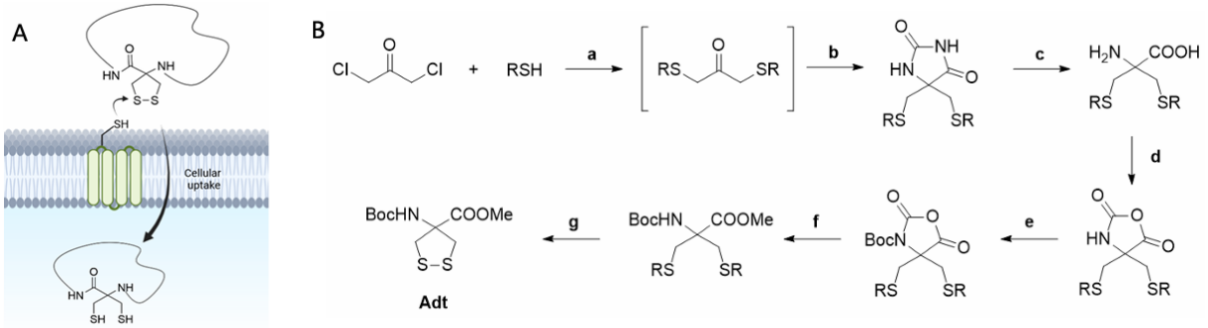


Figura 1. (A) Mecanismo propuesto de transporte a través de membrana celular mediante intercambio de disulfuros. **(B)** Metodología para la síntesis de Adt. R= p-metoxibencilo, bencilo o 2,4,6-trimetoxibencilo. **a.** Na, EtOH, rt; **b.** KCN, $(NH_4)_2CO_3$, THF, 50 °C; **c.** NaOH, H_2O, tubo a presión, 140 °C; **d.** Trifosgeno, THF, rt; **e.** $(Boc)_2O$, py, -20 °C a rt; **f.** MeOH, py, rt; **g.** i) Desprotección. ii) I_2.

(1) Giordanetto, F.; Kihlberg, J. *J. Med. Chem.* **2014**, 57 (2), 278–295.
(2) Gasparini, G.; Bang, E.-K.; Molinard, G.; Tulumello, D. V.; Ward, S.; Kelley, S. O.; Roux, A.; Sakai, N.; Matile, S. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136 (16), 6069–6074.

Evaluación de compuestos híbridos carborano–tetrazina con potencial quimioterapéutico en carcinoma anaplásico de tiroides

Ignacio González Ayup[1]; Belén Dávila [1]; Ricardo Faccio [3];

Rafael Fort [4]; María Fernanda García [2]; María Ana Duhagon[4]; Marcos Couto[1]

[1]Grupo de Química Orgánica Medicinal, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias Universidad de la República, Montevideo, Uruguay;

[2]Área de Radiofarmacia, Centro de Investigaciones Nucleares, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay;

[3]Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay;

[4]Sección Genómica Funcional, Instituto de Biología, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

iayup@fcien.edu.uy

El carcinoma anaplásico de tiroides (CAT) es considerado la forma más agresiva y letal de cáncer tiroideo. Si bien representa sólo el 1-2 % de los casos, es responsable de más del 50 % de las defunciones[1]. Los pacientes presentan una sobrevida media de entre 3 y 6 meses, aunque se ha evidenciado una mejoría a 24 meses en el 31% de los pacientes tratados con dabrafenib-trametinib (actual terapia de primera línea)[2,3]. Frente a estos resultados es fundamental el desarrollo de nuevos enfoques terapéuticos que permitan mejorar el abordaje clínico. Nuestro grupo se enfocó en el diseño y estudio de compuestos híbridos que combinan dos farmacóforos con potencial antitumoral poco explorado: una entidad de alto contenido en boro y un heterociclo de [1,2,4,5]-tetrazina.

Se evaluó la citotoxicidad de 6 compuestos híbridos en una línea celular de CAT (8505C) y en una línea de epitelio tiroideo (Nathy-Ori 3-1). Dos de ellos presentaron citotoxicidad selectiva frente al modelo de CAT, con índices de entre 5 y 8 en comparación con la línea celular de epitelio tiroideo. Además, la evaluación de los fragmentos estructurales sugiere que la actividad antitumoral es una propiedad emergente de la conjugación de ambos andamios en una misma molécula y no atribuible a los fragmentos de forma individual. Asimismo, se realizó la evaluación de mutagenicidad mediante test de Ames, en presencia y ausencia de activación metabólica, evidenciando que uno de los compuestos no presenta actividad mutagénica en ninguna de las cepas y bajo ninguna de las condiciones. Finalmente, un estudio de colocalización mediante microscopía de Raman confocal de este compuesto dió indicios de su acumulación en el interior de la célula tumoral.

(1) Nagaiah, G, et al. Pathogenesis, and Treatment. *J. Oncol.* **2011**, *2011*, 542358.
(2) Cheng, L, et al. *Practical Management of Thyroid Cancer*; Springer, Cham, 2023.
(3) Subbiah, V, et al *Ann. Oncol. Off. J. Eur. Soc. Med. Oncol.* **2022**, *33* (4).

Evaluación in vitro del efecto antiinflamatorio de furilnitroalquenos derivados de la biomasa en astrocitos reactivos asociados a la Enfermedad de Alzheimer

Tiago Tassano[1, 2]; Mariana Ingold[2]; Victoria Valiente[1]; Manuela Bentura[1]; Virginia López[2,3]; Williams Porcal[2,3]; Eduardo Savio[1]; Rosina Dapueto[1]; Florencia Arredondo[1]

[1]*Área I&D Biomédico, Departamento de Radiofarmacia, Centro Uruguayo de Imagenología Molecular, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Síntesis Orgánica y Desarrollo de Fármacos, Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay*

[3]*Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo Uruguay*

tiagotassano@gmail.com

La Enfermedad de Alzheimer (EA) es la principal causa de demencia a nivel mundial y se estima que afecta a 55 millones de personas. La OMS espera que esta cifra siga aumentando en los próximos años. En Uruguay, aproximadamente 54.000 personas padecen demencia, cifra que se proyecta aumentará a 77.000 para 2030 y a 112.000 para 2050. Esto plantea un gran desafío socioeconómico con crecientes exigencias para el sistema de salud.

La neuroinflamación es clave en el daño neuronal en la EA, donde las células gliales, especialmente astrocitos y microglías, presentan un rol central.[1] Nuestro grupo ha aislado astrocitos de corteza/hipocampo de ratones 3xTg-AD (modelo de EA) de 9-10 meses, que in vitro presentan propiedades neurotóxicas y sobreexpresión de genes proinflamatorios.[2] Se ha sugerido que compuestos con propiedades antiinflamatorias podrían tener un potencial terapéutico significativo en la EA.[1,3] En este contexto, hemos diseñado y sintetizado furilnitroalquenos y nitroalquenos de ácidos grasos furánicos utilizando materias primas renovables de la biomasa. Éstos demostraron capacidad inhibitoria sobre la vía proinflamatoria NF-kB/NLRP3 en macrófagos THP-1.

Proponemos que estos compuestos podrían modular la activación inflamatoria de astrocitos, reduciendo su neurotoxicidad. Para ello, inicialmente determinamos la concentración letal media (LC_{50}) en cultivos de astrocitos 3xTg-AD y encontramos valores 15-31 μM. Actualmente estamos evaluando su efecto antiinflamatorio en astrocitos neonatos y 3xTg-AD estimulados con LPS/ATP; mediante cuantificación IL-1β por ELISA. Hemos observado liberación de IL-1β únicamente en astrocitos neonatos, lo que sugiere alteraciones funcionales en los 3xTg-AD. Los resultados de este estudio podrían aportar nuevas estrategias terapéuticas para mitigar la neuroinflamación en EA y otras enfermedades neurodegenerativas.

[1] Heneka MT, et al. Neuroinflammation in Alzheimer's disease. *Nature Reviews Immunology*, 2025.
[2] Díaz-Amarilla J, et al. Inflammatory profile and neurotoxicity of 3xTg-AD astrocytes. *Neurochemistry International,* 2022.
[3] Xu T, et al. The NLRP3 inflammasome: emerging role in neuroinflammation and CNS diseases. *Cellular & Molecular Immunology*, 2025.

Moléculas que modulan el cerebro: buscando nuevos inhibidores de la D-aminoácido oxidasa

Clara Bianchi[1], Williams Porcal[1,2], Gloria V. López[1,2], Mariana Ingold[1]

[1]Laboratorio de Síntesis Orgánica y Desarrollo de Fármacos, Instituto Pasteur de Montevideo.

[2]Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República.

cbianchi@pasteur.edu.uy

Actualmente, la salud mental es un tema de gran relevancia: se estima que una de cada ocho personas en el mundo padece algún tipo de trastorno mental. Entre ellos, la esquizofrenia afecta aproximadamente a 24 millones de personas a nivel global. [1] Esta enfermedad se caracteriza por la presencia de delirios, alucinaciones y comportamientos sociales y emocionales alterados. Aunque existen tratamientos basados en antipsicóticos y terapia psicosocial, estos tienen eficacia limitada sobre ciertos síntomas como la apatía y el aislamiento, además de generar efectos adversos en muchos casos. [2] Esto ha impulsado la búsqueda de nuevas estrategias terapéuticas.

Entre los múltiples factores implicados en la aparición de la esquizofrenia se encuentran alteraciones en la neurotransmisión glutamatérgica y procesos inflamatorios en el sistema nervioso central. En particular, se ha observado que el mal funcionamiento del receptor N-metil-D-aspartato (NMDAR), fundamental para procesos como la memoria, el aprendizaje y la plasticidad sináptica, podría estar asociado a la enfermedad. Este receptor requiere no solo de glutamato, sino también de D-serina, un aminoácido que actúa como coagonista esencial. La D-serina es regulada por la enzima D-aminoácido oxidasa (DAAO), que la degrada mediante una reacción enzimática, limitando así su disponibilidad en la sinapsis. [3]

En este trabajo buscamos identificar nuevos inhibidores de la DAAO, con el objetivo de aumentar los niveles de D serina y mejorar la función del receptor NMDAR. Para ello, el objetivo es evaluar una quimioteca de más de 30 compuestos desarrollados en nuestro laboratorio, midiendo su capacidad para inhibir la actividad enzimática de la DAAO mediante ensayos *in vitro*. Estos ensayos se basan en la detección del peróxido de hidrógeno, un subproducto de la reacción, y permiten calcular la concentración inhibitoria media (IC_{50}) de cada compuesto y compararlos con inhibidores clásicos como el ácido benzoico. Se presentan avances en la puesta a punto del ensayo y la evaluación de la capacidad inhibidora de compuestos seleccionados, comparados con el inhibidor de referencia ácido benzoico.

[1] Organización Mundial de la Salud. (2020, 2 de junio). *Trastornos mentales*. https://www.who.int/es/news-room/factsheets/detail/mental-disorders

[2] Jauhar, S., Johnstone, M., & McKenna, P. J. (2022). Schizophrenia. *The Lancet, 399*(10323), 473–486. https://doi.org/10.1016/S0140-6736(21)01730-X

[3] Pollegioni, L., Sacchi, S., & Murtas, G. (2018). Human D-Amino Acid Oxidase: Structure, Function, and Regulation. *Frontiers in Molecular Biosciences, 5*, 107. https://doi.org/10.3389/fmolb.2018.00107

Noveno Encuentro Nacional de Química - ENAQUI9
Montevideo, 21 al 24 de octubre de 2025

Valorización de carnes uruguayas: péptidos menores a 5KDa

Micaela Escobal[1]; Guillermo de Souza[2]; Federico Wallace[1]; Santiago Luzardo[2]; Fernando Ferreira[1]; Rosario Durán[3]; Cristina Olivaro[2]

[1]*Espacio de Ciencia y Tecnología Química, Sede Tacuarembó Cenur Noreste, Universidad de la República, Tacuarembó, Uruguay*

[2]*Calidad de la canal y la carne, Instituto de Investigación Agropecuaria (INIA), Tacuarembó, Uruguay*

[3]*Unidad de Bioquímica y Proteómica Analíticas. Instituto de Investigaciones Biológicas Clemente Estable, Instituto Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay*

micaela.escobal@cut.edu.uy

En Uruguay, la carne bovina es uno de los principales productos de exportación, por lo que conquistar nuevos mercados y mantenerse en los actuales es un gran desafío. Desde la óptica del consumidor han adquirido gran relevancia los aspectos asociados a la salud humana. La degradación proteolítica miofibrilar, que ocurre en el proceso de maduración de la carne, resulta en la producción de péptidos diferentes, algunos de los cuales presentan bioactividad, antihipertensiva, antitrombótica, opioide, inmunomoduladora, antimicrobiana y antioxidante [1,2]. En el presente trabajo se estudió el contenido de péptidos libres de bajo peso molecular en el corte Bife angosto (BA) -*longissimus lumborum*, procedentes de novillos terminados a pasto. Previo al análisis, la carne fue madurada por 7 días (0-2ºC) y se realizó la cocción en grill a las muestras correspondientes en condiciones estandarizadas [3]. La extracción de los péptidos se realizó por ultrafiltración con membranas con tamaño de corte menor a 5 kDa del sobrenadante obtenido luego del tratamiento con ácido tricloroacético (7,5% p/v) del homogeneizado de BA [4]. Las muestras se analizaron por espectrometría de masa por infusión directa en un espectrómetro de masa LTQ Velos + ETD (Thermo, USA), y por nano HPLC-MS en un equipo Orbitrap (Thermo, USA). Los resultados obtenidos se analizaron en el programa PatternLab for Proteomics V [5], empleando una base de datos de proteínas bovinas (Bovine Bos Taurus), entre ellas troponina, nebulina, procolágeno, mioglobina y tropomiosina [6].

Se lograron detectar cerca de 70 péptidos en ambas muestras de carne, 42 de los cuales están presentes en las muestras crudas y cocidas. Estos resultados constituyen la primera información composicional de péptidos presentes en cortes de carne de ganado criado a campo en nuestro país, que permitirá estudios posteriores orientados a evaluar la actividad funcional de estos péptidos.

Referencias

[1] Bauchart et al. 2006. Meat Science, 74(4), 658–666. [2] Kitts & Weiler. 2003 Curr Pharm Des. 9(16), 1309-23. [3]American Meat Science Association, AMSA (2016). [4] Chamorro et al. 2014. Libro de resúmenes Iberolab Congreso Virtual Iberoamericano sobre Gestión de Calidad en Laboratorios pp 79-86. [5] Carvalho et al. 2016 Nat Protoc 11, 102–117. [6] The UniProt Consortium. 2025. Nucleic Acids Research, 53(D1), D609–D617.

Desarrollo de nitroalquenos bioactivos considerando principios de química verde

Lucia Colella [1,2]; Mariana Ingold [2]; Carlos Batthyány[2]; Gloria V. López[1,2]; Williams Porcal[1,2]

[1]*Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo 11800, Uruguay.*

[2]*Laboratorio de Síntesis Orgánica y Desarrollo de Fármacos, Instituto Pasteur de Montevideo, Montevideo 11400, Uruguay.*

lucia.ines.colella@gmail.com

Históricamente, la química sintética no ha priorizado el cuidado del ambiente entre sus objetivos. Sin embargo, la creciente conciencia ambiental a nivel global ha impulsado a químicas y químicos a diseñar productos y procesos que no solo sean eficaces desde el punto de vista económico y social, sino también sostenibles. En este contexto la Química Verde surge como una disciplina clave, enfocada en minimizar o eliminar el uso y la generación de sustancias peligrosas.

En esa línea, se han desarrollado metodologías sintéticas alternativas y más eficientes, como las reacciones multicomponente (MCRs), que permiten sintetizar compuestos complejos de manera más directa, reduciendo residuos, consumo energético y tiempo.[1] Un ejemplo clásico es la Reacción de Passerini, que combina un aldehído (o cetona), un isonitrilo y un ácido carboxílico para formar una α-aciloxiamida en un solo paso, con alta eficiencia atómica.[2]

Basándonos en estos antecedentes, ensayamos la reacción multicomponente de Passerini (3CR) utilizando derivados de ácidos carboxílicos aromáticos que contienen el agrupamiento bioactivo nitroalquenilo como sustituyente. Esta reacción, realizada en condiciones verdes (empleando disolventes sostenibles y activación energética), permitió obtener nuevas moléculas con potencial actividad biológica, especialmente por el carácter electrofílico del grupo nitroalquenilo.

Posteriormente, se evaluó la capacidad de los compuestos obtenidos para modular el inflamasoma NLRP3, un complejo proteico clave en la activación de citoquinas proinflamatorias como IL-1β e IL-18, involucradas en procesos inflamatorios y enfermedades asociadas.[3] De esta forma, se generaron nuevos derivados de arilnitroalqueno en condiciones verdes como potenciales agentes antiinflamatorios no convencionales.

---

[1] Kazemizadeh, A.R.; Ramazani, A. *Curr. Org. Chem*. 2012, 16(4): 418-450.
[2] Ingold, M; López, G.V.; Porcal, W. *ACS Sustainable Chem. Eng*. 2014. *2*: 1093-1097; Zhang, W.; Cue, B.W. Multicomponent Reactions in *Green Techniques for organic Synthesis and Medicinal Chemistry*. John Wiley and Sons, Ltd. 2012. Cap. 18. pp. 497-522.
[3] Duewell, P.; Kono, H.; Rayner, K.J. *et al. Nature 2010, 464, 1357-1361.*

Desarrollo de una metodología para la determinación y cuantificación de aminoácidos en diversas matrices por ^{19}F-RMN.

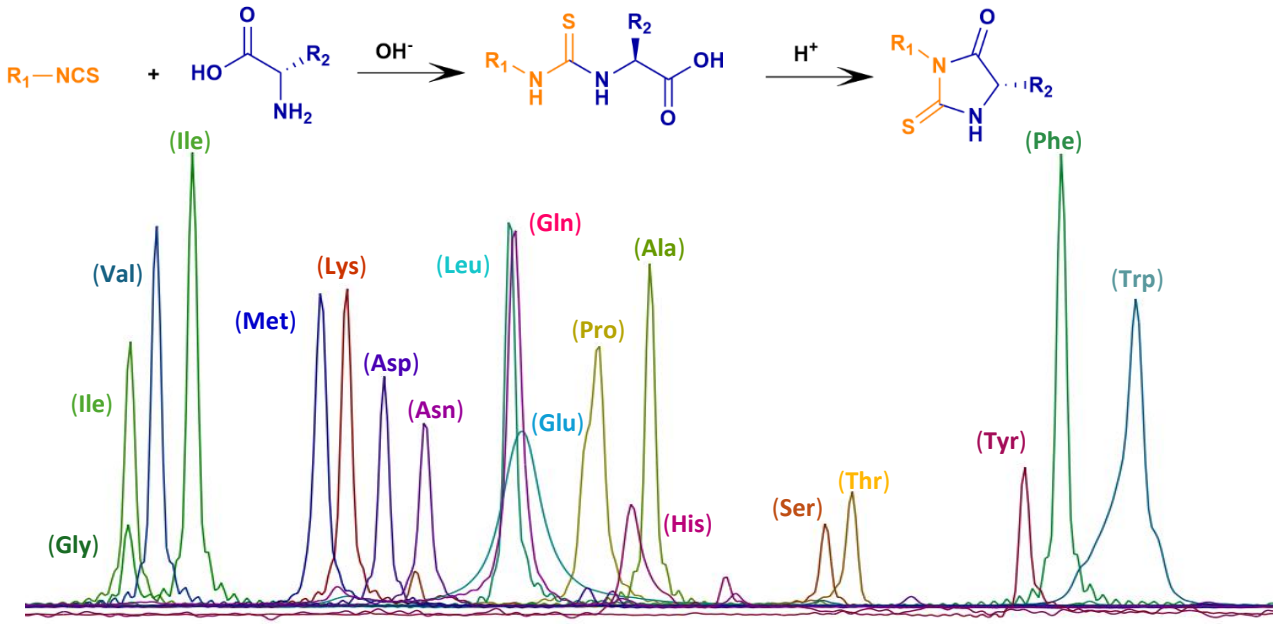
Julieta Wagner[1,2]; Guillermo Valdomir[1]; Gonzalo Hernandez[2]

[1]*Laboratorio de Química Farmacéutica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Resonancia Magnética Nuclear, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

gonzalohd@fq.edu.uy

Los aminoácidos son moléculas orgánicas que participan de muchos procesos biológicos que suceden a nivel del organismo y en la industrialización de diferentes productos. La determinación de aminoácidos nos permite identificar, cuantificar y monitorear estos procesos de forma de evaluar la calidad de muchos productos alimenticios o diagnosticar enfermedades. En este trabajo se plantea realizar la determinación y cuantificación de aminoácidos esenciales utilizando una metodología que consiste en dos pasos; la derivatización química con un agente fluorado y luego su cuantificación por ^{19}F-RMN. En este caso se decidió utilizar como reacción de derivatización la propuesta por Iwata y colaboradores, en la cual se hace reaccionar a los aminoácidos en medio básico con el isotiocianato fluorado para formar una tiourea que luego en medio acido se cicla a la tiohidantoína correspondiente, en un sistema one pot.[1] Luego, se realiza la determinación y cuantificación utilizando ^{19}F-RMN. Se logro realizar la reacción de derivatización para diecinueve de los veinte aminoácidos y se vio que era posible diferenciarlos por su desplazamiento de ^{19}F.



[1] *Iwata, T.; Mitoma, H.; Yamaguchi, M. Anal. Chim. Acta* ***2000****, 416, 69-75.*

Evaluación de actividad antioxidante de extractos de diferentes variedades de *Cannabis sativa* L.

Camila Bertinat[1]; Nahuel Cabrera[1]; Florencia Mahy[1]; Victoria Giorgi[1]; Carlos García[1]; Santiago Fernández[1]

[1]*Laboratorio de Farmacognosia y Productos Naturales, Departamento de Química Orgánica (DQO), Facultad de Química, Universidad de la República (UdelaR), Montevideo, Uruguay.*

sfg@fq.edu.uy

El cannabis (*Cannabis sativa* L.) es una planta ampliamente distribuida en el planeta, que ha proporcionado al hombre una fuente de fibra, alimentos, aceite, medicinas y estupefacientes desde hace miles de años (1). Esta especie produce un gran número de metabolitos secundarios, entre los que se destacan una amplia variedad de antioxidantes, incluidos cannabinoides, flavonoides y compuestos fenólicos, los cuales ofrecen importantes beneficios para la salud.

El objetivo de este estudio fue evaluar el perfil antioxidante de extractos obtenidos a partir de inflorescencias de *Cannabis sativa* L. pertenecientes a cuatro variedades distintas (α, β, A y B), clasificadas según su quimiotipo predominante en Δ9-tetrahidrocannabinol (Δ9-THC), cannabidiol (CBD) o intermedios. Los perfiles de cannabinoides fueron previamente caracterizados.

Se analizaron extractos preparados con diferentes solventes de extracción (metanol, metanol:cloroformo y agua), mediante dos ensayos *in vitro*: la capacidad de absorción de radicales de oxígeno (ORAC) y el ensayo de neutralización del radical 2,2-difenil-1-picrilhidrazilo (DPPH) (2,3). En ambos ensayos se empleó Trolox como control positivo.

Los resultados obtenidos mediante los dos métodos aplicados muestran diferencias en la capacidad antioxidante de las muestras según el solvente de extracción utilizado.

1) Clarke RC, Merlin MD. *Cannabis: Evolution and Ethnobotany*. Plant Ecol Evol. 2013;147(1):149.
2) Gulcin I, Alwasel SH. DPPH radical scavenging assay. Processes. 2023;11(7):2248.
3) Cásedas G, Moliner C, Maggi F, Mazzara E, López V. Evaluation of two different *Cannabis sativa* L. extracts as antioxidant and neuroprotective agents. Front Pharmacol. 2022;13:1009868

Synthesis of 4-quinolone-3-hydroxamic acids derivatives with potential anti-Alzheimer activity

Joice C. de O. Andrade[1,2]; Mayra da S. Coutinho[1,2]; Pedro N. Batalha[1,2]; Maria C. B. V. de Souza[1]; Marcela C. de Moraes[3]; Fernanda da C. S. Boechat[1]

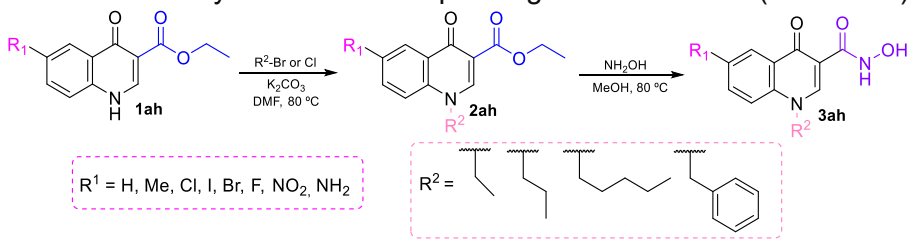
[1]Laboratório de Nucleosídeos, Heterociclos e Carboidratos (LNHC), Departamento of Organic chemistry, Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Brasil

[2]Grupo de pesquisas em síntese orgânica e materiais moleculares (LABSOMM), Departamento of Organic chemistry, Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Brasil

[3]Grupo de cromatografia de bioafinidade e química ambiental (BIOCROM), Departamento of Organic chemistry, Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Brasil

joicecristina@id.uff.br

Alzheimer's disease (AD) is a chronic and progressive neurodegenerative disorder, likely of multifactorial origin. It is characterized by cognitive decline and accounts for approximately 80% of dementia cases in individuals over 65 years old. Given its high mortality rate and the projected increase in cases by 2050, the search for bioactive substances for AD treatment remains a major focus in Medicinal Chemistry[1]. In this context, 4-quinolone derivatives and the hydroxamic acid functional group (HA) have emerged as a promising scaffold for the development of anti-Alzheimer agents, due to data regarding their action against neurodegenerative diseases, also being associated with the inhibition of the AChE enzyme[2]. Therefore, this work aims is the structural modification of the 4-quinolone core **2a-i** through the introduction of the HA moiety to obtain corresponding derivatives **3a-i** (Scheme 1).



Scheme 1. Synthesis of 4-quinolone-3-hidroxamic acid derivatives **2a-i**.

The HA derivatives obtained were synthesized through a nucleophilic substitution reaction at the ester group **2a-i** using the hydroxylamine obtained by treating $NH_2OH.HCl$ with KOH in methanolic medium as the nucleophile. The synthesis resulted in 23 substances (22-85%), which were subsequently structurally characterized by physical analysis methods. These substances were subjected to the Ellman method for the inhibitory study of the AChE enzyme, using Donepezil as a reference, and the inhibition exhibited values between 4 and 84%. Thus, the synthesis and the inhibitory study towards AChE showed promising results, and the molecular docking studies and calculation of the IC_{50} of the AH will be further investigated.

References

1.Qiu, W. Q.e M. F. Folstein. Neurobiology of Aging, v. 27, n. 2, p. 190-198, 2006.

2.Aleksandrova, Y. et al. International Journal of Molecular Sciences, v.24, n. 11, 2023.

Desarrollo de Red-B, una nueva sonda de peroxinitrito para el estudio de las respuestas oxidativas dependientes del oxígeno

Josefina Pereyra [1,2]; Carolina Prolo[1,2]; Rafael Radi[1,2]; Natalia Rios[1,2]

[1]Departamento de Bioquímica, Facultad de Medicina, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

[2]Centro de Investigaciones Biomédicas, Facultad de Medicina, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

josefina.pereyra@fmed.com

En la última década ha habido un gran aumento en el desarrollo de sondas fluorescentes para la detección selectiva de oxidantes presentes en sistemas biológicos. El peroxinitrito ($ONOO^-$), producto de la reacción entre óxido nítrico ($^{\bullet}NO$) y superóxido ($O_2^{\bullet-}$), es un agente nitrante y altamente oxidante capaz de generar daño a nivel molecular. La detección de peroxinitrito se ha conseguido con el desarrollo de sondas derivadas de ésteres y ácidos borónicos las cuales son cinéticamente selectivas para esta especie. Si bien los boronatos derivados de cumarinas (CBA/CBE) y de fluoresceína (FI-B) son ampliamente utilizados, están limitados por sus propiedades espectroscópicas, y su labilidad frente a cambios en el pH y cambios en la presión parcial de oxígeno. Por lo tanto, en este trabajo planteamos el desarrollo de dos nuevas sondas para la detección de peroxinitrito que tienen en cuenta estos cambios a nivel del microambiente celular, permitiendo complementar y ampliar el uso de los boronatos habituales. Red-BI y su análogo estructural Red-BII son derivados de éster y ácido borónico respectivamente, acoplados a xanteno. Su ruta de síntesis comienza con la reacción de 3-*N,N*-dietilaminoetanol con malonato de bis(2,4,6-triclorofenilo) generando 7-dietilamino-4-hidroxicumarina (R=50%). Se hidroliza en medio ácido para obtener el derivado acetofenona (R>99%). Este producto es tratado con resorcinol para formar el *core* de xanteno, el cual coincide con el fluoróforo de Red-BI (Red-OxI) (R=20%). Para la síntesis de Red-BI se hace reaccionar a Red-OxI con anhídrido tríflico para obtener el correspondiente derivado trifluorometanosulfoniloxi? (R=40%). A dicho compuesto se lo trató con *bis*(pinacolato)diboro en presencia de catalizador de Pd para generar el correspondiente éster borónico (Red-BI). Para la síntesis de Red-BII, se realiza una metilación previa a Red-OxI utilizando *p*-toluensulfonato de metilo (R=33%). Luego se lo hace reaccionar con el ácido *p*-formilfenil borónico en medio ácido extendiendo el sistema π-conjugado para formar Red-BII. Estamos optimizando las mejores condiciones de reacción de esta última etapa. Realizamos el estudio de las propiedades espectroscópicas de Red-OxI: $\lambda_{exc/em}$=511nm/538nm, $\boldsymbol{\varphi}_F$= 0,0924, ε_{511nm}= 67,000$M^{-1}cm^{-1}$ y pKa≃5.5. Caracterizamos la cinética de la reacción de Red-BI con H_2O_2 determinando k_{25^oC} =(0,58 ± 0,07) $M^{-1}.s^{-1}$. Resultados preliminares permiten evidenciar que la reacción con peroxinitrito es dependiente de la concentración del oxidante. El estudio de la distribución intracelular de Red-BI, así como la eficiencia de Red-OxI en sistemas celulares expuestos a distintas presiones pO_2, y la caracterización de Red-BII y su fluoróforo Red-OxII permitirá completar su validación para sus futuras aplicaciones en sistemas biológicos.

[1] Poronik, Y. et al. *Dyes and Pigments*, 2007, 72(2), 199–207. [2] Rios, N. et al. *Free Radical Biology & Medicine*, 2016, *101*, 284–295.

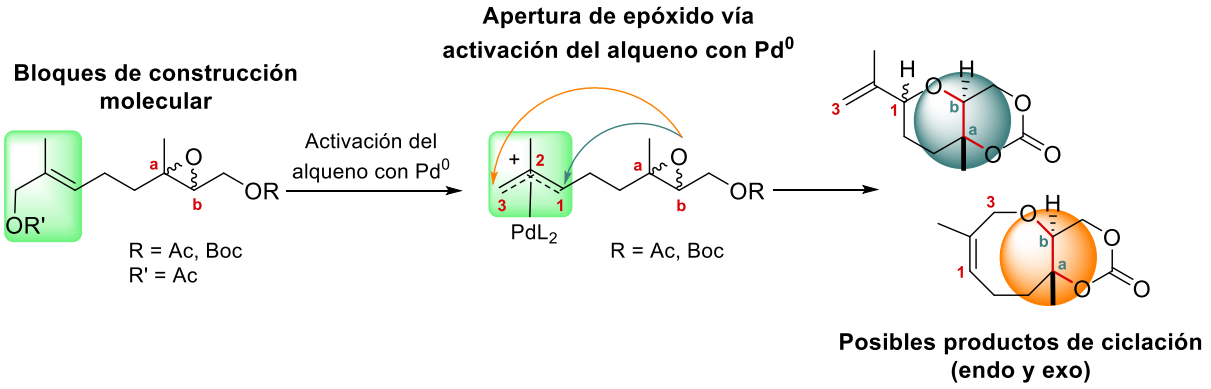
Aproximación a la síntesis de éteres cíclicos basados en productos naturales

Lucía Galeazzi[1]; Ana Bellomo[2,3]; Margarita Brovetto[1]

[1]Laboratorio de Síntesis Orgánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.
[2]Departamento de Ingredientes Activos y Biorrefinerías, Instituto Nacional de Tecnología Industrial, Buenos Aires, Argentina.
[3]Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina.

lgaleazzi@fq.edu.uy

Los éteres policíclicos constituyen una familia de compuestos con una fascinante diversidad estructural y una amplia variedad de actividades biológicas (antibiótica, antifúngica[1], anticancerígena[2], entre otras). Estos sistemas están conformados por unidades de éteres cíclicos de tamaño medio, cuya síntesis continúa siendo un desafío por las dificultades entrópicas y entálpicas asociadas a las estrategias de ciclación[3,4]. En este trabajo se presentan los avances en la síntesis de una quimioteca de éteres cíclicos basados en productos naturales, empleando epóxidos monoterpénicos como unidades de construcción y sus correspondientes reacciones de oxaciclación para la generación de anillos (ver figura). Hasta el momento, se sintetizaron los epóxidos de interés a partir de geraniol, con muy buenos rendimientos y elevados excesos enantioméricos. Se exploró la ciclación de estos compuestos empleando la reacción de Tsuji–Trost mediada por paladio, con el objetivo de lograr la activación controlada del doble enlace para la formación estereoselectiva de estructuras tipo oxaciclo. Se mostrarán los avances obtenidos hacia la síntesis de las estructuras propuestas, destacando la importancia del catalizador de paladio empleado, junto con los ligandos fosforados y aditivos que favorecen el ataque nucleofílico del oxígeno presente en el epóxido. Se plantea emplear la metodología HTE (High Throughput Experimentation) para optimizar las condiciones de la reacción de oxaciclación.



(1) Rutkowski, J.; Brzezinski, B. *BioMed Research International* **2013**, *2013*, 1–31. (2) Satake, M.; Shoji, M.; Oshima, Y.; Naoki, H.; Fujita, T.; Yasumoto, T. *Tetrahedron Letters* **2002**, *43* (33), 5829–5832 (3) Snyder, N. L.; Haines, H. M.; Peczuh, M. W. *Tetrahedron* **2006**, *62* (40), 9301–9320. (4) Elliott, M. C. *J. Chem. Soc., Perkin Trans. 1* **2000**, No. 9, 1291–1318.

Estudio preliminar de la actividad acaricida de una quimioteca sobre diferentes estadios de *Rhipicephalus microplus*

Inés Telles[1]; Macarena Eugui[1]; Lucía Pareja[1]; Mariana Ingold[2]; Victoria de la Sovera[2,3]; Tiago Tassano[3]; Virginia López[2,3]; Williams Porcal[2,3]; Mauricio Cabrera[4]

[1]Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, Universidad de la República, Ruta 3 Km 363, Paysandú, Uruguay.[2]Laboratorio de Síntesis Orgánica y Desarrollo de Fármacos, Instituto Pasteur de Montevideo, Uruguay. [3]Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República.[4]Laboratorio de I+D de Moléculas Bioactivas, Departamento de Ciencias Biológicas, CENUR Litoral Norte, Universidad de la República, Ruta 3 Km 363, Paysandú, Uruguay

tellesi@fq.edu.uy

La garrapata común del ganado, *Rhipicephalus microplus*, es una de las parasitosis más relevantes en Uruguay por su impacto sanitario y las pérdidas económicas asociadas. Este ectoparásito, vector de *Anaplasma marginale* y *Babesia bovis*, causa el complejo "tristeza del ganado", que puede provocar abortos, baja productividad e incluso la muerte animal [1]. Su presencia endémica compromete la sanidad nacional, afectando a aproximadamente el 36 % de los establecimientos pecuarios [2], con pérdidas estimadas en al menos 40 millones de dólares anuales [2]. La creciente resistencia a acaricidas ha reducido la eficacia de los tratamientos disponibles, elevando costos y riesgos ambientales [2,3]. Este escenario, agravado por la falta de diagnóstico y el uso inadecuado de principios activos, resalta la urgencia de identificar nuevas moléculas con actividad acaricida, clave para la sanidad animal y la sostenibilidad del sector ganadero. Actualmente, muchos de los acaricidas utilizados presentan eficacia reducida debido al desarrollo de resistencia. Esta situación suele estar asociada al uso inadecuado de los productos, que expone a las garrapatas a concentraciones subletales, favoreciendo la selección de cepas resistentes. Esta problemática impulsa la búsqueda de nuevas moléculas con actividad acaricida. En este trabajo se evaluaron 32 compuestos orgánicos pertenecientes a una quimioteca diversa conteniendo, derivados de imidazoheterociclos, derivados de furano y bis-amidas desarrollada por el grupo del Laboratorio de Síntesis Orgánica y Desarrollo de Fármacos (IPMOn). La actividad acaricida fue analizada mediante dos bioensayos estándar que abarcan distintos estadios de *Rhipicephalus microplus*: el test de inmersión de adultas (TIA) y el test de inmersión de larvas (TIL). Ambos ensayos se realizaron a dosis fija, utilizando ivermectina y amitraz como controles positivos para larvas y adultas, respectivamente. Además, se llevaron a cabo ensayos de citotoxicidad en espermatozoides bovinos. En el test de inmersión de larvas, 7 de los 32 compuestos mostraron porcentajes de mortalidad mayor al 10%, por lo que fueron seleccionados para la determinación de su concentración inhibitoria media (IC_{50}). En el test de inmersión de adultas, de los 16 compuestos ensayados, los porcentajes de eclosión se ubicaron entre el 78 y 98%, evidenciando muy poca a casi nula susceptibilidad a los compuestos analizados. Estos resultados preliminares contribuyen a la identificación de nuevas moléculas con potencial acaricida y resaltan la importancia de continuar en la búsqueda de nuevas moléculas con actividad anti Rhipicephalus microplus.

1- Venzal, J.M.; Castro, O.; Cabrera, PA.; de Souza, C. G ; Guglielmone, A.A. *Veterinaria, (Montevideo)* **2003**,*38 (150-151) 17-28*
2- Miraballes, C.; Riet-Correa, F.; Castro-Janer, E. *Exp. Appl. Acarol.* **2019**, *78*, 481–497. https://doi.org/10.1007/s10493-019-00405-0
3- Rodríguez-Vivas, R. I.; Jonsson, N. N.; Bhushan, C. *Pathogens,* **2022**, *11*, 1180. https://doi.org/10.3390/pathogens11101180.

Optimización de la síntesis de ciclotetrapéptidos análogos a productos naturales con acción herbicida e inhibidores de cianobacterias

Victoria Scorza; Camila Irabuena; Laura Posada; Gloria Serra

Laboratorio de Química Farmacéutica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

victoriascorza2@gmail.com

En los últimos años, el uso intensivo y prolongado de herbicidas en cultivos ha favorecido la proliferación de cianobacterias. Estos productos afectan la microbiota del suelo, reducen su fertilidad, dejan residuos tóxicos que contaminan el agua y generan consecuencias ambientales y para la salud humana. Además, su uso reiterado favorece la resistencia de las malezas, lo que obliga a aumentar las dosis o buscar alternativas más potentes[1].

Por esta razón el Laboratorio de Química Farmacéutica se ha orientado al diseño y síntesis de nuevos ciclopéptidos con actividad herbicida, análogos a compuestos naturales. El objetivo principal es generar herbicidas más específicos y amigables con el ambiente, que puedan ser una alternativa sostenible frente a los productos tradicionales[2].

El presente trabajo busca optimizar el proceso de obtención de aquellos péptidos y ciclopéptidos que se han mostrado como buenos herbicidas e inhibidores de cianobacterias, tales como el péptido lineal y ciclopéptido con secuencia *N*-MeAla-Leu-Phe-Gly. La síntesis de los péptidos lineales se realiza de acuerdo con la metodología de síntesis de péptidos en fase sólida (SPPS) y estrategia Fmoc, estos péptidos lineales son luego ciclados en solución, el esquema general se encuentra representado en la Figura 1. La optimización se enfoca principalmente en la etapa de macrociclación, para la cual se proponen modificaciones a nivel de tipo de agente acoplante empleado, solvente y concentración de dilución.

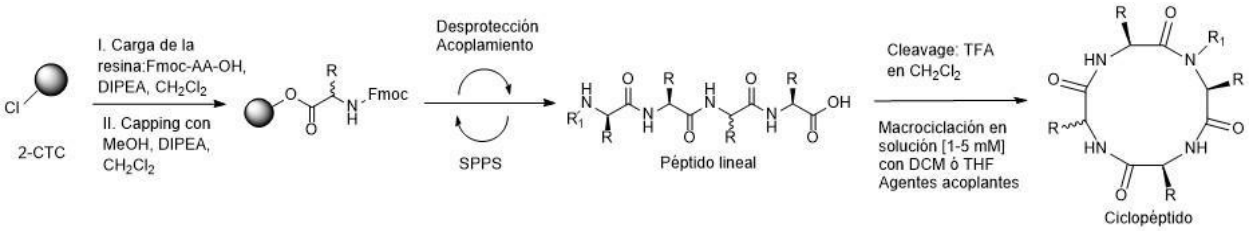


Figura 1. Procedimiento general. R: cadena lateral de AAs. R_1: H ó CH_3

[1] Campi Goyes, J. H. (2023). *Dinámica de los herbicidas en el suelo* (Bachelor 's thesis, BABAHOYO: UTB, 2023)

[2] (a) Irabuena, C., Posada, L., Colombo, S., Aubriot, L., Rey, L., Villalba, J., Badagian, N., Brena, B., Scarone, L., Davyt, D., & Serra, G.)*ACS Omega*, **2024**, *9* (18), 20167–20175. (b) Irabuena, C., Posada, L., Rey, L., Scarone, L., Davyt, D., Villalba, J., & Serra, G. *Molecules*, **2022**, *27* (21), 7350. (c) Posada, L.; Rey, L.; Villalba, J.; Colombo, S.; Aubriot, L.; Badagian, N.; Brena, B.; Serra, G. *ChemistrySelect*, **2022**, *7* (27), e202201956.

Desarrollo de una síntesis estereoselectiva, concisa y eficiente, para la preparación de (-)-MK7607 y 1-*epi*-(-)-MK7607

Isabella Jauregui; Pierina Shiappapietra; Federico Rodriguez; Estefanía Dibello; Daniela Gamenara

Laboratorio de Síntesis Orgánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

isabellajaureguis04@gmail.com

Los carbazúcares son miméticos de carbohidratos en los que el átomo de oxígeno del anillo se sustituye por carbono, mejorando su estabilidad metabólica y resistencia a la hidrólisis. Esta modificación los convierte en candidatos terapéuticos prometedores, ya que imitan los azúcares naturales sin degradarse enzimáticamente.[1] Poseen diversas actividades biológicas, como efectos antimicrobianos, antitumorales e inhibición de glicosidasas, relevantes en enfermedades como diabetes, cáncer y trastornos lisosomales.[2] Basándonos en nuestra experiencia en metodologías quimioenzimáticas,[3] hemos aplicado este enfoque para desarrollar una síntesis eficiente de los hidroximetil conduritoles (-)-MK7607 y 1-*epi*-(-)-MK7607. En este trabajo, proponemos una ruta sintética para la preparación de ambos compuestos, utilizando como material de partida el *cis*-ciclohexadienodiol obtenido en forma enantiopura a partir de acetato de bencilo, mediante biotransformación con la cepa recombinante *E. coli* JM109 (pDTG601). Este abordaje aprovecha nuestras capacidades establecidas en transformaciones enantioselectivas, ofreciendo un acceso práctico a estos valiosos análogos de carbohidratos.

[1] S. Roscales, J. Plumet, *Int. J. Carbohydr. Chem.* **2016**, *2016*, 1–42.
[2] O. Arjona, A. M. Gómez, J. C. López, J. Plumet, *Chem. Rev.* **2007**, *107*, 1919–2036.
[3] V. Schapiro, M. Brovetto, I. Carrera, D. Gamenara, D. González, E. Pandolfi, G. Seoane, *Asian J. Org. Chem.* **2022**, *11*, e202200530.

Carboranos como bioisósteros no clásicos del grupo fenilo en inhibidores del receptor del factor de crecimiento epidérmico (EGFR).

Pablo Vignolo; Belén Dávila; Marcos Couto

Grupo de Química Orgánica Medicinal, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay
pvignolo@fcien.edu.uy

Los dicarba-*closo*-dodecaboranos son compuestos icosaédricos de fórmula $C_2B_{10}H_{12}$. Son moléculas muy apolares y voluminosas, con alta superficie específica y aromaticidad en 3D. Su estabilidad metabólica y posibilidad de funcionalización en tres dimensiones los han vuelto farmacóforos atractivos en los últimos años, en particular como bioisósteros del grupo fenilo. Según la posición relativa de los átomos de carbono en el clúster se definen los tres isómeros orto (1,2), meta (1,7) y para (1,12). [1]

El presente trabajo abarca el diseño, síntesis y caracterización fisicoquímica y biológica de diferentes análogos del erlotinib (fármaco antitumoral inhibidor de la tirosina quinasa EGFR) generados por acoplamientos de tipo Buchwald-Hartwig entre halocarboranos y 6,7-bis(2-metiloxietiloxi)-4-aminoquinazolina. Se pretende que el remplazo bioisostérico fenil-carborano mejore las interacciones en el sitio de unión, potenciando los efectos antitumorales de las moléculas. [2]

Hasta el momento, se han sintetizado con éxito los productos del acoplamiento B-N con los isómeros meta y para (denotados BNm y BNp, respectivamente). El isómero orto no logró obtenerse por ninguna de las metodologías sintéticas reportadas en la literatura, por lo que se están explorando diferentes sistemas catalíticos que permitan generar el enlace B-N correspondiente.

Los compuestos resultaron no mutagénicos por test de Ames, y estables por HPLC-MS luego de incubación durante 24 horas a pH 2, 7.4 y 8.6. Se realizaron ensayos de citotoxicidad en las líneas celulares U-87MG, F98 y C6 para el compuesto BNm, resultando en valores de IC_{50} del mismo orden de magnitud, similares o menores, con respecto al erlotinib. Adicionalmente, se determinó por citometría de flujo que tanto BNm como BNp causan la muerte de las células por apoptosis, de igual modo que el compuesto de referencia. Por otro lado, los ensayos enzimáticos con EGFRwt mostraron dosis respuesta para ambos compuestos. Se obtuvo un resultado novedoso en cuanto a BNp, el cual, a diferencia del erlotinib, mostró también dosis respuesta para la enzima mutante T790M. El sitio de unión de los compuestos en el sitio catalítico de la quinasa fue verificado por *docking* y dinámica molecular. Finalmente, estudios de toxicidad oral aguda de BNp en ratones mostraron resultados favorables, con una LD_{50} superior a los 2000 mg/kg. Actualmente se está estudiando la lipofilia de los compuestos, así como también su capacidad atravesar el epitelio intestinal por ensayo de permeabilidad con células Caco-2.

[1] Scholz, M., Hey-Hawkins, E. *Chem. Rev.*, **2011**,111, 7035-7062.

[2] Useini, L., Mojić, M., Laube, M., Lönnecke, P., Dahme, J., Sárosi, M. B., Mijatović, S., Maksimović-Ivanić, D., Pietzsch, J., y Hey-Hawkins, E., *ChemMedChem,* **2022**, 18, e202200583.

Inhibidores de Mpro del SARS-CoV-2: estudio de selenosemicarbazonas y tiosemicarbazonas

Florencia Rocca[1]; Santiago Rostan[2]; Lucía Otero[2]; Jonathan Bastidas[3]; Martín Fló[4]; Andrea Medeiros [3]; Marcelo Comini[3]; Graciela Mahler[1]

[1]Laboratorio de Química Farmacéutica, DQO, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

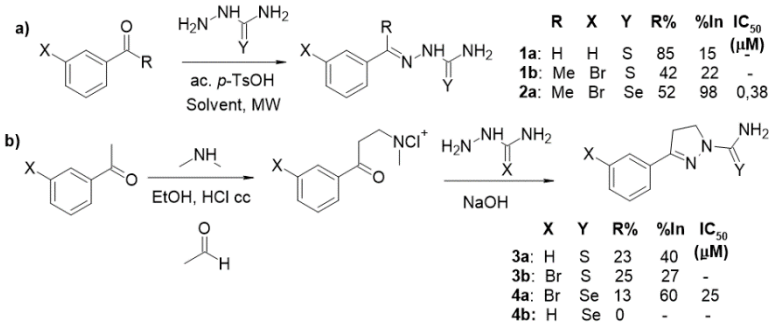
[2]Laboratorio de Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

[3]Laboratorio de Biología Redox de Tripanosomátidos, Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay

[4]Laboratorio de Inmunovirología, Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay

florenciarocca068@gmail.com

El SARS-CoV-2, agente etiológico del COVID-19, codifica para dos cisteín proteasas: la tipo quimotripsina o principal (MPro) y la tipo papaína (PLPro). MPro está altamente conservada entre variantes virales, y es un blanco atractivo para el desarrollo de antivirales de amplio espectro.[1]



	R	X	Y	R%	%In	IC_{50} (μM)
1a:	H	H	S	85	15	-
1b:	Me	Br	S	42	22	-
2a:	Me	Br	Se	52	98	0,38

	X	Y	R%	%In	IC_{50} (μM)
3a:	H	S	23	40	-
3b:	Br	S	25	27	-
4a:	Br	Se	13	60	25
4b:	H	Se	0	-	-

En este trabajo se reporta la síntesis y caracterización de una serie de nuevas tio- (**1**) y seleno-semicarbazonas (**2**) como potenciales inhibidores de MPro. Estas estructuras fueron seleccionadas en base a resultados previos del grupo frente a otras cisteín-proteasas, y a similitudes estructurales con inhibidores conocidos de MPro.[2] Los compuestos fueron sintetizados utilizando un reactor Monowave a 70ºC, obteniéndose buenos rendimientos (42-85%) (Fig. a). También se prepararon análogos cíclicos, tio- y seleno-pirazolinas (**3** y **4**), con el fin de evaluar el impacto de la rigidez conformacional sobre la actividad (Fig b). Los compuestos fueron evaluados contra MPro recombinante a 25 μM, y a los que mostraron una inhibición > 50%, se les determinó su IC_{50}. El compuesto, **2a** resultó ser el más activo, superando tanto a sus análogos azufrados como al resto de la serie. En general los compuestos azufrados fueron más activos en su forma rígida, mientras que el compuesto con selenio presentó una menor actividad al estar ciclado. Adicionalmente, se realizaron estudios para caracterizar el modo de unión de **2a** a MPro, mediante incubación con la enzima y análisis por LC-MS. Se propusieron inicialmente dos mecanismos de unión y no se detectaron aductos escindidos del ligando. Los resultados obtenidos motivan a estudios bioquímicos y teóricos de docking adicionales, con el fin de confirmar el modo de interacción de estos ligandos con la enzima.

[1] Zhang, L. et al. **Science**, 2020, *368*(6489), 409–412. [2] Rostán, S. (2025). *Diseño racional de complejos metálicos con ligandos híbridos cumarina-tiosemicarbazona como potenciales fármacos para el tratamiento de enfermedades infecciosas* (Tesis de doctorado). Facultad de Química, UdelaR, Uruguay.

Búsqueda de moléculas con potencial de modular vías neuroinflamatorias implicadas en la Enfermedad de Alzheimer

Victoria Valiente[1]; Tiago Tassano[1]; Williams Porcal[2]; Eduardo Savio[1]; Florencia Arredondo[1]; Rosina Dapueto[1]

[1]Área I&D Biomédico, Departamento de Radiofarmacia, Centro Uruguayo de Imagenología Molecular, Montevideo, Uruguay.
[2]Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.
vivaliente729@gmail.com

La Enfermedad de Alzheimer (EA) es la causa más común de demencia, representando entre el 60–70% de los casos. Se caracteriza por pérdida de memoria, deterioro cognitivo y desorientación temporoespacial. Desafortunadamente, las terapias actuales solo tienen efectos paliativos. Patológicamente, se caracteriza por la presencia de depósitos extracelulares del péptido beta-amiloide y ovillos neurofibrilares intraneuronales formados principalmente por la proteína Tau hiperfosforilada, lo cual, junto con el desencadenamiento de un proceso inflamatorio, conduce a la neurodegeneración progresiva. Las células gliales, especialmente microglías y astrocitos, juegan un papel clave en este proceso inflamatorio, mediado en parte por la activación crónica de inflamasomas, particularmente del inflamasoma 3 de la familia NLR (Nod-like receptors) (NLRP3) y la liberación de citoquinas proinflamatorias[1]. La enzima mitocondrial monoamino oxidasa A (MAO-A) se ha relacionado con la EA ya que se ha encontrado alterada en el hipocampo de pacientes que padecen esta enfermedad y se ha descripto su implicancia en el desarrollo de la neuroinflamación[2]. De hecho, inhibidores de MAO-A, como la molécula harmina, han mostrado efectos antiinflamatorios y neuroprotectores en animales. Este trabajo tiene como objetivo desarrollar un modelo celular in vitro que recapitule la interacción de las células gliales con las neuronas, así como también estudiar el efecto de la inhibición del eje MAO-A-inflamación. Obtuvimos eficientemente cultivos primarios de ratón derivados de corteza e hipocampo enriquecidos en microglías, astrocitos y neuronas, lo cual se confirmó mediante inmunocitoquímica. Cuando tratamos los cultivos de microglías con un estímulo inflamatorio (LPS y/o ATP) se pudo determinar un aumento en la expresión de moléculas inflamatorias como NLRP3, TNF-α e IL-1β y la activación del factor de transcripción NF-κB. Preliminarmente, pudimos observar que cuando las microglías fueron tratadas con harmina 10 μM previo al estímulo, los niveles de IL-1β liberados al medio disminuyeron significativamente. A su vez, demostramos que el medio condicionado de astrocitos previamente expuesto al medio condicionado de microglías estimuladas con LPS/ATP es tóxico para los cultivos neuronales. En suma, esperamos contar con una nueva herramienta terapéutica para la EA.

1. Heneka, M. T. et al. NLRP3 is activated in Alzheimer's disease and contributes to pathology in APP/PS1 mice. Nature 493, 674–678 (2013).
2. Syed, A. U. et al. Comparison of Monoamine Oxidase-A, Aβ Plaques, Tau, and Translocator Protein Levels in Postmortem Human Alzheimer's Disease Brain. Int. J. Mol. Sci. 24, (2023)

Posters

Sesión 2 (Miércoles 22/10 – 17:30-19:00)

S2.P01_BQ Angie Álvarez - *Diversidad de especies de Fusarium causantes de infección en granos de cebada y caracterización genómica de una nueva especie*

S2.P02_BQ Belén Abella - *Monitoreo de bacterias patógenas y genes de resistencia antimicrobiana en afluentes y efluentes de planta de tratamiento de aguas residuales*

S2.P03_BQ Nicol Denis - *Microbioma asociado a genotipos de papa con resistencia diferencial a la sarna común*

S2.P04_BQ Gabriela González Soler - *Optimización de condiciones de crecimiento para las cepas nativas Saccharomyces cerevisiae T19-3FS y Starmerella bacillaris T19-3MS*

S2.P05_BQ Victoria Gómez - *Caracterización de las alteraciones en el metaboloma hepático en un modelo experimental de Síndrome Metabólico*

S2.P06_BQ Gerardo Viera - *Bacterias no cultivables del filo Chloroflexota en sistemas de tratamiento de aguas residuales de lodos activados de Uruguay*

S2.P07_BQ Erika Arbildi - *Optimización de las condiciones de producción de tanasa por Aspergillus uvarum en residuos de té verde*

S2.P08_BQ Diego Carvalho - *Modelado del receptor de la hormona concentradora de melanina (MCHR1) de rata*

S2.P09_BQ René Cardeña - *Celdas de combustible microbiana utilizando un sistema microalga-bacteria en el cátodo*

S2.P10_BQ Federico Di Stefano; Patricia Berasain - *Valoración de la utilidad de los anticuerpos comerciales anti CD9, CD63 y TSG101 para la identificación de vesículas extracelulares mediante estudios in silico*

S2.P11_BQ Santiago Bustamante - *Regulación de la expresión de una manosil transferasa de Saccharomyces cerevisiae por CRISPR*

S2.P12_FQ Luana Bentancor; Inés Ballestié - *Estudios de adsorción de cafeína en sistemas dinámicos*

S2.P13_FQ Ma Victoria Viera - *Optimización de las condiciones de extrusión de monolitos tipo honeycomb a base de sílice de cáscara de arroz*

S2.P14_FQ Agustina Gonzalez - *Producción de hidrógeno renovable a partir del reformado en fase líquida (APR) de productos de la fermentación ABE*

S2.P15_FQ Rafael Moras - *Estudio del dopado de CeO_2 con La en una síntesis por el método de autocombustión*

S2.P16_FQ Florencia Acosta Oroña - *Evaluación de pigmentos extraídos de bacterias antárticas como componentes de celdas DSSC*

S2.P17_FQ Oscar Tafura - *Eficiencia de Scenedesmus obliquus en el tratamiento de aguas residuales domésticas*

S2.P18_FQ Mage Teliz - *Inteligencia artificial y bioinformática como herramientas para el diseño de nuevas fluorinasas*

S2.P19_FQ Santiago Pintos - *GeeMELD: Plegamiento in silico de estructuras de G-cuádruplex de ADN guiado por Dicroismo Circular y reglas de emparejamiento*

S2.P20_FQ Mauricio Fabián Ávila - *Caracterización espectroscópica y electroquímica de pigmentos para celdas solares DSSC*

S2.P21_FQ Abril González - *Un estudio sobre la estabilidad de antocianinas y su complejación con metales*

S2.P22_FQ Gabriela da Rosa - *Desarrollo de un modelo Coarse-Grained Híbrido para el estudio de aptámeros de ADN*

S2.P23_IA Milagros Campos - *Validación de una técnica espectrofotométrica adaptada para la determinación de fósforo total en muestras de bioestimulantes líquidos*

S2.P24_IA María Eugenia Román - *Optimización de las variables críticas para la extracción de metales pesados de matrices vegetales mediante el uso de disolventes eutécticos*

S2.P25_IA Magalí Molina - *Avances en el desarrollo de un sistema en flujo multibombeo con detección fotométrica para la determinación de Cromo(VI) en aguas*

S2.P26_IA Aparicio Loaces - *Optimización de la formulación de un curasemilla: evaluación de excipientes con enfoque en reducción de costos y preservación de calidad*

S2.P27_IA Luciana Rodríguez - *Síntesis y caracterización de complejos heterobimetálicos de Pd(II), Pt(II) y Ni(II) con potencial actividad contra Trypanosoma cruzi*

S2.P28_IA Gabriela Idarreta - *Síntesis de ligandos bifuncionales como conectores de quantum dots a iones lantánidos para el desarrollo de nuevos materiales luminiscentes*

S2.P29_IA Federico Mesa - *Relajación lenta de la magnetización en compuestos de coordinación basados en rutenio(III)*

S2.P30_IA María Pía García - *Optimización de síntesis micelar en agua de nanopartículas de hematita*

S2.P31_IA Guillermo Rivera - *Diseño de nuevos nano-materiales poliméricos conteniendo hierro para la descontaminación de efluentes industriales y aguas naturales*

S2.P32_IA Franco Cancela - *Síntesis micelar de nanopartículas de borato de zinc, una alternativa eco-friendly*

S2.P33_IA Inés Arandia - *Síntesis y caracterización de complejos de Pd (II) y Pt (II) como potenciales inhibidores de MPro de SARS-CoV-2*

S2.P34_IA Hebert Arcia - *Estrategias para mejorar las propiedades biológicas de ligandos multifuncionales con potencial aplicación en enfermedades neurodegenerativas*

S2.P35_IA Micaela Morais - *Hacia nuevos agentes diagnósticos por imagenología molecular: péptidos antimicrobianos radiomarcados con [^{18}F]AlF-NOTA*

S2.P36_IA Maite Martirena - *Caracterización estructural de compuestos de coordinación de Re-Ln obtenidos por modificación estructural de ligando (Ln = lantánido)*

S2.P37_QO Bruno de Souza - *Impacto del procesamiento en flores de cannabis para exportación sobre los perfiles volátiles: aportes a la fijación de criterios de calidad*

S2.P38_QO Sofía Raffaelli - *Estudio de tres especies de Senecio con actividad antibiofilm*

S2.P39_QO Valentina Perdomo - *Desarrollo y optimización de un método de extracción y cuantificación de bufotenina en semillas de Anadenanthera colubrina var. cebil*

S2.P40_QO Candela Gomez - *Síntesis de análogos del fitocannabinoide cannabigerol*

S2.P41_QO Juan Vega - *Síntesis estereoselectiva de potenciales nuevos bioherbicidas*

S2.P42_QO Yuri I. M. Silva - *Synthesis and biological prospecting of 4-quinolone-3-acylhydrazone derivatives as potential anti-HIV-1 candidates*

S2.P43_QO Guillermo López; Mariano Díaz; Sofía García; Victoria Proto - *Síntesis de un Nuevo Derivado del Norbornadieno: Hacia el Desarrollo de Sistemas Moleculares para el Almacenamiento de Energía Solar-Térmica Amigables con el Ambiente*

S2.P44_QO Lucía Sadi - *Síntesis de híbridos piridina-ácido borónico como inhibidores de betalactamasas de amplio espectro*

S2.P45_QO Gerardo Duarte - *Evaluación ex vivo de la absorción de albendazol en Mesocestoides vogae: impacto de su formulación como nanocristales*

S2.P46_QO Florencia Carballido - *Síntesis de epóxidos en forma regio y estereoselectiva sobre plataformas no naturales*

S2.P47_QO Matías Amaro - *Síntesis de chalconas heterocíclicas como potenciales agentes antifúngicos*

S2.P48_QO Sebastian Alvarez - *Sintesis de dihidrochalconas como potenciales antioxidantes para su uso en alimentos*

S2.P49_QO Natalia Cardozo - *Estudio experimental y teórico de la apertura regio y estereoselectiva de epóxidos en sistemas cíclicos*

S2.P50_QO Andrés Benítez - *Autoacoplamiento de benceno-1,2-diaminas para formar benzo[c,g][1,2,5,6]tetrazocina en presencia de N-heteroarenos*

S2.P51_QO Francisco Delgado - *Nuevas evidencias para soportar el mecanismo de Bloomfield en la bromación bencílica fotoinducida utilizando N-bromosuccinimida*

S2.P52_QO Maia Mancilla; Giuliano Sugueti - *Actividad biológica de los fármacos comerciales tripanosomicidas e inmunoestimulantes contra modelos in vitro de L. infantum y T. cruzi*

S2.P53_QO Michel Techera - *Sintesis de w,w'-bis(hidroxifenil)alcanos como potenciales antioxidantes para su uso en alimentos*

S2.P54_QO Ignacio Migues - *Variación del perfil de giberelinas en ovarios de mandarina 'Afourer' bajo distintos tratamientos agronómicos*

S2.P55_QO Gonzalo Baldivia - *Efecto de la iluminación en el perfil de Carotenoides y Norisprenoides en uvas Tannat*

S2.P56_QO Francisco Jourdan - *Exploración de aspectos estructurales claves en la actividad tripanosomicida de derivados de isoquina, imiquimod y quinolin-3-hidrazonas*

S2.P57_FQ Ricardo Faccio - *Aleaciones de Ni y Ni/Mo para la mejora de la actividad de la reacción de evolución de hidrógeno: un estudio teórico*

Diversidad de especies de *Fusarium* causantes de infección en granos de cebada y caracterización genómica de una nueva especie

Angie Álvarez[1]; Gabriela Garmendia[1]; Silvia Pereyra[2]; Silvana Vero[1]

[1]*Laboratorio de Biotecnología, Área Microbiología, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[2]*Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria (INIA), La Estanzuela, Colonia, Uruguay*

angiedaisyav@gmail.com

La cebada (*Hordeum vulgare L*.) es el segundo cultivo de invierno más importante en Uruguay, con una producción de 889 mil toneladas en la zafra 2020/2021. Su rendimiento puede verse afectado por diversas enfermedades fúngicas, entre las cuales se destaca la fusariosis de la espiga (FE), causada por especies del género *Fusarium*, que comprometen la calidad e inocuidad del grano. En los últimos años, se han reportado cambios en la composición de especies asociadas a esta enfermedad. El objetivo de este trabajo fue actualizar la información sobre la incidencia de *Fusarium* spp. en granos de cebada de distintas variedades y regiones del país. La infección fue determinada mediante cultivo, y las cepas obtenidas se identificaron por técnicas moleculares. Los niveles de infección variaron entre 2 % y 36 %, con predominio de *F. graminearum* y *F. poae*. Entre los aislamientos obtenidos, uno no presentó coincidencias con especies previamente descritas, por lo que se procedió a la secuenciación de su genoma completo. El ensamblaje resultante reveló un genoma de 35,66 Mb, compuesto por 795 contigs, con un contenido GC de 46 %, un valor N50 de 616 Kb, una cobertura de 149× y una integridad genómica del 99,6 %.

El análisis de hibridación ADN-ADN digital (dDDH) con genomas de cepas tipo filogenéticamente cercanas mostró una homología inferior al 70 %, lo que respalda la hipótesis de que este aislamiento corresponde a una nueva especie dentro del género *Fusarium*. En ensayos de patogenicidad por inoculación artificial en flores de trigo, el aislamiento mostró baja agresividad. El análisis con AntiSMASH evidenció la presencia del clúster biosintético completo de eniantina, una micotoxina emergente producida por diversas especies de *Fusarium*.

Monitoreo de bacterias patógenas y genes de resistencia antimicrobiana en afluentes y efluentes de planta de tratamiento de aguas residuales

Belén Abella[1]; Jesica Rodriguez[1]; Romina Boccagni[1]; Ileana Suarez[1]; Mabel Berois[2]; Santiago Cuevas[2]; Alicia Alemán[3]; Julieta López[4]; Elizabeth González[4]; Liliana Borzacconi[4]; Caterina Rufo[1]

[1]Alimentos y Nutrición, Instituto Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, Udelar, Canelones, Uruguay
[2]Virología, Facultad de Ciencias, Udelar, Montevideo, Uruguay
[3]Medicina Preventiva y Social, Facultad de Medicina, Udelar, Montevideo Uruguay
[4]Facultad de Ingeniería, Udelar, Montevideo, Uruguay

belenabella@fq.edu.uy

El monitoreo de aguas residuales es una herramienta clave para la vigilancia ambiental de microorganismos patógenos y genes de resistencia antimicrobiana (RAM). En este estudio se aplicaron técnicas de qPCR con análisis de disociación de alta resolución (qPCR-HRM) para detectar y cuantificar *E. coli, K. pneumoniae, E. faecium, P. aeruginosa* y *A. baumannii.* Asimismo, se implementaron reacciones específicas de qPCR para detectar los genes *intI1*, *sul1*, *mecA* y *ermB*, asociados a integrones, sulfonamidas, βlactámicos y macrólidos.
Entre abril 2024 y abril 2025 se recolectaron 51 muestras quincenales (26 de entrada, 25 de salida) en la planta de tratamiento de aguas residuales (PTAR) de Canelones. Las muestras se tomaron cada hora de 6 am a 11 am para incluir el pico de caudal observado en áreas urbanas. Las muestras de la entrada fueron compuestas de acuerdo con el caudal medido y las de la salida se compusieron tomando volúmenes iguales de las tomas de cada hora. El ADN se extrajo con kits ZymoBIOMICS (40 ml entrada, 240 ml salida). Se analizaron la frecuencia de detección e intensidad de señal (Ct) para genes RAM, y copias/ml para bacterias mediante curvas de calibración con cepas de referencia.
E. coli, E. faecium, K. pneumoniae y *A. baumannii* fueron detectados y cuantificados en todas las muestras de entrada, con concentraciones promedio de 5,1 ± 0,4, 4,4 ± 0,1, 4,2 ± 0,4 y 3,7 ± 0,6 log copias/ml, respectivamente. *P. aeruginosa* mostró una distribución más variable, siendo cuantificable en solo el 44 % de las muestras. En general, se observó una reducción global en la carga bacteriana a la salida de la PTAR, particularmente para *E. coli* (–1,7 log), *E. faecium* (–1,9 log) y *K. pneumoniae* (–1,9 log). Para *A. baumannii*, el porcentaje de muestras cuantificables descendió al 52 %, y *P. aeruginosa* fue detectable no cuantificable en el 40 % de las muestras de salida, siendo el 60 % restante negativas. La evaluación estacional de bacterias no mostró diferencias significativas. Los genes *intI1*, *sul1* y *ermB* se detectaron en el 100 % de las muestras, con valores de Ct más altos en los efluentes tratados, indicando una menor concentración relativa. El gen *mecA* se detectó en el 77 % de las muestras de entrada y fue indetectable en las de salida, sugiriendo su eliminación durante el tratamiento.
Este estudio demuestra que las aguas residuales urbanas de Canelones contienen bacterias patógenas y genes RAM de importancia clínica, algunos de los cuales persisten tras el tratamiento. La alta frecuencia de *intI1*, *sul1* y *ermB* en efluentes refleja la necesidad de mejorar los sistemas de remoción genética. Los resultados confirman el valor del monitoreo de aguas residuales para evaluar riesgos y orientar acciones en salud pública y ambiental.
Referencias: Wengenroth, L. et al Antibiotics 10, 478 (2021). Alexander, J. et al. Sci Rep. Juan;10(1):8952 (2020).

Microbioma asociado a genotipos de papa con resistencia diferencial a la sarna común

Nicol Denis[1]; Virginia Ferreira[1]; Gustavo Rodríguez[2]; Nicolás Núñez[3]; Francisco Vilaró[2]; Diana Valle[2]; Paola Gaiero[3]; Lucía Falchi[4]; Fiorella Iaquinta[4]; María Inés Siri[1]

[1]Laboratorio de Microbiología Molecular, Área Microbiología, DEPBIO, Facultad de Química, Universidad de la República.

[2]Estación Experimental Las Brujas, Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria (INIA).

[3]Laboratorio de Evolución y Domesticación de las Plantas, Departamento de Biología Vegetal, Facultad de Agronomía, Universidad de la República.

[4] Área química analítica, DEC, Facultad de Química, Universidad de la República

nicoldenis9@gmail.com

Las enfermedades de las plantas son un factor importante que limita el desarrollo sostenible de la agricultura. La papa (*Solanum tuberosum* L.) representa el cuarto cultivo alimenticio en importancia a nivel mundial después del arroz, el trigo y el maíz. La "sarna común de la papa", causada por especies de *Streptomyces* patógenas, es una de las enfermedades de mayor importancia para este cultivo, limitando la producción y calidad comercial de los tubérculos producidos. Trabajos previos han permitido identificar las especies patógenas presentes en nuestro país y profundizar en los determinantes genéticos asociados con su virulencia. El manejo de la enfermedad es complejo debido al limitado conocimiento de los factores que condicionan la ocurrencia de brotes y la escasa disponibilidad de cultivares resistentes. En este contexto, hemos caracterizado germoplasma de papa por su nivel de resistencia a la sarna común, identificando variedades, líneas de mejoramiento y genotipos silvestres con buena resistencia a la enfermedad que constituyen una base valiosa para el desarrollo de estrategias de manejo integrado de esta problemática.

El objetivo de este trabajo fue caracterizar y comparar las comunidades microbianas de la rizosfera y la geocaulósfera (zona de suelo en contacto con el tubérculo), en genotipos de papa con resistencia contrastante a la sarna común. Nuestra hipótesis plantea que los exudados específicos de cada genotipo modulan la comunidad microbiana, favoreciendo o inhibiendo la colonización por microorganismos que afectan el establecimiento de *Streptomyces* patógenos. Para evaluar esta hipótesis, se llevó a cabo un ensayo en condiciones controladas, donde se cultivaron genotipos de papa medianamente resistentes y susceptibles en un suelo previamente inoculado con una cepa patógena de *Streptomyces*. Tras la tuberización, se cosecharon los tubérculos y se recolectaron muestras de rizosfera, geocaulósfera y suelo a granel. Se realizó secuenciación masiva del ARNr 16S para evaluar la composición microbiana asociada a cada genotipo, complementando con análisis fisicoquímicos y determinación de metales en suelo a granel.

Actualmente nos encontramos en la etapa de análisis de datos. Se espera que este estudio contribuya a avanzar en la comprensión de las interacciones planta-microbioma relevantes en la resistencia a la sarna común, con potencial aplicación en estrategias de manejo integrado y selección de genotipos con mayor potencial de resistencia.

Financiamiento: Proyecto CSIC Grupos I+D 2019-2023, Proyecto CSIC Grupos I+D 2023-2027. Beca ANII: POS_NAC_2023_1_178698

Optimización de condiciones de crecimiento para las cepas nativas *Saccharomyces cerevisiae* T19-3FS y *Starmerella bacillaris* T19-3MS.

Gabriela González Soler[1,2]; Sofía Gimenez[2]; Paula González Pombo[1]; Silvana Vero[2]; Gabriela Garmendia[2]

[1]*Area Bioquímica, DepBio, Facultad de Quimica, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Microbiología Molecular DepBio, Facultad de Quimica, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

gsoler0211@gmail.com

La caracterización y producción de levaduras nativas para la industria vitivinícola ha adquirido relevancia como estrategia para preservar la identidad regional del producto. La optimización de la propagación de estas cepas en medios formulados a partir de subproductos agroindustriales, como melaza y vinaza, representa una alternativa sostenible y viable para su futura aplicación a escala industrial. En este contexto, se evaluaron las condiciones de cultivo de *Saccharomyces cerevisiae* T193FS y *Starmerella bacillaris* T193MS, cepas autóctonas seleccionadas previamente por nuestro grupo por presentar alto rendimiento fermentativo y tolerancia a condiciones operativas. El presente trabajo se centra en la optimización a escala de laboratorio de las condiciones de cultivo para una propagación óptima de estas cepas, con el fin de obtener de manera eficiente una mayor producción de biomasa microbiana, utilizando como materias primas los subproductos locales melaza de caña de azúcar y vinaza de maíz. En una primera etapa, se evaluó el crecimiento de *S. cerevisiae* T193FS y *St. bacillaris* T193MS en medio YNB suplementado con azúcares simples (glucosa, fructosa y sacarosa al 5 %). Se evaluó el consumo de los mismos mediante cromatografía líquida de alta resolución (HPLC). Se determinó la temperatura y pH óptimos de crecimiento para ambas cepas (28 °C y pH 7). La concentración máxima de melaza que no inhibe el crecimiento se determinó mediante recuentos en placa y análisis estadístico. *S. cerevisiae* T193FS creció sin inhibición en presencia de hasta un 10% de melaza, mientras que *S. bacillaris* T193MS mostró capacidad de crecimiento en medios con hasta un 50 % de melaza. También se ensayaron diferentes formulaciones de medios, destacándose la combinación de vinaza de maíz diluida con melaza. A futuro se contempla el escalado en biorreactores de 3 L, con el propósito de optimizar la producción de biomasa a mayor escala. Este trabajo favorece el desarrollo de una producción vitivinícola más sustentable y eficiente, mediante la valorización de recursos locales y el aprovechamiento de la biodiversidad microbiana autóctona.

Caracterización de las alteraciones en el metaboloma hepático en un modelo experimental de Síndrome Metabólico

Victoria Gómez[1]; Valentina Degrave[2]; Guillermo Moyna[1]; María Eugenia D'Alessandro[2,3]; María Eugenia Oliva[2,3]; Andrés López[1]

[1]Laboratorio de Química Orgánica, Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, UdelaR, Paysandú, Uruguay

[2]Laboratorio de Estudio de Enfermedades Metabólicas relacionadas con la Nutrición, Facultad de Bioquimica y Ciencias Biologicas, Universidad Nacional del Litoral, Santa Fe, Argentina

[3]Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Santa Fe, Argentina

vickygomez2012@hotmail.com

El Síndrome Metabólico (SM) es una condición multifactorial para la cual existen pocas alternativas farmacológicas específicas, y que incluye obesidad visceral, dislipemia, hipertensión arterial, resistencia a la insulina y enfermedad hepática esteatósica asociada a disfunción metabólica (MASLD).[1] Es por ello que conocer las alteraciones en metaboloma del tejido hepático permitiría caracterizar el patrón metabólico asociado a esta enfermedad y evaluar el efecto de posibles tratamientos. En este trabajo se caracterizó el metaboloma hepático de ratas machos Wistar con SM inducido por una dieta rica en sacarosa (DRS). Se compararon los perfiles metabólicos obtenidos por resonancia magnética nuclear (RMN) de ^{1}H de 15 ratas alimentadas con una dieta de referencia frente a 15 ratas con SM inducido por DRS. El análisis de componentes principales (PCA) reveló una clara diferenciación entre los perfiles de ^{1}H RMN de ambos grupos, indicando alteraciones metabólicas en los animales con SM. Un análisis discriminante por medio de proyecciones sobre estructuras latentes ortogonalizadas (OPLS-DA) permitió identificar cambios en los niveles de aminoácidos como alanina, glutamina, glutamato, y metionina. Asimismo, se observaron alteraciones en el metabolismo de aminas cuaternarias, incluyendo colina, betaína, y creatina. También se detectaron variaciones en metabolitos relacionados con el metabolismo energético, como ser glucosa, acetato, lactato, y succinato. Estos hallazgos serán el punto de partida para evaluar el efecto en el metabolóma hepático de tratamientos para el SM basados en productos de cannabis que han presentado resultados prometedores.[2]

1. Degrave, V.; Vega Joubert, M. B.; Ingaramo, P.; Sedan, D.; Andrinolo, D.; D'Alessandro, M. E.; Oliva, M. E. *Med. Cannabis Cannabinoids* **2023**, *15,* 170-183.

2. Degrave, V.; Vega Joubert, M. B., Filippa, C.; Ingaramo, P.; Torregiani, K.; Caro, Y. S.; De Zan, M. M.; D'Alessandro, M. E.; Oliva, M. E. *J. Cannabis Res.* **2025**, *7*, 46.

Bacterias no cultivables del filo Chloroflexota en sistemas de tratamiento de aguas residuales de lodos activados de Uruguay

Gerardo Viera[1]; Patricia Bovio-Winkler[1]; Angela Cabezas[2]; Claudia Etchebehere[1]

[1]*Laboratorio de Ecología Microbiana, Departamento de Bioquímica y Genómica Microbiana, Instituto de Investigaciones Biológicas Clemente Estable, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Microbiología Ambiental y Biotecnología, Instituto Tecnológico Regional Centro Sur, UTEC, Durazno, Uruguay*

GerardoViera2025@gmail.com / *ggabrielviera@gmail.com*

Los sistemas de lodos activados son procesos biológicos aerobios ampliamente utilizados para el tratamiento de aguas residuales domésticas e industriales. Están conformados por una pileta de aireación, donde los microorganismos degradan la materia orgánica, y un sedimentador, en el cual se separan las células del agua tratada. Dentro del microbioma de estos sistemas, las bacterias del filo Chloroflexota representan una fracción significativa; sin embargo, su caracterización funcional y ecológica sigue siendo limitada, principalmente debido a las dificultades para obtener cultivos puros en condiciones de laboratorio. Debido a su morfología filamentosa, se ha postulado que estas bacterias podrían desempeñar un papel fundamental en la formación de flóculos, estructuras esenciales para la sedimentación de la biomasa. No obstante, su sobrecrecimiento puede inducir la expansión de los flóculos, ocasionando problemas en la sedimentación y en la operación del sistema. Aunque este grupo ha sido estudiado en otras regiones del mundo, en Uruguay se conoce poco acerca de su predominancia en los sistemas de tratamiento de aguas residuales.

El objetivo de este trabajo fue determinar la diversidad y composición taxonómica de las bacterias del filo Chloroflexota en plantas de tratamiento de lodos activados que operan en Uruguay, utilizando diferentes tipos de aguas residuales. Para ello, se colectaron muestras de once plantas de tratamiento y se caracterizó la comunidad microbiana mediante secuenciación del gen del ARNr 16S. Además, se estudió su morfología mediante hibridación in situ fluorescente (FISH) con sondas específicas dirigidas al filo.

Los resultados revelaron que el filo Chloroflexota estuvo presente en todas las plantas analizadas, con una abundancia relativa que osciló entre 1,8 % y 39,7 %, siendo la clase Anaerolineae la predominante. Se identificaron géneros específicos en función de la planta y del tipo de agua residual tratada; la mayoría de estos géneros carecen de representantes cultivados, lo que evidencia un considerable desconocimiento sobre estos microorganismos. El análisis multivariado mediante PCoA mostró un agrupamiento de las muestras según la planta de tratamiento y el tipo de efluente, tanto para la comunidad microbiana total como para los microorganismos del filo Chloroflexota, indicando una fuerte influencia del origen del efluente en la composición microbiana. Se pudo visualizar la morfología filamentosa de estos microorganismos en varias muestras, lo que indica un papel potencialmente importante en la formación de flóculos biológicos.

Optimización de las condiciones de producción de tanasa por *Aspergillus uvarum* en residuos de té verde.

Erika Arbildi[1]; Karen Ovsejevi[2]; Rosario Durán[3]; Silvana Vero[1]

[1]*Área de Microbiología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2] *Área de Bioquímica, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[3] *Unidad de Bioquímica Analítica y Proteómica, Instituto de Investigaciones Biológicas Clemente Estable e Instituto Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay.*

eri.arbildi@gmail.com

La tanasa (tannin acil hidrolasa) es una enzima clave para la degradación de taninos, compuestos fenólicos que interfieren con los procesos enzimáticos de sacarificación y fermentación durante la producción de bioetanol. Su aplicación permite reducir el efecto inhibitorio de los taninos presentes en materias primas como el sorgo, mejorando el rendimiento fermentativo. En este contexto, se evaluó la producción de tanasa por parte de una cepa de *Aspergillus uvarum* HT4, utilizando residuos de té verde como sustrato con el objetivo de revalorizarlo.

La cepa fue seleccionada por su alta actividad tanasa y su capacidad de crecer en taninos como única fuente de carbono. Se determinó su curva de crecimiento a distintas temperaturas (25–40 °C), observándose un óptimo a 30 °C. A partir de estos resultados, se evaluó la producción enzimática en residuos sólidos de té verde, analizando el efecto de temperatura, tiempo y humedad mediante un diseño factorial. Se identificó un efecto sinérgico de temperatura y tiempo sobre la actividad enzimática, siendo 30 °C y 6 días las condiciones más favorables dentro del rango ensayado.

Posteriormente, se utilizó metodología de superficie de respuesta (RSM) para optimizar las condiciones de cultivo. Se diseñaron 17 experimentos con variaciones en temperatura (21,6–38,4 °C), tiempo (4,3–7,7 días) y humedad (0,659–2,341 mL). El análisis estadístico confirmó que temperatura y tiempo fueron los principales factores que determinaron la actividad tanasa, mientras que una mayor humedad no incrementó significativamente la producción.

El modelo predictivo indicó que las condiciones óptimas se situaban alrededor de 35 °C, 7 días y 1,5 mL de humedad, alcanzando una actividad de 64,6 U. Además, estudios proteómicos realizados en estas condiciones permitieron identificar la expresión de 2 de las 15 tanasas codificadas en el genoma de la cepa, lo que confirma la capacidad del sistema para inducir específicamente enzimas funcionales en la degradación de taninos.

Estos resultados validan el uso de residuos de té verde como sustrato económico y sostenible para la producción de tanasa fúngica, con potencial aplicación en la biorreducción de taninos en matrices vegetales y en la mejora de procesos fermentativos para bioetanol.

Modelado del receptor de la hormona concentradora de melanina (MCHR1) de rata

Diego Carvalho[1]; Jorge Cantero[1,2]; Sofía Niño-Rivero[3]; Patricia Lagos[3]; Federico Iribarne[1]

[1]*Área Matemática/DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Centro de Investigaciones Médicas (CIM), Facultad de Ciencias de la Salud - Universidad Nacional del Este, Ciudad del Este, Paraguay*

[3]*Unidad Académica de Fisiología, Facultad de Medicina, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

dicarez@fq.edu.uy

La hormona concentradora de melanina (MCH) es un neuropéptido cíclico clave en la regulación de diversos procesos, desde la ingesta de alimentos hasta los estados emocionales, con notables efectos prodepresivos. Por estos motivos, se ha propuesto que el sistema MCHérgico puede ser una diana importante para el tratamiento de la obesidad, la ansiedad y la depresión. Los efectos de la MCH están mediados por dos receptores acoplados a proteína G (GPCRs), MCHR1 y MCHR2, de los cuales MCHR2 no está funcionalmente presente en roedores. Dado su alto grado de homología de secuencia con humanos (96%), y siendo la única forma presente, MCHR1 de rata es un modelo comúnmente utilizado en estudios experimentales. La caracterización estructural y funcional de este receptor es incipiente, existiendo algunos trabajos que utilizan modelos incompletos de la proteína de rata o humana. Aprovechando las tecnologías actuales para la predicción y modelado de la estructura tridimensional de proteínas (AlphaFold, RoseTTAFold), se generaron modelos de la estructura completa del receptor y su ligando correspondiente, considerando además una de las principales modificaciones postraduccionales implicadas en su función, tal como lo es la glicosilación de su extremo N-terminal. Posteriormente, se evaluó la estabilidad de estas estructuras mediante simulaciones de dinámica molecular (NAMD), como una primera prueba de concepto para determinaciones de afinidad y modelado de otros receptores asociados.

Celdas de combustible microbiana utilizando un sistema microalga-bacteria en el cátodo

René Cardeña[1,2]; Angela Cabezas[1]; Germán Buitrón[2]

[1]*Departamento de Sostenibilidad Ambiental, Instituto Tecnológico Centro Sur, Universidad Tecnológica (UTEC), Uruguay*

[2]*Laboratorio de Investigación en Procesos Avanzados de Tratamiento de Aguas, Instituto de Ingeniería, Unidad Académica Juriquilla, Universidad Nacional Autónoma de México, Querétaro, México*

rene.cardena@utec.edu.uy

Las celdas de combustible microbianas (CCM) pueden producir electricidad a partir de aguas residuales. En el ánodo de la CCM se forma una biopelícula de bacterias electrogénicas que oxidan la materia orgánica, para producir electrones, protones y CO_2. Los electrones y protones viajan hacia el cátodo para combinarse con O_2 para producir agua. Esta reacción cierra el circuito y produce una diferencia de potencial. Sin embargo, los costos de la aireación mecánica del cátodo y la utilización de catolitos comerciales representan una problemática. El uso de sistemas microalga-bacteria (SMB) tienen la capacidad de producir O_2 barato. Este trabajo estudia el desempeño de una CCM que emplea un SMB en el cátodo como alternativa al uso de catolitos convencionales. Se comparó el desempeño de una CCM operada con buffer de fosfatos (BF) 50 mM como catolito contra una CCM que emplea un SMB. Se utilizaron reactores de 2 cámaras de tipo H, separados por una membrana de intercambio aniónico. El material de ambos electrodos fue fieltro de grafito (5x5 cm). El ánodo de ambas CCM y el cátodo con SMB se alimentó con una mezcla de acetato, propionato y butirato (1.5 g DQO/L). Se encontró que ambos sistemas producen densidades de corriente similares entre 11 y 12 A/m^3, sin embargo, las eficiencias coulómbicas (cantidad de sustrato transformado a electrones) obtenidas en CCM con SMB es 3 veces más alta (74%) respecto a la CCM con BF (26 %). La CCM con SMB degradó el doble de DQO (2.9±0.4 g DQO/L) que la CCM con BF (1.5±0.1 g DQO/L). Se encontró una relación entre el O_2 disuelto y el voltaje producido. La CCM con SMB presenta altas eficiencias para el tratamiento de aguas (remociones >90%) y de producción de electricidad alcanzando una máxima densidad de potencia de 60 mW/m^2.

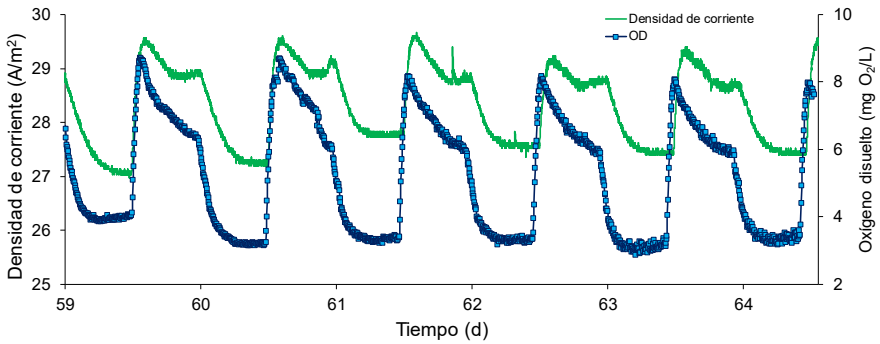


Figura 1: Densidad de corriente vs oxígeno disuelto producido por las microalgas en CCM.

Valoración de la utilidad de los anticuerpos comerciales anti CD9, CD63 y TSG101 para la identificación de vesículas extracelulares mediante estudios in silico.

Federico Di Stefano[1]; Patricia Berasain[1]; Alicia Costábile[2]

[1]*Laboratorio de Biología Parasitara, Facultad de Ciencias - Instituto de Higiene, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Sección Bioquímica-Biología Molecular, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

frico326@gmail.com

Las vesículas extracelulares (VE) son un foco de investigación como fuente de biomarcadores de patógenos. Son partículas de tamaño nanométrico (30 a 400 nm), delimitadas por una bicapa lipídica y secretadas por las células vivas al medio extracelular. Se encuentran en diferentes fluidos como sangre, suero, orina, leche, saliva, entre otros, y presentan moléculas específicas en su superficie y/o contenido intra-vesicular como las tetraspaninas CD9 y CD63 y el gen de susceptibilidad tumoral TSG101, que se consideran marcadores genéricos de VE en mamíferos. El presente trabajo se centró en evaluar mediante programas bioinformáticos la utilidad de anticuerpos comerciales con especificidad contra los marcadores CD9, CD63 y TSG101 como herramienta para la detección de los mismos y/o identificación de VE purificadas de suero de ratón y/o del parásito *F. hepatica.* Para ello las secuencias de los tres marcadores se obtuvieron del banco de datos UniProt (https://www.uniprot.org/) para humano y ratón; y se utilizaron para identificar secuencias homólogas de *F. hepatica* por BLASTP en los dos genomas del parásito anotados en la base WormBase ParaSite (https://parasite.wormbase.org/). Las secuencias se alinearon por Clustalw y se construyeron árboles filogenéticos con NGPhylogeny.fr (https://ngphylogeny.fr/). Posteriormente, las estructuras tridimensionales de las secuencias homólogas se compararon mediante el programa Chimera X y la región de reconocimiento del anticuerpo contra TSG101 (aa 117 al 324) se mapeó sobre las estructuras 3D. La búsqueda de homólogos de los tres antígenos en *F hepatica* arrojó resultados más consistentes para CD9 y TSG101 que para CD63, a la vez respaldados por el análisis filogenético que mostraron a CD63 en una rama más alejada. También se observó una alta homología de secuencias entre humano/ratón para los tres antígenos y para CD9 y TSG101 con sus homólogos en *F. hepatica*. Estos resultados son prometedores ya que indican que los anticuerpos comerciales contra CD9 y TSG101 podrían ser de utilidad para el diseño y puesta a punto una técnica que permita identificar VE en suero de mamíferos y como una herramienta para la detección temprana de patógenos como *F. hepática*. CD63 por otra parte no mostró un resultado prometedor en la búsqueda de homólogos en ambos genomas del parásito, por lo que serán necesarios mayores estudios al respecto.

Regulación de la expresión de una manosil transferasa de *Saccharomyces cerevisiae* por CRISPR

Santiago Bustamante[1,2]; Emiliana Botto[1,2]; Sonia Rodríguez Giordano [2,3]

[1]*Área Tecnología Farmacéutica y Control de Calidad de Medicamentos, CIENFAR, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Biotransformaciones y Biocatálisis, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[3]*Área de Microbiología, DEPBIO, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

sbustamante@fq.edu.uy

Las levaduras han ganado relevancia para la obtención de proteínas con fines terapéuticos, dado que son organismos eucariotas sencillos, de fácil escalado, poseen la habilidad de plegar correctamente proteínas y pueden realizar modificaciones post-traduccionales. Además, en el caso de *Saccharomyces cerevisiae*, no es patogénica.[2,3]

La mayoría de las proteínas, y en especial aquellas que ocupan el espacio extracelular (por ejemplo, la sangre), están glicosiladas. Estas glicosilaciones pueden afectar, entre otras cosas: su actividad, vida media, efectividad y distribución, y les permiten ser reconocidas como seguras por el sistema inmune.[2]

En todos los eucariotas, las etapas iniciales de glicosilación en el retículo endoplasmático (RE) se conservan. Los caminos de glicosilación difieren al entrar en el aparato de Golgi. En mamíferos, el glicano $Man_8GlcNAc_2$ que sale del RE se transforma en $Man_5GlcNAc_2$, que es el intermediario clave para la producción de glicanos híbridos o complejos. En contraposición, las levaduras suelen tomar el glicano $Man_8GlcNAc_2$ y lo hipermanosilan, llegando a estructuras del tipo $Man_{>50}GlcNAc_2$.

Con el objetivo de evitar esta hipermanosilación se plantea la regulación de la expresión del gen OCH1 que codifica una manosiltransferasa del Golgi encargada de catalizar la primer adición de Man, para transformar $Man_8GlcNac_2$ en $Man_9GlcNac_2$, sustrato para posteriores pasos de manosilación.[3]

Utilizando el vector pCECRed, portador de un ARNg(OCH1) y Cas9, se realizó por CRISPR un *knock-out/knock in* del promotor de OCH1 (pOCH1), reemplazándolo por el promotor de ENO1 (pENO1). Esto permitirá la regular la expresión de OCH1 utilizando una enzima CAS catalíticamente inactiva (dCAS12) unida a un inhibidor transcripcional genérico (MXI1).[1,3-6]

Se presentarán la optimización de la técnica, al igual que los avances en la construcción de la primera generación de cepas de *Saccharomyces* por glicoingeniería basada en control de promotores.

Referencias:

1) Hamilton, et al. (2006). *Science*, 313(5792), 1441–1443.
2) Devlin, J. P. (2018). Edinburgh Research Archive. https://hdl.handle.net/1842/33084
3) Li X, et al. (2022). Front. Microbiol. doi: 10.3389/fmicb.2022.930658
4) Neil C. Dalvie, et al. (2022). ACS Synthetic Biology 2022 11 (1), 497-501
5) Maestroni, et al. (2023). FEMS Yeast Research, 2023, 23, 1–9
6) Ciurkot, et al. (2021). Nucleic Acids Research, 2021, Vol. 49, No. 13 7775–7790

Estudios de adsorción de cafeína en sistemas dinámicos

Luana Bentancor[1]; Inés Ballestié[1]; Mirian Casco[1]; Ana Claudia Pina[1,2]

[1]Grupo de Materiales Ingeniería y Medioambiente, Departamento de Ingeniería, Universidad Católica del Uruguay.

[2]Área Fisicoquímica, Detema, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay

luanabentancor2@gmail.com; ine.balestie@gmail.com

El carbón activado derivado de biomasa se ha consolidado como un adsorbente eficiente, económico y ambientalmente sostenible para la remoción de contaminantes en medios acuosos [1]. Su elevada área superficial, porosidad ajustable y la presencia de grupos funcionales en su superficie lo convierten en un material atractivo para aplicaciones en tratamiento de aguas, especialmente frente a contaminantes emergentes como los productos de origen farmacéutico [2]. Entre estos, la cafeína resulta interesante de utilizar como molécula modelo ya que su presencia se ha detectado en cursos de agua debido a lo extensivo de su consumo. De hecho, este compuesto se utiliza como indicador de actividad antropogénica [3]. En este trabajo se estudia el proceso de adsorción de cafeína en condiciones de flujo continuo, utilizando un lecho empacado con carbón activado de origen lignocelulósico. Se llevaron a cabo ensayos en batch, a temperatura ambiente y bajo agitación continua, buscando determinar la performance del adsorbente, obteniéndose tiempos de equilibrio menores a 30 minutos. Los estudios en sistemas dinámicos se llevaron a cabo variando la concentración inicial del soluto, con el objetivo de obtener las curvas de ruptura correspondientes. A partir de estos resultados, se determinaron el tiempo de ruptura del adsorbente, así como y su capacidad de remoción en régimen continuo.

El análisis de los datos experimentales permite evaluar la eficiencia del material en condiciones reales de operación, así como ajustar modelos que describan el comportamiento del sistema. Estos estudios contribuyen al diseño de tecnologías de adsorción más eficientes para la eliminación de contaminantes farmacéuticos, y aportan información clave para futuras aplicaciones a escala piloto o industrial.

1 - Yu Liu, et al., 2025. Preparation of multi-nitrogen/oxygen carbon derivatives for the adsorption of anionic pollutants: Urea decomposition and transformation of active sites, Carbon, 238, 120200, https://doi.org/10.1016/j.carbon.2025.120200.

2 - Hayet Mansouri, et al., 2015. Competitive adsorption of ibuprofen and amoxicillin mixtures from aqueous solution on activated carbons, Journal of Colloid and Interface Science, 449, 2015, 252-260, https://doi.org/10.1016/j.jcis.2014.12.020.

3- Kexin Yang, et al., 2024. Adsorption and detection of caffeine in tea samples by surface active MPN@COFs, Journal of Molecular Liquids, 407, 125122, https://doi.org/10.1016/j.molliq.2024.125122.

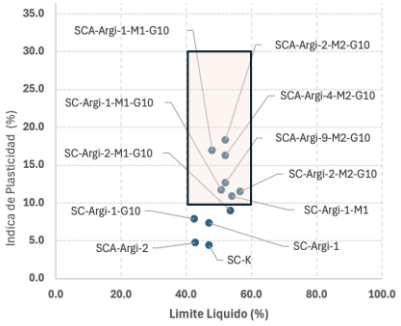
Optimización de las condiciones de extrusión de monolitos tipo honeycomb a base de sílice de cáscara de arroz

Mª Victoria Viera; Martin Torres; Patrice Portugau; Jorge Castiglioni; Carolina De los Santos

Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

vieramariavictoria@gmail.com

Los soportes estructurados tipo honeycomb han demostrado ser elementos clave en catálisis heterogénea, particularmente en el tratamiento de contaminantes ambientales, debido a su estructura abierta y uniforme que facilita el paso del fluido y la interacción entre la fase activa y la mezcla reactiva. En un trabajo previo [1] se desarrollaron monolitos a partir de sílice comercial (SC) y de cáscara de arroz (SCA). La cáscara de arroz (CA) es un residuo agroindustrial abundante en Uruguay. Si bien se logró obtener resultados aceptables, estos estuvieron posicionados en sus límites para una mezcla de caolín (K) y SCA de 1:1 en peso, utilizando como aditivo un 0.5% en peso de metilcelulosa. La continuación de este trabajo, se enfocó en optimizar la mezcla para la extrusión, evaluando diferentes proporciones de SC, SCA y nuevos aditivos. Se utilizó como materia prima una arcilla española (Argi) en lugar de K, dado sus mejores propiedades plásticas, y se prepararon y evaluaron un total de 12 mezclas. Se varió la proporción de sílice y Argi en la mezcla, agregando además diferentes aditivos como metilcelulosa (M) y glicerol (G). Asimismo, se prepararon mezclas con sílice comercial a efectos comparativos. Estas muestras fueron evaluadas mediante el diagrama de Casagrande para determinar cual presenta las propiedades óptimas para su extrusión, tal como se muestra en la figura.



Inicialmente, se logró extrudar una mezcla compuesta por (SCA/Argi) = 4, obteniendo monolitos estructurados. Este resultado representa un avance significativo en la revalorización de este residuo, ya que se pudo conformar una estructura extrudable y estable con una composición mayoritariamente renovable. Sin embargo, con el objetivo de mejorar aún más las condiciones plásticas, se preparó una segunda formulación con proporciones (SCA/Argi) = 1, manteniendo los mismos aditivos. Esta segunda mezcla mostró una mayor estabilidad estructural tras la extrusión. Ambos tipos de monolitos fueron tratados térmicamente. Las muestras fueron posteriormente caracterizadas mediante DRX, MEB y fisisorción de N_2. Este estudio permitió avanzar en la valorización de un residuo agroindustrial como la CA, optimizando su procesamiento hacia la obtención de soportes estructurados viables para aplicaciones catalíticas.

[1]- Explorando la obtención de monolitos tipo honeycomb a base de cenizas de cáscara de arroz. XXIX Congreso Iberoamericano de Catálisis (CICAT),2024, Bilbao, España.

Producción de hidrógeno renovable a partir del reformado en fase líquida (APR) de productos de la fermentación ABE

Agustina Gonzalez[1]; Agustina Moreira[1]; Carmina Reyes[2]; Mauricio Musso[1]

[1]*Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Energías Renovables, IPTP, Facultad de Química, Udelar, Pando, Uruguay*

Ag2512003@gmail.com

La biomasa lignocelulósica es un recurso abundante y ampliamente distribuido a nivel mundial. La misma ha cobrado interés debido a su capacidad de ser valorizada como materia prima para la producción de compuestos químicos de valor agregado. Algunos de estos podrían sustituir a los combustibles fósiles, promoviendo un modelo energético más sostenible. Entre ellos, el hidrógeno (H_2) destaca por su capacidad para actuar como una fuente limpia y renovable. De forma general y para evitar inconvenientes principalmente asociados a la formación de alquitranes, la biomasa se suele convertir en moléculas más discretas mediante distintos tipos de procesos térmicos o biológicos para luego estas ser transformadas en mezclas ricas en H_2. Un ejemplo de estos procesos es el conocido como fermentación ABE, en el cual la biomasa lignocelulósica se transforma en una mezcla acetona-butanol-etanol la cual es posteriormente destilada para la utilización del n-butanol como biocombustible. Alternativamente, esta mezcla puede ser convertida en una mezcla gaseosa rica en H_2 a partir de su reformado catalítico: $C_nH_mO_k + (2n-k)H_2O \rightarrow (2n + ½m - k)H_2 + nCO_2$. El reformado en fase acuosa (APR) es un proceso similar al reformado catalítico con vapor de agua, pero transcurre en fase líquida, a temperaturas menores (200-300 °C) y presiones superiores (15-75 bar). Este tipo de proceso mantiene el medio en fase líquida, permitiendo diseños más compactos y mayor eficiencia energética al evitar la vaporización de la materia prima y el agua.

En el siguiente trabajo, un catalizador conteniendo 20 % de peso en Ni y soportados sobre un óxido mixto La-Zr fue sintetizado y ensayado en la reacción de APR de los productos obtenidos de la fermentación ABE en un reactor batch Parr 4575 con una capacidad de 0,5 L. Los resultados muestran que el catalizador es activo para producir una mezcla gaseosa rica en H_2, con un mayor volumen de gases producidos utilizando etanol. La presencia de CH_4 y la baja proporción de CO_x puede indicar que reacciones de metanación pueden estar ocurriendo en las condiciones de la reacción: $CO_x + (2+x)H_2 \rightarrow CH_4 + xH_2O$.

Tabla 1. Resultados obtenidos en el APR. T = 280 °C; tiempo = 2 h; relación agua/carbono = 4,23.

Compuesto	$V_{Fase\ Gaseosa}$ (mL)	Selectividad molar (%)			
		H_2	CO_2	CO	CH_4
Acetona	185	63,92	15,35	4,42	16,31
Butanol	360	70,98	11,98	0	17,04
Etanol	760	66,97	16,46	2,43	14,14

Estudio del dopado de CeO_2 con La en una síntesis por el método de autocombustión

Rafael Moras; Santiago Pioli; Leopoldo Suescun

Cryssmat.Lab, DETEMA, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

rafaelmoras885@gmail.com

El óxido de cerio, CeO_2, es un componente importante de las celdas de óxido sólido (SOCs) de temperatura intermedia (operando en el rango de temperatura 550-800 °C) siendo el principal componente del electrolito cuando está dopado con Gd o Sm (GDC o SDC respectivamente) o como capa separadora entre electrodos químicamente reactivos y el óxido de circonio dopado con itrio (YSZ), material de referencia para celdas SOC de alta temperatura.

Las celdas de óxido sólido (SOCs) son una tecnología potencialmente clave para procesos de generación y utilización eficiente de hidrógeno verde en la futura economía basada en el hidrógeno como fuente y vehículo energético.

En el Cryssmat-Lab hemos desarrollado un método de síntesis de óxidos con composición y microestructura adecuada para electrodos y electrolitos de SOC. En particular, recientemente, se sintetizó el electrodo de oxígeno basado en la perovskita $La_{0.6}Sr_{0.4}Fe_{0.8}Cu_{0.2}O_{3-\delta}$ dopada con distintas proporciones de CeO_2 (LSFCu-XCeO_2) en un solo paso de autocombustión [1], generándose un material compósito de 2 cerámicos que ha destacado en su rendimiento en celdas de combustible y electrolizadoras de óxido sólido (SOFC y SOEC respectivamente) caracterizadas en nuestro laboratorio. En la síntesis se ha observado que una parte del La que forma la perovskita se incorpora al CeO_2 dopándolo para formar $La_xCe_{1-x}O_{2-x/2}$ y reduciendo su contenido en el LSFCu modificando las propiedades de ambos óxidos en forma benéfica para su aplicación. Existen reportes [2] que indican que el dopado de óxido de cerio con La produce una variación del tamaño de celda unitaria del compuesto obtenido proporcional al contenido de La, que se puede observar mediante difracción de rayos X (DRX) de polvo.

En este trabajo se presentarán los resultados de la preparación de $La_xCe_{1-x}O_{2-x/2}$ para distintos valores de x por autocombustión, la determinación de la celda unidad por DRX y la construcción de una curva de calibración que permita determinar en forma precisa el contenido de la de los compositos LSFCu-XCeO_2 para distintas proporciones de CeO_2 en la síntesis. [3]. El objetivo general es mejorar el rendimiento de las celdas mediante el uso de esta u otra combinación de materiales no exploradas profusamente en la literatura.

[1] Vázquez, S., et al. (2015). Journal of Solid State Chemistry, 228, 208–213. https://doi.org/10.1016/j.jssc.2015.04.044

[2] Artini, C. (2018). Inorganic Chemistry, 57(21), 13047–13062. https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.8b02131

[3] Di Benedetto, N. (2022). [Tesis de maestría, Universidad de la República, Facultad de Química]. https://hdl.handle.net/20.500.12008/35332

Evaluación de pigmentos extraídos de bacterias antárticas como componentes de celdas DSSC

Florencia Acosta Oroña[1]; Vanesa Amarelle[2]; María Fernanda Cerdá[1]

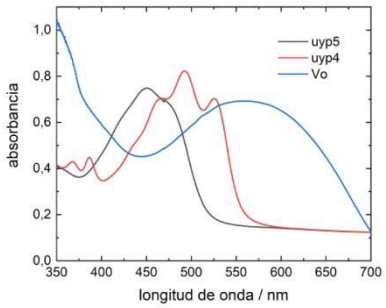
[1]Laboratorio de Biomateriales, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, UDELAR, Montevideo, Uruguay

[2]Departamento de Bioquímica y Genómica Microbianas, Instituto de investigaciones Biológicas Clemente Estable, Montevideo, Uruguay

florencia.acosta@fcien.edu.uy

Las celdas solares a base de pigmentos (DSSC) son dispositivos capaces de transformar la luz en energía eléctrica, donde los pigmentos cumplen un rol central en la captación de la luz y generación de electrones [1]. Los pigmentos utilizados en las mismas pueden ser de origen natural o sintético. En este trabajo se evaluaron pigmentos extraídos de bacterias de origen antártico.

Los pigmentos fueron extraídos de las cepas *Arhtrobacter sp.* UYP4, *Rhodococcus sp.* UYP5, *Arhtrobacter sp.* UYP6, *Pseudomona sp.* UYF39 (mutante en la vía del homogenistato que sobreproduce piomelanina) y *Duganella sp* Vo. Luego de obtenidos, la caracterización fue realizada por espectroscopia UV-visible y su potencial redox registrado por voltamperometría cíclica. Por esta técnica se evalúan los procesos de reducción y oxidación de los compuestos obtenidos en los extractos (mayoritariamente carotenoides y violaceína), de forma de conocer la capacidad de transferencia de electrones que tiene un pigmento. Esto es importante para verificar si será posible el proceso de transferencia de electrones hacia el dióxido de titanio implicado en la construcción de una celda solar. Asimismo, para evaluar si es posible la regeneración de los pigmentos una vez armada la celda DSSC [2]. Todos los pigmentos analizados mostraron buenas características espectrales y redox para ser aplicados como sensibilizantes.



Los extractos fueron finalmente probados como sensibilizantes en el armado de celdas DSSC. Estas celdas fueron caracterizadas electroquímicamente, para conocer su eficiencia de conversión bajo condiciones de iluminación estándar.

[1] O'Regan, B. , & Grätzel (1911) A low-cost, high-efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO_2 films. Nature, Vol 353, 737-739. https://www.nature.com/articles/353737a0

[2] Cerdá, M.F. Dyes from the Southern Lands: An Alternative or a Dream? Solar 2022, 2, 519–539. https://doi.org/10.3390/ solar2040031

Eficiencia de *Scenedesmus obliquus* en el tratamiento de aguas residuales domésticas

Oscar Tafura; Carolina Lucero; Hector García; Luis G. Ramírez M.

Programa de Posgrado Ingeniería en Agua y Desarrollo Sostenible, Universidad Tecnológica del Uruguay, Durazno, Uruguay

oscar.tafura@estudiantes.utec.edu.uy

La creciente preocupación por la contaminación ambiental ha impulsado la búsqueda de alternativas sostenibles y eficientes para el tratamiento de aguas residuales. En este contexto, la tecnología biológica basada en microalgas, como *Scenedesmus obliquus*, emerge como una opción prometedora, presentando ventajas significativas sobre los métodos convencionales como los lodos activados. Entre estos beneficios se incluyen la disminución o eliminación simultánea de nitrógeno y fósforo, un proceso económico y sostenible, la obtención de biomasa con valor añadido, un eficiente reciclaje de nutrientes y la generación de aguas con menor cantidad de contaminantes. El objetivo de este estudio fue determinar la eficiencia de la cepa *Scenedesmus obliquus* en el tratamiento de aguas residuales domésticas a escala laboratorio. Además, se evaluaron parámetros fisicoquímicos relacionados con el sistema de cultivo para establecer una condición de crecimiento ideal y se midió la eficiencia de remoción de Nitrógeno Total (N), Nitrógeno Amoniacal (NH3-N), Nitratos (NO_3), Nitritos (NO_2), Demanda Química de Oxígeno (DQO), Fósforo Total (P), Coliformes Totales (CT) y Coliformes Fecales (CF). Los análisis se realizaron en un biorreactor de columna con un volumen final de 2 L, mantenido a 24 °C con aireación a 2,25 L/min, sin fotoperiodo, y una concentración celular inicial de 300 mg L^{-1}. Se recogieron muestras a intervalos regulares de 24 h y se caracterizaron para determinar la concentración celular, la temperatura, el pH y la conductividad. Estos parámetros fisicoquímicos fueron determinaron al inicio y al final del experimento. Los resultados obtenidos demuestran que *Scenedesmus obliquus* mostró una buena respuesta general para el tratamiento de aguas residuales. El crecimiento de biomasa, alcanzó una concentración máxima de 1.704 ± 0.08 g/L, un tiempo de duplicación de 12 d, una tasa máxima de crecimiento específico (μmax) de 0.0034 d^{-1}. La cepa fue muy eficiente en la remoción de nutrientes y coliformes, logrando las siguientes eficiencias porcentuales P (98.04%), NO_3 (99.74%), N (88.77%), NH3-N (96.51%), CT (100%) y CF (97.5%). Si bien la remoción de materia orgánica fue menor en comparación, se alcanzaron eficiencias del 68.02% para la DQO y 78.95% para la DQO Soluble. En conclusión, la tecnología de microalgas, y en particular el uso de *Scenedesmus obliquus*, representa una solución biotecnológica ventajosa para el tratamiento de aguas residuales domésticas, especialmente viable para caudales bajos a medios en un contexto de servicio descentralizado. Esta tecnología no solo mejora la calidad del efluente, sino que también permite la obtención de subproductos valiosos. La aplicación de esta tecnología emergente ya está siendo implementada a escala real en América Latina, lo que sugiere que su inclusión masiva, particularmente en Uruguay, es viable y puede contribuir a derribar barreras sociales, ofreciendo un tratamiento más sostenible y eficiente.

Palabras clave: Microalgas, Tratamiento, Scenedesmus, Biomasa

Inteligencia artificial y bioinformática como herramientas para el diseño de nuevas fluorinasas

Mage Teliz[1]; Gonzalo Lopez[1,2]; Pablo D. Dans[3,4]; Paola Panizza Scasso[1,2]

[1]Laboratorio de biocatálisis y biotransformaciones, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

[2]Área Microbiología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

[3] Grupo de Biofísica Computacional, Departamento de Ciencias Biológicas, CENUR Litoral Norte, UdelaR, Salto, Uruguay

[4]Unidad de Bioinformática, Instituto Pasteur de Montevideo

mageteliz@gmail.com

El flúor es un elemento clave utilizado como bioisostero en las industrias farmacéutica y agroquímica[1]. Debido a sus características fisicoquímicas, las moléculas fluoradas presentan mayor selectividad, afinidad de unión, estabilidad metabólica y tiempos de circulación prolongados en comparación con análogos no fluorados[2]. Aun así, la introducción química de flúor en moléculas orgánicas presenta limitaciones en cuanto a rendimiento, selectividad e impacto ambiental. Una estrategia para abordar este problema es el uso de biocatalizadores. Las fluorinasas son halogenasas SAM-dependientes que catalizan la formación de enlaces C-F a partir de S-adenosil-L-metionina (SAM) e iones fluoruro. No obstante, hasta la fecha solo se han reportado 16 fluorinasas con actividad enzimática confirmada, existiendo escasa literatura sobre su empleo como biocatalizadores para sintetizar compuestos organofluorados[3].

El objetivo de este trabajo es el diseño racional de nuevas fluorinasas asistido por descriptores multidimensionales, análisis de dinámica molecular y herramientas basadas en inteligencia artificial (IA). Analizamos el eje secuencia-estructura-función usando potenciales electrostáticos (APBS), predicción de cavidades (CRAFT), potenciales de interacción con fluoruro (CMIP) y simulaciones de dinámica molecular. El análisis fisicoquímico *in silico* fue a su vez combinado con enfoques basados en IA (ProteinMPNN), con la finalidad de identificar los mejores candidatos a ser expresados y estudiados *a posteriori* en laboratorio. Esperamos que nuestra estrategia acelere el descubrimiento de fluorinasas funcionales, como forma de abordar la escasez de enzimas disponibles para bioprocesos sostenibles.

1. Ogawa, Y. et al. (2020). Current Contributions of Organofluorine Compounds to the Agrochemical Industry. iScience, 23(9), 101467. https://doi.org/10.1016/j.isci.2020.101467
2. Monkovic, J. et al (2022). Fluorinated Protein and Peptide Materials for Biomedical Applications. Pharmaceuticals, 15(10), 1201. https://doi.org/10.3390/ph15101201
3. Pardo, I. et al(2022). A Nonconventional Archaeal Fluorinase Identified by In Silico Mining for Enhanced Fluorine Biocatalysis. ACS Catalysis, 12(11), 6570-6577. https://doi.org/10.1021/acscatal.2c01184

GeeMELD: Plegamiento *in silico* de estructuras de G-cuádruplex de ADN guiado por Dicroismo Circular y reglas de emparejamiento

Santiago Pintos[1,2]; Jockent Gaza[3,4]; Ari Zeida[5]; Victoria Calzada[1]; Gabriela da Rosa[2]; Alberto Perez[3,4]; Pablo D. Dans[2,6]

[1]*Aptamer Group, CIN, FCIEN, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Departamento de Ciencias Biológicas, CENUR LN, UdelaR, Salto, Uruguay.*

[3]*Departament of Chemistry, Universidad de Florida, EE.UU.*

[4]*Quantum Theory Proyect, Universidad de Florida, EE.UU.*

[5]*Departamento de Bioquímica y CEINBIO, FMED, Udelar, Montevideo, Uruguay.*

[6]*Unidad de Bioinformatica, Instituto Pasteur de Montevideo, Uruguay.*

spintos@fcien.edu.uy

El G-cuádruplex (G4) es una estructura secundaria que pueden adoptar tanto el ADN como el ARN, formada por el apilamiento de tetrámeros de guanina, estabilizados por enlaces de hidrógeno y cationes monovalentes como K^+ y Na^+. Estas estructuras desempeñan un papel clave en procesos biológicos como la regulación génica, reparación del ADN, señalización de estrés y formación de condensados biomoleculares, y están implicadas en teorías sobre el envejecimiento celular, al contribuir a la estabilización estructural del genoma, y en el desarrollo de enfermedades neurodegenerativas como el Alzheimer. Los G4 también se posicionan como blancos farmacológicos (y nuevas drogas) prometedores en el contexto de enfermedades oncológicas, neurodegenerativas y virales. Sin embargo, el conocimiento estructural de G4 sigue siendo limitado: los métodos experimentales de alta resolución (RMN, cristalografía de rayos X, Cryo-EM) han revelado detalles atómicos de aproximadamente 500 G4 únicos depositados en el PDB, cifra que contrasta con las más de 200.000 estructuras de proteínas disponibles. Son métodos caros, de difícil acceso y que no permiten la generación sistemática de estructuras.

Para abordar estas limitaciones, desarrollamos GeeMeld, una estrategia que integra experimentos de dicroísmo circular, datos estructurales reportados en el PDB y simulaciones de Dinámica Molecular sesgadas (MELD), para predecir con alta precisión el plegamiento de estos G4. GeeMeld busca resolver un problema no resuelto de la biología estructural, generando un impacto significativo en el entendimiento de procesos biológicos dónde la formación de G4 sea relevante y en el diseño de nuevos dispositivos terapéuticos.

Caracterización espectroscópica y electroquímica de pigmentos para celdas solares DSSC

Mauricio Fabián Ávila; María Fernanda Cerdá

Laboratorio de Biomateriales, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

mavila@fcien.edu.uy

La energía solar representa una alternativa energética altamente atractiva debido a que su fabricación requiere menos agua, genera menores residuos y proporciona autonomía energética al reducir la dependencia de combustibles fósiles importados, además de ser una fuente inagotable en escala temporal humana. Entre las tecnologías fotovoltaicas disponibles, las celdas solares sensibilizadas por pigmentos (DSSC) son especialmente prometedoras, al poder fabricarse con recursos locales y ser integradas directamente en edificios (BIPV), combinando eficiencia energética con uso óptimo de los espacios[1,2].

En el presente trabajo se realizó una caracterización espectroscópica y electroquímica exhaustiva, para determinar parámetros cinéticos y termodinámicos de estándares, tanto de pigmentos naturales (Delfinidina-3-Glucósido, Cianidina-3-Glucósido y Fucoxantina), como sintéticos de referencia (N3 y Z907). De igual manera, para los electrolitos basados en la cupla Yoduro/Triyoduro (I^-/I_3^-) más utilizados en celdas DSSC (Iodolyte y AcVal). Las técnicas espectroscópicas utilizadas fueron las espectrofotometrías UV-Vis y de Fluorescencia, mientras que las electroquímicas fueron Voltamperometría Cíclica en Dilución Semiinfinita (SILDCV), Voltamperometría Cíclica en Capa Delgada (TFCV) y Espectroscopia de Impedancia Electroquímica (EIS).

La caracterización termodinámica de los pigmentos incluyó la medida sus potenciales estándar de reducción $\left(E_{red}^0\right)$ para determinar la Energía de Gibbs de inyección electrónica hacia el semiconductor $\left(\Delta_{inj}G^0\right)$, sus potenciales de oxidación (E_{ox}^0) para determinar la Energía de Gibbs de regeneración del pigmento oxidado por la cupla redox $\left(\Delta_{DRg}G^0\right)$, y energía de transición (E_{0-0}), la cual permite determinar la diferencia de energía entre el estado excitado del pigmento y el nivel de cuasi-Fermi del semiconductor. A nivel cinético se determinaron los tiempos de recombinación (Γ_{rec}) y transporte (Γ_{transp}) para establecer el balance entre los procesos de transferencia electrónica productiva y los procesos que disminuyen la eficiencia operativa de la DSSC bajo iluminación.

En lo que concierne a los electrolitos, se determinaron sus potenciales de oxidación y reducción, para establecer la compatibilidad energética con el ciclo regenerativo de los pigmentos.

Finalmente, se ensamblaron celdas DSSC sensibilizadas con tales pigmentos, y se obtuvieron los perfiles J-V, determinando su máxima eficiencia bajo condiciones estándar AM 1.5G, estableciendo así relaciones fundamentales entre las propiedades de los pigmentos, los electrolitos y la eficiencia fotovoltaica final.

(1) Gajdzik, B.; Wolniak, R.; Nagaj, R.; Žuromskaitė-Nagaj, B.; Grebski, W. W. The Influence of the Global Energy Crisis on Energy Efficiency: A Comprehensive Analysis. *Energies* **2024**, *17* (4), 947.

(2) Ye, M.; Wen, X.; Wang, M.; Iocozzia, J.; Zhang, N.; Lin, C.; Lin, Z. Recent Advances in Dye-Sensitized Solar Cells: From Photoanodes, Sensitizers and Electrolytes to Counter Electrodes. *Mater. Today* **2015**, *18* (3), 155–162.

Un estudio sobre la estabilidad de antocianinas y su complejación con metales

Abril González; María Fernanda Cerdá

[1]*Laboratorio de Biomateriales, IQB, Facultad de Ciencias, UDELAR, Montevideo, Uruguay*

15eipril@gmail.com

Las celdas solares sensibilizadas con pigmentos (DSSC) son dispositivos fotovoltaicos donde el pigmento fotosensibilizador que se adhiere al TiO_2 es crucial para el funcionamiento de la celda. El pigmento es el encargado de absorber la luz y generar electrones que serán transferidos al TiO_2, comenzando así el ciclo de funcionamiento de la DSSC[1].
Las antocianinas son compuestos naturales abundantes en flores, frutas y hojas. Su capacidad para actuar como fotosensibilizadores en DSSC ha sido ampliamente demostrada, reportándose eficiencias de conversión de energía que superan las de otros pigmentos naturales[2]. Al mismo tiempo, ha sido reportada la degradación de las antocianinas bajo la acción de luz y calor, pudiendo afectar la eficiencia de las celdas a lo largo del tiempo.
En este trabajo se explora la posibilidad de mejorar la estabilidad de la delfinidina-3-glucósido extraída del fruto pitanga mediante la complejación con metales de transición, como Cr(III) y Fe(III).
La complejación con metales puede proporcionar una mayor resistencia a la degradación, estabilizando la estructura del pigmento y previniendo además la desorción de las moléculas desde la superficie del TiO_2.
Para determinar la mejor relación molar entre metal y antocianina, se realizan estudios de complejación a diferentes valores de pH, evaluando los cambios mediante espectroscopia UV-visible. Por último, el comportamiento redox de las antocianinas y de los complejos metálicos es analizado por medidas de voltamperometría cíclica.

Referencias:

[1] Montagni, T., Chialanza, M. R., & Cerdá, M. F. (2023). Blueberries as a Source of Energy: Physical Chemistry Characterization of Their Anthocyanins as Dye-Sensitized Solar Cells' Sensitizers. *Solar*, *3*(2), 283-297. https://doi.org/10.3390/solar3020017

[2] Iqbal, M. Z., Ali, S. R., & Khan, S. (2019). Progress in dye sensitized solar cell by incorporating natural photosensitizers. Solar Energy, 181, 490-509. https://doi.org/10.1016/j.solener.2019.02.023

Desarrollo de un modelo Coarse-Grained Híbrido para el estudio de aptámeros de ADN

Gabriela da Rosa[1]; Adrian Roitberg[3]; Pablo D. Dans[1,2]

[1]*Computational Biophysics Group, Department of Biological Sciences, CENUR Litoral Norte, Universidad de la República, Salto, Uruguay.*

[2]*Bioinformatics Unit, Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay.*

[3]*Department of Chemistry, University of Florida*

gdarosa@litoralnorte.udelar.edu.uy

Los aptámeros son moléculas cortas de ADN o ARN monocatenario con creciente relevancia en diagnóstico y terapias, por su alta especificidad de acción sobre diversos blancos moleculares. Su flexibilidad estructural es clave para esta función, pero plantea desafíos a la hora de realizar estudios conformacionales, ya que el estado activo no siempre coincide con la estructura más estable ni con el subestado más poblado. Esto resalta la necesidad de utilizar herramientas capaces de capturar todo el espectro conformacional. (Sullivan et al., 2019). La caracterización de estos subestados puede lograrse mediante metodologías de muestreo mejorado, pero los enfoques atomísticos suelen ser computacionalmente costosos y poco eficientes para alcanzar escalas de tiempo biológicamente relevantes. En este contexto, los modelos *coarse-grained* (CG) ofrecen una alternativa prometedora, aunque muchos están limitados a estructuras secundarias estáticas o ideales, resultando poco adecuados para predecir plegamientos no canónicos.

En este trabajo, presentamos un modelo CG novedoso para simular aptámeros y estructuras no canónicas de ADN, basado en un hamiltoniano híbrido, que incluye principios físicos y potenciales estadísticos, implementado mediante dinámica molecular. Cada nucleótido se representa con un esquema simplificado capaz de describir enlaces de Watson-Crick y Hoogsteen, que es común en motivos no canónicos. Para representar la diversidad estructural del *backbone*, utilizamos potenciales estadísticos generados a partir del análisis de la pseudo-torsión η–θ de estructuras experimentales (da Rosa et al., 2024). Realizamos muestreo umbrellla 2D con nuestro campo de fuerzas CG, y ajustamos estos cálculos al potencial estadístico η–θ para obtener parámetros refinados y reproducir estructuras no canónicas. El modelo será aplicado al estudio del plegamiento de aptámeros conocidos, guiado por motivos secundarios predichos.

Sullivan, R; Adams, M; Naik, R; Milam, V. (2019). Analyzing Secondary Structure Patterns in DNA Aptamers Identified via CompELS. Molecules. 24. 1572. 10.3390/molecules24081572.

da Rosa, G; Grille, L; Dans PD (2024) Ramachandran-like Conformational Space for DNA. *Journal of Chemical Information and Modeling 64*(21), 8339-834810.1021/acs.jcim.4c01294.

Validación de una técnica espectrofotométrica adaptada para la determinación de fósforo total en muestras de bioestimulantes líquidos.

Milagros Campos[1]; Melina Dorrego[1]; Sofía Cufré[1]; Gustavo García Pintos[2]

[1] Tecnólogo Químico, UTEC, ITRSO, UdelaR, ANEP-DGETP, Paysandú, Uruguay.
[2] BIOCIS S.A.S, Paysandú, Uruguay.
milagros.campos@estudiantes.utec.edu.uy

En la búsqueda de prácticas efectivas para mejorar el rendimiento y la salud de los cultivos, se presentan como respuesta los bioestimulantes, una alternativa eficaz y sostenible en el manejo agrícola. Se entiende por bioestimulante a una sustancia o microorganismo que, al ser aplicado en las plantas, es capaz de mejorar la absorción de nutrientes, la tolerancia al estrés y diversas características agronómicas. Su acción se debe a la presencia de compuestos activos como los extractos de algas, aminoácidos, ácidos húmicos o microorganismos beneficiosos, que actúan sobre procesos fisiológicos específicos de las plantas. Algunos bioestimulantes líquidos pueden contener pequeñas cantidades de fósforo, como parte de su composición o como residuos de los procesos de fabricación. Conocer el contenido de fósforo en estos productos es importante no solo para evitar aportes nutricionales no deseados que alteran la planificación del manejo agronómico, sino también para garantizar que el efecto observado se atribuya correctamente a su acción bioestimulante [1]. Con este fin, se planteó validar una metodología para la cuantificación del contenido de fósforo total en muestras de bioestimulantes líquidos. Se evaluaron las cifras de mérito según los criterios de validación de la Guía Eurachem [2]. El límite de cuantificación fue de 0,52 mg P/L, con una precisión que fue evaluada en términos de repetibilidad y precisión intermedia, obteniendo un RSD de 4% y 12% respectivamente. La veracidad fue evaluada en dos niveles 5 y 25 mg P/L, obteniendo un porcentaje de recuperación de 92%. La técnica analítica seleccionada permitió cuantificar de manera efectiva el contenido de fósforo total en tres muestras comerciales, dando valores en un rango entre 11 y 20 mg P/L. Los resultados reflejan que los bioestimulantes no aportan niveles significativos de fósforo y que su presencia se puede deber a los procesos de fabricación de los productos.

Referencias bibliográficas

[1] Universidad Europea (8 de enero, 2025). *Biofertilizantes y Bioestimulantes: aplicaciones en el campo agrícola*. Recuperado de: https://universidadeuropea.com/blog/biofertilizantes-bioestimulantes/

[2] Eurolab España. P.P. Morillas y colaboradores. *Guía Eurachem: La adecuación al uso de los métodos analíticos – Una Guía de laboratorio para la validación de métodos y temas relacionados (1ª ed. 2016)*. Recuperado de: https://www.eurachem.org/index.php/mnu-tsk-mv

Optimización de las variables críticas para la extracción de metales pesados de matrices vegetales mediante el uso de disolventes eutécticos

María Eugenia Roman; Florencia Tissot; Fiorella Iaquinta

Departamento de Química Analítica (DEC), Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.
maru.euger@gmail.com

La presencia de metales pesados como Cd, Cu, Cr, Mn, Ni y Pb en matrices ambientales constituye actualmente una problemática crítica de contaminación ambiental, dado el riesgo que constituyen para la salud humana y los ecosistemas. Estos metales están presentes de forma natural en el ambiente, pero su concentración ha tenido un aumento sostenido en las últimas décadas debido al desarrollo de diversas actividades antropogénicas [1,2].

La extracción cuantitativa de estos metales presentes en matrices ambientales es un paso crítico previo a su análisis. Tradicionalmente, este proceso se realiza mediante digestión ácida, una técnica efectiva pero que implica el uso de reactivos altamente corrosivos y genera residuos peligrosos. En respuesta a la demanda de metodologías más sostenibles y seguras, los disolventes eutécticos profundos (DES, por sus siglas en inglés) han surgido como una alternativa verde para la extracción de metales en este tipo de matrices [3]. Estos disolventes, compuestos por mezclas eutécticas de bajo punto de fusión, son biodegradables, de baja toxicidad y fácilmente sintetizables, lo que los convierte en una opción prometedora para reducir el impacto ambiental del análisis químico.

Típicamente un DES se forma por la interacción de un donador de protones (HBD) y un aceptor de protones (HBA). En el presente trabajo se utilizó cloruro de colina como HBA y se presenta la optimización de los parámetros críticos de extracción como ser el tipo de HBD (urea, fenol, ácido oxálico), la relación molar HBA:HBD, el volumen de disolvente utilizado, la masa de muestra y el tiempo de extracción.

La optimización respecto al tipo de HBD a utilizar y la relación molar HBA:HBD, fue llevada a cabo a partir de un diseño experimental factorial de 2 variables a 3 niveles. La determinación analítica fue llevada a cabo mediante Espectrometría de Absorción Atómica de Llama. Fueron seleccionados a partir de los datos y las respectivas superficies de respuesta obtenidas para los analitos ácido oxálico como HBD en relación molar 1:2 con cloruro de colina como HBA. Además, se realizaron pruebas experimentales con el fin de optimizar el volumen de DES, la masa de muestra y el tiempo de extracción. En este caso se recurrió a un diseño experimental de tipo Box Behnken de 3 factores a 3 niveles. Nuevamente mediante superficies de respuesta para cada analito se lograron identificar los parámetros óptimos para la extracción, siendo de 45 minutos el tiempo, 0,2 g la masa de muestra y 1 mL de DES.

Tras la optimización, se realizó una comparación entre los resultados obtenidos mediante la metodología propuesta y los resultados obtenidos con digestión ácida asistida por microondas como tratamiento de muestra con el fin de determinar si ambas extracciones presentan eficiencias del mismo orden o si existen diferencias significativas entre ambas metodologías.

Referencias

[1] Zhang, Y., & Wang, Y. (2018). "Sources and distribution of heavy metals in urban soils: a case study in the city of Xi'an, China." *Environmental Science and Pollution Research*.

[2] Alloway, B. J. (1995). "Heavy Metals in Soils." *Environmental Pollution*.

[3] Smith, E. L., Abbott, A. P., & Ryder, K. S. (2014). Deep eutectic solvents (DESs) and their applications. Chemical Reviews, 114(21), 11060–11082. https://doi.org/10.1021/cr300162p

Avances en el desarrollo de un sistema en flujo multibombeo con detección fotométrica para la determinación de Cromo(VI) en aguas

Magalí Molina[1]; Pablo González[2]; Alicia Mollo[2]; Eduardo Méndez[3]

[1]*Estudiante de la carrera Químico, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[2]*Área de Química Analítica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[3]*Laboratorio de Biomateriales, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

magalimolinafq@gmail.com

El Cromo es un elemento químico que en aguas puede encontrarse mayoritariamente como Cr(III) o Cr(VI), siendo el primero un nutriente esencial y el segundo altamente tóxico y carcinogénico. El Cr(VI) en aguas naturales y residuales representa un riesgo para la salud y el ambiente, por lo que monitorearlo es esencial. En Uruguay, el decreto 253/979 establece límites para el Cromo total en aguas, siendo el máximo permitido 50 µg L^{-1} (aguas clase 1, 2 y 3) y 500 µg L^{-1} (aguas clase 4: cursos de agua que atraviesan zonas urbanas).

El método de la normativa técnica para determinar Cr(VI) en aguas [1] se basa en la reacción de este con la 1,5-difenilcarbazida que forma un complejo de color púrpura intenso, proporcional a la concentración del analito, cuyo máximo de absorción es a 540 nm.

El objetivo de este trabajo fue adaptar dicho método a un sistema de Análisis en Flujo Multibombeo (MPFA) para aumentar la eficiencia analítica y reducir el consumo de reactivos.

Se diseñó y optimizó un sistema MPFA de 3 líneas, con detector fotométrico construido en el laboratorio (basado en LED y fotodiodo), controlado con una placa Arduino NANO y una interfaz de usuario programada en MATLAB. Los parámetros optimizados fueron: volumen de patrón/muestra bombeada (valores ensayados: 100, 200, 300, 400, 500 y 600 µL; valor óptimo: 300 µL), proporción reactivo-patrón/muestra (proporciones ensayadas: 1-1, 1-2, 1-3, 1-4, 2-1, 3-1; proporción óptima: 1-3) y tiempo de flujo detenido para desarrollo del color (valores ensayados: 0, 2, 4, 6 y 10 min; valor óptimo: 0 min). En estos avances, se evaluó linealidad hasta 2000 µg L^{-1} (A=0,1295.[Cr(VI)]; R^2= 0,996) y se estimó el límite de detección (3s), resultando de 60 µg L^{-1} (Cr). Se están implementando cambios en los componentes del sistema buscando mejorar el límite de detección y proceder a la validación del método.

Los avances muestran que en principio el sistema podría ser empleado para la determinación de Cr(VI) en aguas clase 4, lo que resulta en una alternativa eficiente y sostenible en muestras de agua para la cuantificación del analito. Además, el sistema ofrece la posibilidad de ser escalado a un analizador autónomo de campo, portable.

[1] Método 3164UY. DINAMA. Noviembre 2017, versión 4.

Los autores agradecen a PEDECIBA – Química por el apoyo brindado.

Optimización de la formulación de un curasemilla: evaluación de excipientes con enfoque en reducción de costos y preservación de calidad

Aparicio Loaces[1]; Inés Santos[2], Cintia Palladino[3], Ismael Noguerol[1]; Lucía Pareja[2]

[1]*Laboratorio I+D Agro, Compañía Cibeles, Joaquín Suarez, Uruguay.*

[2]*Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay.*

[3]*Departamento de Protección Vegetal, Facultad de Agronomía, EEMAC, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay.*

aloaces@cibeles.com.uy

El tratamiento de semillas es una práctica habitual en la agricultura moderna, que consiste en la aplicación de productos fitosanitarios sobre la semilla para proteger al cultivo en sus primeras etapas. El uso de polímeros en estas formulaciones permite mejorar la adhesión de los ingredientes activos, reducir la lixiviación y la emisión de polvo rico en sustancias activas, y modular su liberación. Además, el recubrimiento polimérico actúa como barrera frente a estreses abióticos, mejora la eficacia del tratamiento y puede favorecer una germinación más rápida y uniforme al generar un microambiente alrededor de la semilla [1]. En este trabajo se evaluó la incorporación de un polímero de recubrimiento en una formulación curasemilla para arroz a base de tiametoxam (70 g/L) y tebuconazol (6 g/L). Se formularon dos versiones del producto, con y sin polímero de recubrimiento. Las semillas fueron tratadas y evaluadas en cuanto a cobertura (análisis de imágenes), adhesión (según CIPAC MT 194), y parámetros de germinación (tasa y porcentaje), empleando un control positivo y negativo. El ensayo de germinación se realizó en macetas de 10 cm de altura conteniendo 450 g de sustrato (humus : tierra : arena : 2 : 1 : 1), se sembraron 7 semillas por maceta (unidad experimental) y se realizaron siete réplicas por tratamiento (bloques). El ensayo se realizó por triplicado. Además, se estudió la absorción de los ingredientes activos en plántulas de arroz mediante un método basado en QuEChERS modificado validado por nuestro grupo de trabajo según el Documento No. SANTE/11312/2021 (V1) y análisis por LC-QTOF/MS. Ambos productos no mostraron diferencias significativas en los ensayos de germinación y absorción de pesticidas. Sin embargo, la formulación con polímero presentó mejor adhesión y cobertura del tratamiento, lo que podría representar una ventaja en términos de seguridad y manejo. En conjunto, estos resultados sugieren que la inclusión del polímero no afecta negativamente la eficacia del producto, aunque su impacto en términos agronómicos debe ponderarse frente al costo adicional que implica su incorporación.

Agradecimientos: Licenciatura en Análisis Alimentario, UTEC por ceder el equipo de LC-QTOF/MS para el análisis de residuos.
Referencias: [1] Langlet, R., Valentin, R., Morard, M., & Raynaud, C. D. (2024). Molecules, 29 (23), 5750.

Síntesis y caracterización de complejos heterobimetálicos de Pd(II), Pt(II) y Ni(II) con potencial actividad contra *Trypanosoma cruzi*

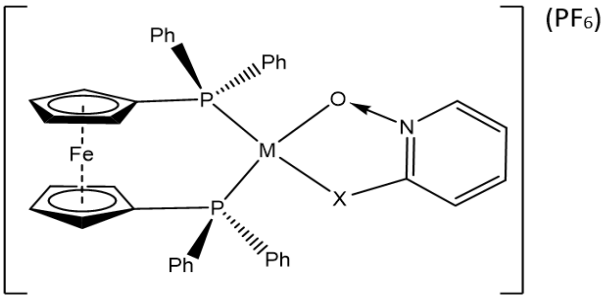
Luciana Rodríguez[1]; Carolina Del Mármol[1]; Esteban Rodríguez Arce[2]; Dinorah Gambino[1]

[1]*Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[2]*Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile*

lucianarodriguez02@gmail.com

La enfermedad de Chagas, causada por el protozoo *Trypanosoma cruzi*, representa un desafío sanitario crítico en regiones endémicas de América Latina. Debido a los movimientos migratorios ha comenzado a emerger en otras zonas geográficas. Los fármacos en uso clínico para su tratamiento presentan reacciones adversas, no resultan efectivos en la fase crónica de la enfermedad, implican tratamientos prolongados y han generado cepas resistentes.
En este contexto, nuestro grupo de investigación ha trabajado en el desarrollo de nuevos compuestos de coordinación de fórmula general [M(mpo)(dppf)](PF_6), donde M = Pd(II), Pt(II), Hmpo = 1-óxido de 2-tiol piridina y dppf = 1,1'-bis(difenilfosfino)ferroceno, los cuales mostraron prometedora actividad antitripanosomátida, y se profundizó en el estudio de sus mecanismos de acción[1-3]. En este trabajo se propone la síntesis del compuesto análogo de Ni(II) debido a su pertenencia al mismo grupo de la tabla periódica que Pd(II) y Pt(II), con los que comparte propiedades estructurales y electrónicas, y con la hipótesis de que, tratándose de un metal esencial, su citotoxicidad en células mamíferas pudiera ser menor. Adicionalmente, se propone sintetizar nuevos complejos de Ni(II), Pd(II) y Pt(II) con el ligando análogo Hopo (1-óxido de 2-ol piridina), con el objetivo de evaluar cómo influye la naturaleza del átomo donador X en las propiedades estructurales, fisicoquímicas y biológicas de la serie (**Figura 1**). Los compuestos fueron caracterizados por análisis elemental de C, N y H, y espectroscopías FTIR y RMN. Los compuestos están en proceso de ser evaluados en *Trypanosoma cruzi* y células VERO (células mamíferas modelo).



M = Pd(II), Pt(II), Ni(II)

X= S, O

Figura 1. Estructura general de los complejos [M(L)(dppf)](PF_6)

Referencias:
[1] E. Rodríguez Arce, *et al.*, *Dalton Transactions*, 2015, 44, 14453–14464.
[2] M. F. Mosquillo, et al., *Metallomics* 2020, 12, 813-828.
[3] M.F. Mosquillo, et al., *ChemBioChem* 2023, doi: 10.1002/cbic.202300406.

Síntesis de ligandos bifuncionales como conectores de *quantum dots* a iones lantánidos para el desarrollo de nuevos materiales luminiscentes

Gabriela Idarreta; Julia Torres; Carolina Mendoza

Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

Los iones lantánidos, Ln, presentan la capacidad de emitir luz de energía característica, lo que los posiciona en un lugar único para ser empleados en diversas aplicaciones ópticas. Sin embargo para lograr emisiones eficientes, estos iones deben ser sensibilizados adecuadamente. Para ello, una estrategia posible es emplear *quantum dots* QD, que puedan transferir energía al Ln mediante un mecanismo FRET (Förster Resonance Energy Transfer) ver Figura 1a. Si bien existen antecedentes exitosos de dopaje de QD con Ln[1], este trabajo se enfocó en una alternativa menos explorada que es la síntesis de ligandos bifuncionales que actúen como conectores entre QD y Ln, con el objetivo posterior de amplificar el mecanismo FRET. Los ligandos preparados son de cadena de largo variable (con o sin anillo 1,2,3-triazol), por una parte, con grupos tiol para su anclaje a los QD, y por otra, con grupos carboxilato (5-hidroxiisoftalato o iminodiacetato) coordinativos para unir los Ln (europio, terbio) ver Figura 1b. Para ello, se prepararon, entre otros, los precursores di-metil proargil isoftalato y azida butiltioacetato, los cuales se hicieron reaccionar aplicando mecanismo click de cicloadición de alquinos y azidas catalizado por Cu(I)[2,3] con rendimiento global de 60%, Figura 1c. Los productos fueron caracterizados por espectroscopía RMN, IR y análisis elemental. Se estudiaron asimismo sus características ópticas en presencia de Ln con vistas a su aplicación.

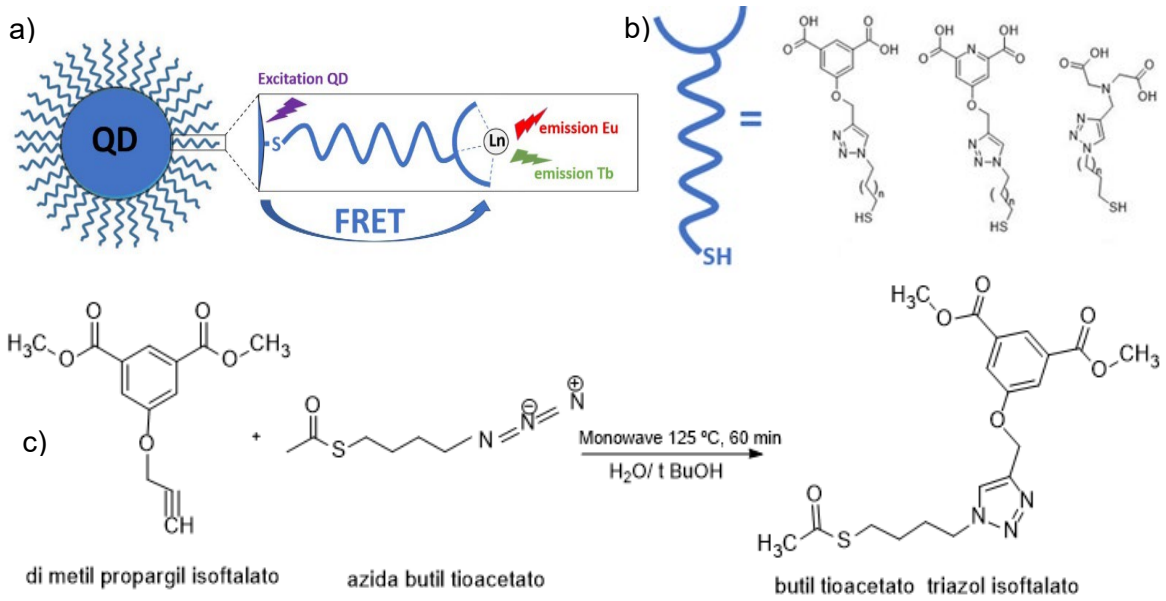


Figura 1- a) Esquema del posible mecanismo FRET mediado por ligando. b) Estructuras de los ligandos en preparación. c) Reacción click entre precursores alquino y azida derivado, con catalizador Cu(I).

[1] A. Tigaa, G. J. Lucas, A. de Bettencourt-Dias, *Inorg. Chem*. 2017, 56, 3260.
[2] V. V. Rostovtsev, L. G. Green, V. V. Fokin, B. Sharpless, *Angew. Chem. Int.* Ed., 2002, 41, 2596.
[3] H. C. Kolb, M. G. Finn, K. B. Sharpless, *Angew. Chem. Int*. Ed., 2001, 40, 2004.

Relajación lenta de la magnetización en compuestos de coordinación basados en rutenio(III)

Federico Mesa[1,2]; Carolina Pacheco[1]; Lorena Martinez[1]; Nicolás Veiga[1]; Javier Gonzalez-Platas[3]; Carlos Cruz[4]; Verónica Paredes-García[4]; Raúl Chiozzone[1]

[1]Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

[2]Programa de Posgrado, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

[3]Departamento de Física, IUDEA, Universidad de La Laguna, La Laguna, España

[4]Departamento de Ciencias Químicas, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Andrés Bello, Santiago, Chile

fmesa@fq.edu.uy

El estudio de las propiedades magnéticas de los compuestos de coordinación conteniendo iones paramagnéticos ha sido el foco de nuestro grupo de investigación. La relajación lenta de la magnetización resulta particularmente atractiva ya que se observa en los imanes moleculares (SMM, por su sigla en inglés). Los metales de transición 4d han sido relativamente menos estudiados, encontrándose escasos ejemplos de SMM conteniendo iones Ru(III) en la literatura [1,2].

En este trabajo se presenta el estudio de las propiedades magnéticas de dos nuevos compuestos de coordinación conteniendo el complejo *trans*-$[Ru^{III}Cl_2(ox)_2]^{3-}$. Por un lado, la sal *trans*-$[PPh_4]_2[RuCl_2(Hox)(ox)]$ (**1**), y por otro lado la cadena $[RuCl_2(\mu\text{-}ox)_2La(H_2O)(dmf)_4]_n$ (**2**), donde el $[Ru^{III}Cl_2(ox)_2]^{3-}$ es utilizado como bloque de construcción y actúa como puente entre dos iones lantano(III). En ambos casos los iones iones rutenio se encuentran relativamente alejados entre si, siendo la menor distancia Ru···Ru 9,79 Å para **1** y 8,83 Å para **2.**

La variación de la susceptibilidad con la temperatura para ambos compuestos se corresponde con iones rutenio magnéticamente aislados. Su comportamiento se simuló además computacionalmente utilizando el método ab-initio CASCFF. Las medidas de magnetismo dinámico se realizaron en un rango de temperatura de 2 – 13 K y a distintos campos. La susceptibilidad fuera de fase de **1** y **2** muestra dependencia con la frecuencia en presencia de un campo estático, observándose que la relajación magnética se da fundamentalmente por un proceso Raman. Los tiempos de relajación en un campo de 200 mT y a una temperatura de 2 K son de 1,3 x 10^{-2} s y 3,5 x 10^{-3} s para **1** y **2**, respectivamente.

Estos resultados muestran que ambos compuestos actúan como imán molecular inducido por el campo. En particular, **1** destaca como el tercer ejemplo de especie mononuclear de Ru(III) con comportamiento de SMM.

[1] Orts-Arroyo, M. et al. *Magnetochemistry* 8 (2022) 93.

[2] Wu, SQ. et al. *Chem. Eur. J.* 23 (2017) 10028.

Optimización de síntesis micelar en agua de nanopartículas de hematita

María Pía García[1]; Rossannie Guasamucare[2]; Livia Arizaga[1]

[1]Área Química Inorgánica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química
[2]Área de Tecnología Farmacéutica y Control de Calidad de Medicamentos. Departamento de Ciencias Farmacéuticas (CIENFAR)
Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

mpiagarcia.s14@gmail.com

La síntesis y caracterización de nano-materiales es un tema que está en auge desde hace aproximadamente 20 años. Se conoce que la materia a escala nanométrica (10^{-9} m) presenta propiedades que difieren a las de la materia a mayor escala. Este fenómeno se debe en parta a la mayor relación superficie/volumen que se presenta a dicha escala. Es por ello que resulta muy llamativo el diseñar y obtener materiales a escala nano, dado que se puede modular propiedades que no se observan a escala macro, y de esta forma, obtener materiales diseñados a medida para los usos deseados.

A la hora de obtener los nanomateriales, suelen elegirse técnicas bottom-up o de abajo hacia arriba, que permiten un diseño racional teniendo en cuenta las propiedades que se desean en el producto final.

Las nanopartículas de hierro (FeNPs) si bien son conocidas, presentan un desafío a la hora de obtenerlas, dado que en presencia de oxígeno el hierro se oxida, dando lugar a óxidos e hidróxidos del mismo. Se debe recurrir al uso de atmósfera sin oxígeno y protección de los nano materiales obtenidos, de forma que estos no se oxiden. Se suele recurrir a técnicas como la funcionalización de las NPs con polímeros que actúen como agentes de protección a la vez que las funcionalizan modulando su actividad.

Este trabajo presenta un método simple y sencillo para la síntesis y caracterización de NPs de hematita (Fe_2O_3) por un método micelar en agua[1] previamente desarrollado por el grupo para otros sistemas, utilizando una mezcla de surfactante catiónico (CTAB) y uno no iónico (Tergitol® NP10) en fase acuosa, bajo atmósfera de N_2. Luego se funcionalizan las mismas con polivinilpirrolidona (PVP) y polivinilacohol (PVA) para su protección. Se evaluó las propiedades fisicoquímicas de los nanomateriales obtenidos por dispersión dinámica de luz (DLS), potencial zeta, espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FT-IR), Microscopia Raman Confocal, Difracción de rayos X en polvo (DRX) y medidas de susceptibilidad magnética.

[1] R. Guasamucare, E. Parente, J. C. Pereira, L. Arizaga, J Surfact Deterg. 2024,1–13.

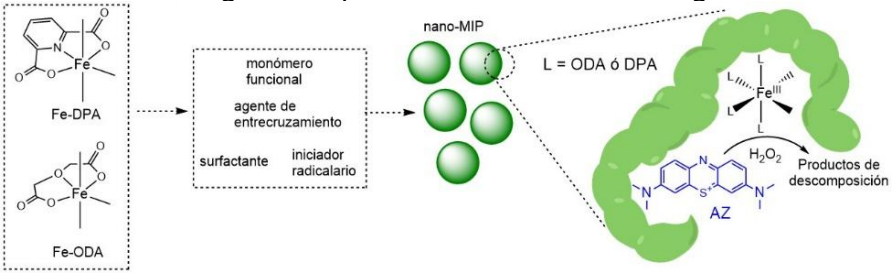
Diseño de nuevos nano-materiales poliméricos conteniendo hierro para la descontaminación de efluentes industriales y aguas naturales

Guillermo Rivera[1]; Rossannie Guasamucare[2]; Ignacio Pires Quintas[3]; Ricardo Faccio[1]; Livia Arizaga[3]; Nicolás Veiga[3]

[1] Física, Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay
[2]Química Cosmética, Departamento de Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay
[3]Química Inorgánica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay
guillermorivera93@gmail.com

El incremento sostenido de la contaminación de aguas por colorantes industriales plantea un problema ambiental crítico, especialmente en países como Uruguay, donde estos contaminantes provienen de las industrias textil y del cuero.[1] Su resistencia a la biodegradación altera la eco-homeostasis acuática y compromete la calidad del agua potable.[2] Frente a las limitaciones de las técnicas tradicionales de tratamiento de efluentes, los procesos oxidativos avanzados (POA) han surgido como alternativas prometedoras. Los POA generan *in situ* especies reactivas del oxígeno a partir de peróxido de hidrógeno y un catalizador, las que son capaces de atacar y descomponer contaminantes orgánicos persistentes. Entre los catalizadores más utilizados se encuentran los iones Fe(III) inmovilizados en soportes sólidos, debido a que permiten minimizar la formación de lodos, reducir el consumo de H_2O_2 y facilitar su reutilización. No obstante, muchos de los materiales desarrollados hasta el momento presentan limitaciones importantes en cuanto a costo, estabilidad estructural y eficiencia catalítica.

Este trabajo propone el desarrollo de nuevos nanomateriales poliméricos basados en la inmovilización de complejos Fe(III) en polímeros de impresión molecular (nano-MIPs), orientados a la adsorción de colorantes contaminantes y/o a su degradación mediante H_2O_2. Se comenzó preparando nano-MIPs conteniendo los complejos Fe-DPA o Fe-ODA a través de dos estrategias. Por una parte, síntesis en balón bajo atmósfera inerte, y por otro lado síntesis bottom-up en medios micelares utilizando una combinación de CTAB y NP10 como surfactantes[3]. Las fases obtenidas fueron caracterizadas mediante DLS, FTIR y XRD de polvo, confirmando la naturaleza química y polimérica de los sólidos, y un tamaño de partícula promedio que oscila entre 5 y 500 nm dependiendo del sistema. Estamos realizando ensayos de degradación y adsorción, suspendiendo los nano-MIPs en una solución del contaminante azul de metileno (AZ) y monitoreando espectroscópicamente la decoloración en presencia y ausencia de H_2O_2. Los primeros resultados evidencian una alta capacidad inicial de secuestro del AZ por los nano-MIPs, seguida de procesos más lentos de degradación oxidativa.



[1] C. GEA Consultores Ambientales, Gestión ambiental en el sector secundario, Intendencia de Montevideo-Instituto Clemente Estable-UdelaR, Montevideo, Uruguay, 2005. [2] R. Javaid, U. Y. Qazi, Int. J. Environ. Res. Public Health, 2019, 16. [3] R. Guasamucare, et al., J. Surfactants Deterg.,2025, 28(3), 557–569.

Síntesis micelar de nanopartículas de borato de zinc, una alternativa eco-friendly

Juan Carlos Pereira[1]; Franco Cancela[2]; Rossannie Guasamucare[3]; Marcos Imer[4]; Livia Arizaga[2]

[1]*Laboratorio de Petróleo, Hidrocarburos y Derivados, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad de Carabobo, Valencia, Venezuela*
[2]*Área Química Inorgánica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*
[3]*Área de Tecnología Farmacéutica y Control de Calidad de Medicamentos. Departamento de Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*
[2]*Intel Corporation, Santa Clara, California, USA*

fcancela@fq.edu.uy

La degradación de la madera por acción de organismos xilófagos y la combustión representan desafíos significativos en su uso como material estructural y decorativo. En este contexto, la aplicación de agentes protectores como el borato de zinc ha despertado creciente interés, dada su baja toxicidad para mamíferos, su eficacia frente a hongos e insectos y su capacidad para mejorar el comportamiento ignífugo del material. A diferencia de otros tratamientos químicos convencionales, el borato de zinc actúa como antimicrobiano y retardante de llama simultáneamente, sin comprometer las propiedades mecánicas ni la apariencia natural de la madera. Estas características lo posicionan como una alternativa atractiva dentro de las estrategias de preservación sustentable y segura de productos madereros.

El uso de nanopartículas en el tratamiento de madera ha cobrado relevancia en los últimos años debido a su capacidad para mejorar la performance de los agentes protectores. A escala nanométrica, la capacidad antimicrobiana y retardante de llama pueden potenciarse significativamente debido al aumento del área superficial específica y la mejor penetración en la matriz lignocelulósica.

En este trabajo se reporta un método de síntesis amigable con el medio ambiente de nanopartículas de borato de zinc (ZnBNPs) para utilizar como aditivo en productos de ingeniería de madera. Se plantea la preparación de las ZnBNPs mediante un método micelar en ausencia de disolventes orgánicos[1] empleando un blending de surfactantes catiónico (CTAB) y no iónico (Tergtiol→ NP10) en agua. Las micelas actúan como nano reactores que limitan el tamaño de las partículas a obtener. Las ZnBNPs se caracterizaron por dispersión dinámica de luz (DLS), espectroscopía infrarroja FTIR, difracción de rayos X de polvo (DRX de polvo), microscopía electrónica de barrido (SEM).

Esta alternativa para obtener las NPs de abajo hacia arriba o bottom-up representa una vía prometedora para el desarrollo de antimicrobianos multifuncionales más eficientes, compatibles con estrategias de preservación sustentables.

[1] R. Guasamucare, E. Parente, J. C. Pereira, L. Arizaga, *J Surfact Deterg*. 2024,1–13.

Síntesis y caracterización de complejos de Pd (II) y Pt (II) como potenciales inhibidores de MPro de SARS-CoV-2

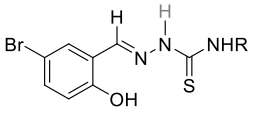
Inés Arandia[1]; Santiago Rostán[1]; Mercedes Fernández[1]; Micaela Marco[1]; Alexia Clavijo[2]; Jonathan Bastidas[3]; Andrés Vega[4]; Martín Fló[5]; Andrea Medeiros[3,6]; Marcelo Comini[3]; Graciela Mahler[2]; Lucía Otero[1]

[1]Área de Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay; [2]Laboratorio de Química Farmacéutica, DQO, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay; [3]Laboratorio de Biología Redox de Tripanosomas, Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay; [4]Departamento de Química, Universidad Andrés Bello, Santiago, Chile; [5]Laboratorio de Inmunovirología, Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay; [6]Departamento de Bioquímica, Facultad de Medicina, UdelaR, Montevideo, Uruguay.
iarandia@fq.edu.uy

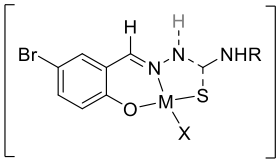
La enzima MPro de SARS-CoV-2 es una cisteín-proteasa que constituye un blanco atractivo para el diseño de nuevos antivirales. Por otro lado, algunos derivados de tiosemicarbazonas y sus complejos metálicos han mostrado actividad inhibidora frente a otras cisteín-proteasas. En base a lo anterior, en este trabajo se detalla la síntesis y caracterización de complejos metálicos de Pd(II) y Pt(II), con fórmulas generales [MCl(HL)] y [M(PPh_3)(L)], L = tiosemicarbazonas derivadas de 5-bromosalicilaldehido (Fig 1). Los complejos se caracterizaron en disolución y en estado sólido, incluyendo la resolución de la estructura cristalina por difracción de rayos X de monocristal de [Pd(PPh_3)(L3)] y [Pt(PPh_3)(L2)]. Se obtuvo además el complejo [PdCl(PPh_3)(HL2)]. La incorporación de los co-ligandos Cl y PPh_3 tiene por finalidad modular tanto la estabilidad como la lipofilia de los complejos, además de influir potencialmente en el mecanismo de inhibición enzimática.

Los resultados de la inhibición de MPro muestran que las tiosemicarbazonas libres tienen una actividad de baja a moderada. El efecto de la complejación con paladio sobre la actividad enzimática depende de la naturaleza del co-ligando. Para los complejos [Pd(PPh_3)(L)] se observa una pérdida de actividad inhibitoria, mientras que para los complejos [PdCl(HL)] la actividad se conserva. Esta diferencia podría deberse a que la presencia del ligando lábil cloruro facilita la formación de una interacción covalente entre el centro metálico y la cisteína presente en el sitio activo de MPro. Para el ligando H_2L4 se observó un aumento significativo en la actividad inhibitoria como consecuencia de la complejación tanto para el complejo [PdCl(HL4)] como para [PtCl(HL4)] mostrando IC_{50} = 0,9 y 1,7 µM, respectivamente. Se encuentran en curso estudios de actividad antiviral para los compuestos más activos.

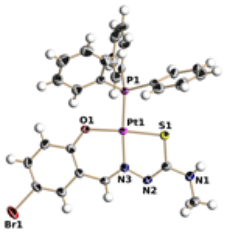
Fig 1. Complejos de Pd(II) y Pt(II) con tiosemicarbazonas derivadas de 5-bromosalicilaldehido (H_2L).



H_2L1-H_2L4
R = H, metil, etil, fenil



[MCl(HL)]
[M(PPh_3)(L)]
M = Pd(II), Pt(II)



[Pt(PPh_3)(L2)]

Estrategias para mejorar las propiedades biológicas de ligandos multifuncionales con potencial aplicación en enfermedades neurodegenerativas

Hebert Arcia[1,2]; Mercedes Fernández[1]; Martín Esteves[3]; Lucía Otero[1]; Julia Torres[1]

[1]Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.

[2]Programa de Posgrado en Química, Facultad de Química, UdelaR, Uruguay.

[3]Área Física, DETEMA, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.

harcia@fq.edu.uy

Las enfermedades neurodegenerativas, como la enfermedad Alzheimer, representan una de las principales causas de mortalidad en la población adulta mayor. Su carácter multifactorial y la complejidad de los mecanismos fisiopatológicos involucrados han motivado el desarrollo de estrategias terapéuticas basadas en compuestos multifuncionales. En este contexto, se sintetizaron dos ligandos híbridos tipo cumarina-quinolina (HL, ver figura 1) bases de Schiff, como plataformas polivalentes capaces de interactuar con diversos blancos biológicos. A partir de dichos ligandos se prepararon compuestos de coordinación con iones Zn(II) y Cu(II), de fórmula general [ML_2], ver figura 1, que fueron aislados y caracterizados mediante espectroscopía IR y ^{1}H-RMN, así como análisis elemental. El comportamiento en disolución de estos sistemas fue evaluado mediante potenciometría. Además, se estudió su inclusión en el MOF ZIF-8 (de Zn(II) y 2-metilimidazol), empleando un procedimiento de impregnación (ver figura 1). El seguimiento espectroscópico por UV-Vis reveló un desplazamiento en la banda principal de absorción del ligando en presencia del ZIF-8, sugiriendo una posible interacción coordinativa con los nodos metálicos del MOF. La caracterización por difracción de rayos X de polvo indicó que la estructura cristalina del ZIF-8 se mantiene tras el tratamiento. La elucidación estructural en estado sólido y en disolución de estos sistemas abre nuevas perspectivas para aplicarlos en estrategias terapéuticas contra enfermedades neurodegenerativas.

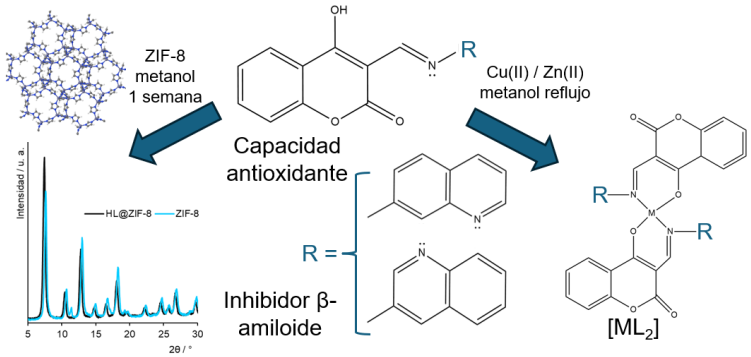


Figura 1- Ligandos sintetizados, ensayos de inclusión en ZIF-8 (izquierda) y preparación de compuestos de coordinación de Cu(II) y Zn(II) (derecha).

Hacia nuevos agentes diagnósticos por imagenología molecular: péptidos antimicrobianos radiomarcados con [^{18}F]AlF-NOTA.

Micaela Morais[1]; Jessica Osorio[1]; Gianna Cecchetto[2]; Javier Giglio[3]; Eduardo Savio[3]; Mariella Terán[1]

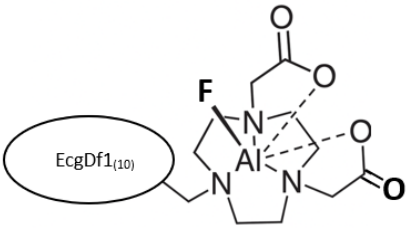
[1]*Radioquímica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Microbiología, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[3]*Departamento de Radiofarmacia, Centro Uruguayo de Imagenología Molecular, Montevideo, Uruguay*

micaelamorais_23@outlook.com

Los focos ocultos de infecciones implican un problema que requiere un diagnóstico temprano y exacto ya que cualquier retraso en este proceso podría tener consecuencias graves para la salud del paciente. Una metodología de alta sensibilidad, especificidad que permita la identificación y ubicación precisas, y que discrimine entre inflamación e infección, es esencial para un tratamiento adecuado y un uso racional de los recursos en el sistema de salud. En este sentido, la tomografía de emisión de positrones (PET) puede contribuir al diagnóstico mediante imágenes moleculares a través del desarrollo de radiofármacos específicos para focos de infección. Nuestro grupo ha trabajado con potenciales agentes basados en péptidos antimicrobianos (AMP). Estos, son componentes del sistema inmune innato de todos los organismos vivos desde bacterias a plantas y animales. En este caso presentamos la investigación realizada con el péptido EcgDf1$_{(10)}$ un análogo corto de la defensina EcgDf1, identificada en *Erythrina crista-galli* (Ceibo). El péptido se marcó con ^{18}F, un radionucleido de amplio uso en PET. La estrategia de marcado implicó la derivatización del EcgDf1$_{(10)}$ con un agente quelante bifuncional, el ácido 1,4,7-triazaciclononano-1,4,7-triacético (NOTA). Para la incorporación del radionucleido se utilizó el core [^{18}F]AlF, que permite formar un complejo estable de fluoruro de aluminio con el grupo quelante NOTA. El objetivo de este trabajo fue optimizar tanto las condiciones de marcación como los procedimientos de purificación del complejo [^{18}F]AlF-NOTA-EcgDf1$_{(10)}$, con el fin de obtener un producto radiomarcado con alta pureza radioquímica (PRQ), buena estabilidad y adecuado para aplicaciones en imágenes PET. Se evaluaron distintos parámetros de la reacción de marcación, entre ellos: temperatura, cantidad de ligando, tiempo de incubación, solvente de reacción, cantidad de $AlCl_3$. Asimismo, se desarrollaron y compararon diferentes estrategias de purificación para maximizar la pureza radioquímica, como HPLC y purificación en fase sólida.



Al momento se logró obtener el complejo [^{18}F]AlF-NOTA-EcgDf1$_{(10)}$, con PRQ> 90% y se está trabajando en su evaluación fisicoquímica.

Agradecimientos: Proyecto CSIC 2507, ANII (beca de doctorado: 177796), PEDECIBA, Centro interdisciplinario CEIBOS.

Caracterización estructural de compuestos de coordinación de Re-Ln obtenidos por modificación estructural de ligando (Ln = lantánido)

Maite Martirena Otero[1]; Nicolás Molner[2]; Joan Cano[2]; Leopoldo Suescun[3]; Carlos Rojas[1]; Ricardo González[1]

[1]*Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[2]*Instituto de Ciencia Molecular, Universidad de Valencia, Valencia, Spain*

[3]*Cryssmat-Lab, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

mmartirena@fq.edu.uy

El magnetismo molecular es un campo interdisciplinario en constante crecimiento que vincula áreas como la química de coordinación, la química supramolecular, la física del estado sólido y la cristalografía, entre otras. Tradicionalmente, la atención se ha centrado en complejos con metales 3*d* y 4*f*,[1] sin embargo el renio(IV) ha surgido como una alternativa atractiva dentro de los metales 5*d* debido a su configuración electrónica de espín S = 3/2 en su estado fundamental y su elevada anisotropía.[2] Con el objetivo final de estudiar nuevos materiales moleculares magnéticos, en este trabajo se presenta una nueva ruta sintética para la obtención de complejos heteropolinucleares formados por Re(IV) y lantánidos, utilizando como metaloligandos $[ReBr_5(Hinic)]^-$ y $[ReBr_5(Hnic)]^-$, siendo Hinic y Hnic los ácidos isonicotínico y nicotínico, respectivamente, capaces de coordinar al ion 4*f* a través del grupo carboxilato. Se obtuvieron dos familias de compuestos cuya conectividad y nuclearidad están determinadas por la posición del grupo carboxilato en el ligando. Como representantes se describen un compuesto hexanuclear $\{Gd_2Re_4\}$ (Compuesto 1), que cristaliza en el sistema triclínico (grupo espacial P$\underline{1}$), y un compuesto nonanuclear $\{Gd_3Re_6\}$ (Compuesto 2), que cristaliza en el sistema monoclínico (grupo espacial P2/n).

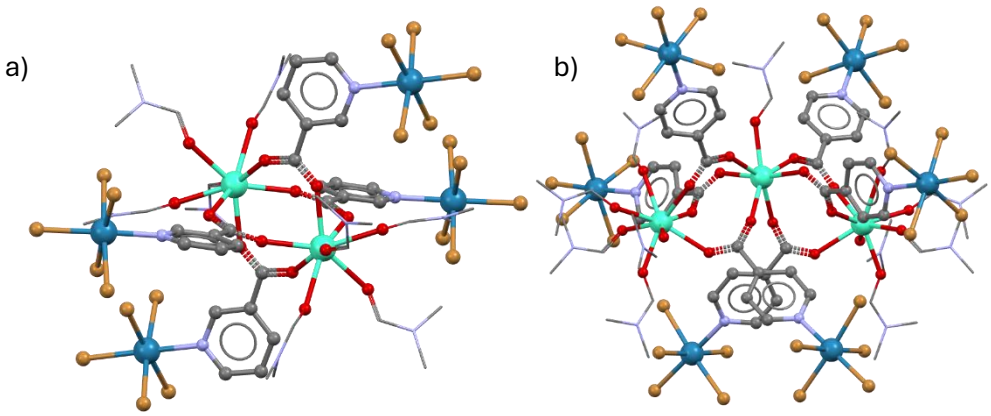


Figura 1. Representación de las estructuras del Compuesto 1 (a) y Compuesto 2 (b). Se omitieron las moléculas de solvente y de contraión por claridad

Bibliografía

(**1**) Chilton, N. F. *Annu. Rev. Mater. Res.* **2022**, *52*, 79–101.
(**2**) Martinez-Lillo, J., Faus, J., Lloret, F., & Julve, M. Coordination Chemistry Reviews, **2015**, 289, 215-237.

Impacto del procesamiento en flores de cannabis para exportación sobre los perfiles volátiles: aportes a la fijación de criterios de calidad

Juliana Viera[1,2,3]; Bruno de Souza[1,2]; Javier Varela[3]; Carlos García[2]; Eduardo Dellacassa[1]

[1]*Laboratorio de Biotecnología de Aromas, DQO, Facultad de Química-UdelaR, Montevideo, Uruguay*
[2]*Laboratorio de Farmacognosia y Productos Naturales, DQO, Facultad de Química-UdelaR, Montevideo, Uruguay*
[3]*Fotmer Life Sciences, Canelones, Uruguay*
[4]*Programa de posgrado en Química, Facultad de Química-UdelaR, Montevideo, Uruguay*

bdesouza@gmail.com

Cannabis sativa L. (Cannabaceae) es una planta medicinal para la que se hace necesario desarrollar material vegetal que mantenga un estándar de calidad y permita una clara discriminación quimiotaxonómica entre variedades. Los compuestos volátiles no cannabinoides permiten diferenciar variedades y comparar la variabilidad de una variedad en el tiempo, evaluando factores externos tales como las condiciones de crecimiento, nutrientes, clima.

Se tomaron 9 muestras de material vegetal (flores cosechadas y transportadas en nitrógeno líquido) de 2 variedades de cannabis (FOT 01 y FOT 05) cultivadas bajo condiciones estandarizadas para ser utilizadas como modelo de trabajo durante la etapa de floración, maduración y secado.

En este trabajo se presentan resultados de los perfiles volátiles obtenidos por destilaciónextracción simultáneos (SDE) y Head Space HS-SPME-GC-MS (HS) [(1)] para la etapa de material secado de FOT 01 y FOT 05. También se analizaron por HS los diferentes estadios de FOT 01. Se generaron matrices de composición para más de 100 compuestos, cuantificados mediante la adición de timol como estándar interno.

Su tratamiento estadístico mediante PCA permitió la discriminación de las muestras por variedad independientemente de la metodología de extracción utilizada. Para FOT 01 los diferentes estadios del cultivo no presentan variaciones significativas en la cuantificación de monoterpenos y sesquiterpenos oxigenados. Las variedades FOT 01 y FOT 05 se diferencian químicamente entre sí evaluando la composición mayoritaria para FOT 01 que presenta Terpinoleno Mirceno y E-Cariofileno mientras que FOT 05 Selina-3,7(11)-dieno, E-Cariofileno y Limoneno. Además, FOT 01 presenta en el producto terminado menor cantidad de α-Pineno, Geraniol y γ-Terpineno y mayor cantidad de Ácido acético y 2,3-Butanediol respecto a los primeros estadios muestreados.

En conclusión, ambas metodologías permiten la discriminación de la composición volátil, en tanto la metodología por HS es mucho más rápida y menos laboriosa que la extracción por SDE. Las variedades se diferencian químicamente entre sí y presentan variaciones en compuestos minoritarios para las diferentes etapas del cultivo. Estos datos permiten conocer el punto preciso en el cual es conveniente cosechar cada una de las variedades.

1. Viera, J. Puesta a punto de una metodología para la determinación de compuestos volátiles no cannabinoides en cannabis. Licenciatura en Química, Facultad de Química-UdelaR, 2020

Estudio de tres especies de *Senecio* con actividad antibiofilm

Sofía Raffaelli[1,2,3]; Álvaro Vázquez[1]; Silvana Alborés[2]

[1]*Laboratorio de Farmacognosia y Productos Naturales, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Área de Microbiología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[3]*Programa de Posgrados de la Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay*

sraffaelli@fq.edu.uy

Los biofilms microbianos son comunidades de microorganismos que se adhieren a superficies y se envuelven en una matriz protectora. En salud humana, representan un serio desafío, ya que están implicados en infecciones crónicas y son altamente resistentes a los tratamientos antimicrobianos convencionales. Esta resistencia se debe a la complejidad estructural del biofilm y a la capacidad de las bacterias de transferir genes de resistencia. Frente a esta problemática, los productos naturales han cobrado relevancia como una alternativa prometedora. Diversos compuestos presentes en extractos vegetales pueden interferir en diferentes etapas de la formación del biofilm, actuando de forma sinérgica y con menor probabilidad de generar resistencia. Dentro de estas fuentes naturales, el género *Senecio* (familia Asteraceae) destaca por su diversidad de especies distribuidas en diversas regiones del mundo. Estas plantas son conocidas por su riqueza en metabolitos secundarios, como alcaloides y flavonoides, los cuales podrían tener potencial actividad antimicrobiana y antibiofilm.

En este trabajo, se determinó la actividad antibiofilm de *Senecio crassiflorus, Senecio heterotrichus* y *Senecio brasiliensis* mediante ensayos de inhibición y erradicación de biofilms en microplaca contra *Staphylococcus aureus, Pseudomonas aeruginosa, Escherichia coli* y *Candida albicans.* Además, se determinó su capacidad de inhibir mecanismos como *quorum-sensing* y autoagregación. Se realizaron los ensayos por cuadruplicado y se realizó la comparación por test de Tukey. Por último, se realizó el estudio de sus metabolitos por cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas.

Todos los extractos obtenidos mostraron actividad antibiofilm contra *S. aureus* y *C. albicans.* Para cuatro de los extractos, se determinó capacidad de interferir con los mecanismos de formación de biofilms estudiados. Utilizando los espectros de masas, se obtuvo una aproximación a las estructuras de metabolitos potencialmente responsables de la actividad, como flavonoides y derivados del ácido cafeico.

Desarrollo y optimización de un método de extracción y cuantificación de bufotenina en semillas de *Anadenanthera colubrina* var. *cebil*

Valentina Perdomo[1]; Luisina Rodriguez[1]; Juan Manuel Mesa[1]; Romina Gonzalez[2]; Eduardo Dellacassa[3]; Gonzalo Hernandez[3]; Ana María Torres[2]; Ignacio Carrera[1]

[1]Laboratorio de Síntesis Orgánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

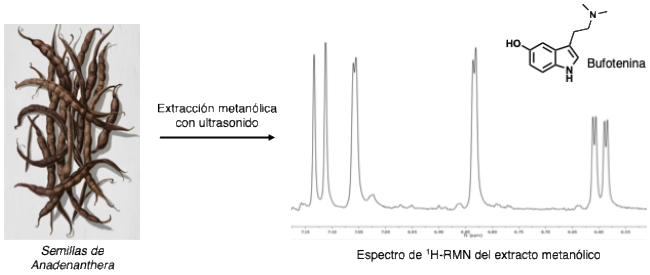
[2]Laboratorio de Productos Naturales- IQUIBA NEA-UNNE. Corrientes. Argentina

[3]Laboratorio de Biotecnología de Aromas, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay Udelar. Montevideo. Uruguay

vperdomo@fq.edu.uy

Anadenanthera colubrina es una planta nativa en países como Argentina, Bolivia, Ecuador, Paraguay, Perú y Chile. En el noroeste de Argentina existen dos variedades, *cebil* y *colubrina*, cuyas semillas son utilizadas por comunidades originarias en contextos espirituales, religiosos y medicinales.[1] El principio activo es la bufotenina (*N,N*-dimetil-5-hidroxitriptamina), pudiéndose encontrar otros alcaloides minoritarios.[1] No se encuentran estudios actuales sobre la composición química de semillas de estas variedades argentinas, siendo de gran interés por su uso etnofarmacológico y la posibilidad de intoxicaciones por usos recreativos actuales.

En este trabajo desarrollamos un método de extracción de bufotenina a partir de semillas de *Anadenanthera colubrina var cebil* recolectadas en las localidades de Corrientes capital y en Ituzaingó. Para ello se optimizaron las condiciones de extracción, utilizando cuatro ciclos con metanol bajo ultrasonido por 30 min. El contenido de bufotenina en el extracto fue cuantificado utilizando la técnica de Resonancia Magnética Nuclear cuantitativa (RMNc), mediante la identificación de señales aisladas en el espectro de ^{1}H-RMN. La metodología fue validada mediante estudios de recuperación y determinación de la precisión, límite de detección (LOD) y límite de cuantificación (LOQ). Los resultados indicaron un contenido de bufotenina de (11,82 ± 1,95) % en peso seco de semillas maduras para las recolectadas en Ituzaingó y de (10,28 ± 0,22) % para las de Corrientes capital. A su vez, se están realizado determinaciones para semillas verdes de ambas localidades, resultados que también serán presentados, para estudiar el efecto de la maduración en el contenido de bufotenina en la semilla.



Semillas de Anadenanthera colubrina var cebil

Espectro de ^{1}H-RMN del extracto metanólico

(1) Efron, Daniel H. Ethnopharmacological Search for Psychoactive Drugs, 1967. Synergetic press, 1967.

Síntesis de análogos del fitocannabinoide cannabigerol

Candela Gomez; Estefanía Dibello; Gonzalo Carrau

Laboratorio de Síntesis Orgánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

gomezcandela048@gmail.com

La búsqueda de nuevos compuestos con actividad antimicrobiana es fundamental dado que la resistencia a los antibióticos existentes es una problemática global.[1]

En la literatura se encuentra reportado que distintas moléculas de la familia de los fitocannabinoides exhiben potencial antimicrobiano.[2] En este contexto, el presente trabajo propone la síntesis de una mini-biblioteca de análogos del fitocannabinoide cannabigerol (CBG, Figura 1). Para ello, se plantea optimizar las condiciones de reacción para obtener CBG y análogos con diferentes cadenas carbonadas como sustituyentes (variaciones en R_1, R_2 y R_3, Figura 1).

El inicio de este trabajo consiste en la síntesis de CBG y sus análogos a través de la ruta sintética seleccionada, realizando modificaciones en las condiciones de reacción como la temperatura y el tipo de catalizador, con el objetivo de optimizar el rendimiento. Una vez alcanzadas las condiciones óptimas, se procederá a variar los materiales de partida para generar una mayor diversidad estructural en los compuestos obtenidos, mediante la variación de la cadena lateral del esqueleto de resorcinol (R_1) y los distintos alcoholes alílicos (R_3 y R_4).

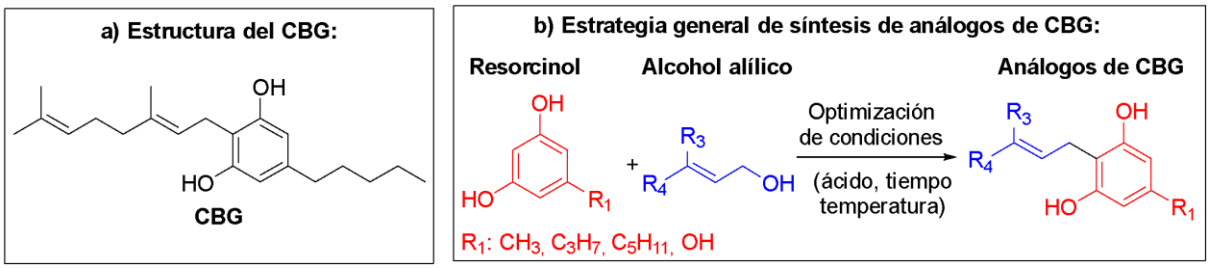


Figura 1: Estructura de CBG y estrategia general para la síntesis de análogos del mismo.

Agradecimientos: ANII (FCE_3_2024_1_181225) y PEDECIBA.

Referencias

(1) Habboush Y, Guzman N. Antibiotic Resistance. [Updated 2023 Jun 20]. In: StatPearls [Internet]. Treasure Island (FL): StatPearls Publishing; 2025 Jan-. https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK513277/

(2) Maya A. Farha, Omar M. El-Halfawy, Robert T. Gale, Craig R. MacNair, Lindsey A. Carfrae, Xiong Zhang, Nicholas G. Jentsch, Jakob Magolan, and Eric D. Brown ACS Infectious Diseases 2020 *6* (3), 338-346. doi: 10.1021/acsinfecdis.9b00419

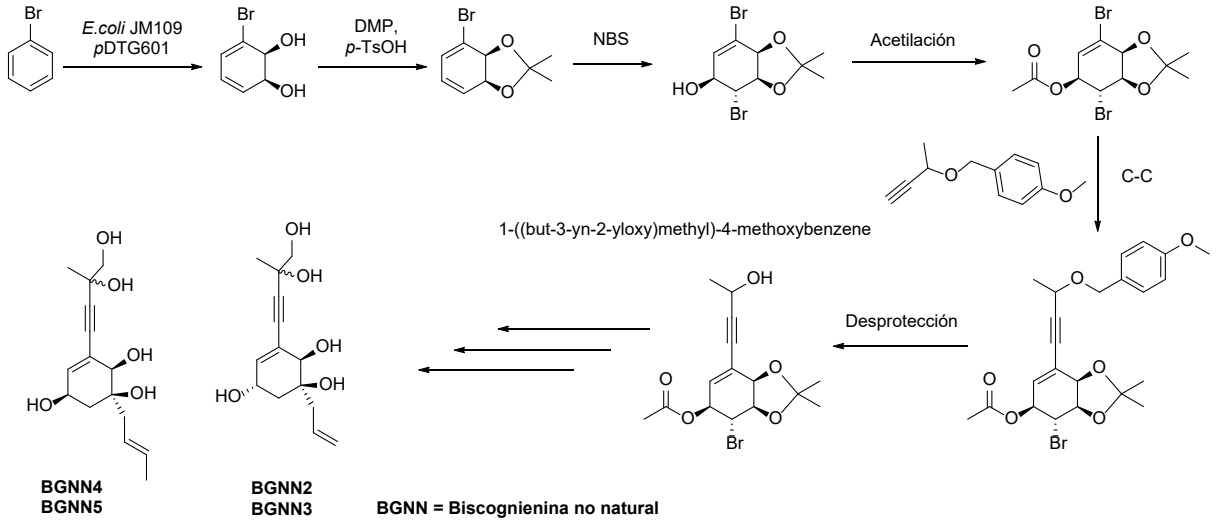
Síntesis estereoselectiva de potenciales nuevos bioherbicidas

Juan Vega; Valeria Schapiro

Laboratorio de Síntesis Orgánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

juanvega@fq.edu.uy

La síntesis enantioselectiva de compuestos naturales bioactivos, como las biscognieninas, es clave en química orgánica por sus aplicaciones farmacéuticas y agroquímicas. Estos meroterpenoides, aislados de hongos fitopatógenos, muestran actividad fitotóxica, lo que los convierte en potenciales bioherbicidas sostenibles. Sólo existe una síntesis racémica de la biscognienina B, por lo que nuestro grupo propone una ruta enantioselectiva innovadora mediante una metodología quimioenzimática para la preparación de estos compuestos. Esta se basa en la oxidación microbiana de arenos[1] para obtener materiales de partida quirales tipo *cis*-dienodioles, que han sido utilizados con éxito como precursores de variados productos naturales como especiosinas, yanutonas y gabosinas.[2,3,4] En esta oportunidad, dicha estrategia permitirá acceder a análogos de biscognieninas y otros compuestos bioactivos relacionados, como la harveynona y asperpentina. El enfoque enriquecerá la biblioteca de compuestos naturales tipo quinoides en los que hemos venido trabajando, buscando contribuir al desarrollo de alternativas ecológicas para el control de plagas. Los resultados podrían sentar las bases para desarrollar bioherbicidas específicos y de baja toxicidad, alineados con los principios de la agricultura sostenible.



[1] Vila, M.A.; Seoane, G.; Rodríguez Giordano, S. et al. *Adv. Synth. Catal.*, **2017**, 359, 2149-2157

[2] Tibhe, G. D.; Pandolfi, E.; Schapiro, V. et al. *Synthesis*, **2017**, 49, 565-570

[3] Colobbio, M.; Pandolfi, E.; Schapiro, V. *Molecules*, **2021**, 1423-1435

[4] Peixoto De Abreu Lima, A.; Suescun, L.; Pandolfi, E.; Schapiro, V. *New J. Chem.*, **2019**, *43*, 3653–3655.

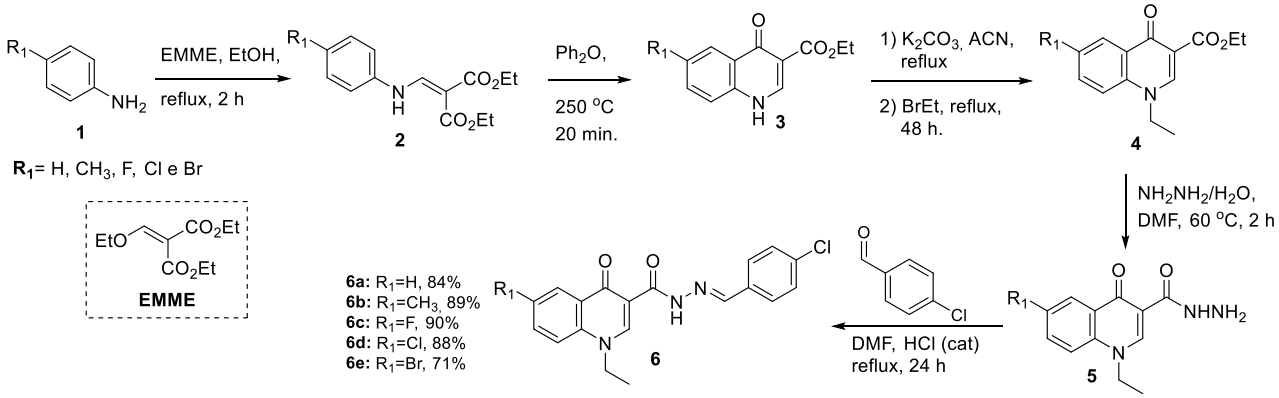
Synthesis and biological prospecting of 4-quinolone-3-acylhydrazone derivatives as potential anti-HIV-1 candidates

Yuri I. M. Silva; Fernanda da C. S. Boechat; Maria C. B. V. de Souza

Laboratorio de Nucleosídeos, Heterociclos e Carboidratos, Departamento de Química Orgânica, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Brasil

inacioyuri@id.uff.br

A major challenge in combating AIDS is the high mutation rate of HIV, which leads to resistance against reverse transcriptase inhibitors. The frequent emergence of resistant strains, combined with the virus's genetic diversity and multiple subtypes, often undermines the effectiveness of existing treatments.[1,2] Many compounds containing the 4-quinolone nucleus have clinical applications as antibacterials, as well as so-called non-classical activities, such as antiviral properties — with Elvitegravir being one example.[3] In this study, 4-quinolone-3-acylhydrazone derivatives were synthesized and are being evaluated against HIV-1 virus. Initially, anilines (1a-e) were subjected to a condensation reaction with diethyl ethoxymethylenemalonate (EMME), followed by thermal cyclization yielding 4-quinolones (3a-e). These compounds were then alkylated with bromoethane leading to compounds 4a-e. Subsequently, these substances were reacted with hydrazine monohydrate to obtain hydrazides 5a-e. These derivatives, in turn, were reacted with p-chlorobenzaldehyde under acid catalysis, producing 6a-e (Scheme 1), with yields ranging from 18% to 44%. The structures of these substances were confirmed by spectroscopic data and are currently undergoing biological evaluation.



Scheme 1: Synthetic route for obtaining compounds **6a-e**.

(1) FELIZARDO, B. da S.; et al. Revista Multidisciplinar em Saúde, 2023, 35-43
(2) FERREIRA, R. C. S.; et al., Química Nova, 2010, 33 (8), 1743- 1755.
(3) AHMED, A.; DANESHTALAB, M., Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences, 2012, 15 (1), 52-72.

Síntesis de un Nuevo Derivado del Norbornadieno: Hacia el Desarrollo de Sistemas Moleculares para el Almacenamiento de Energía Solar-Térmica Amigables con el Ambiente

Guillermo López[1,2], Mariano Díaz[1,2]; Sofía García[1,2]; Victoria Proto[1,2]; Franco Castro[1,2]; Gustavo Seoane[3]; Juan Carlos Ramos[2,3]; Jorge S. Gancheff[1]

[1]Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.

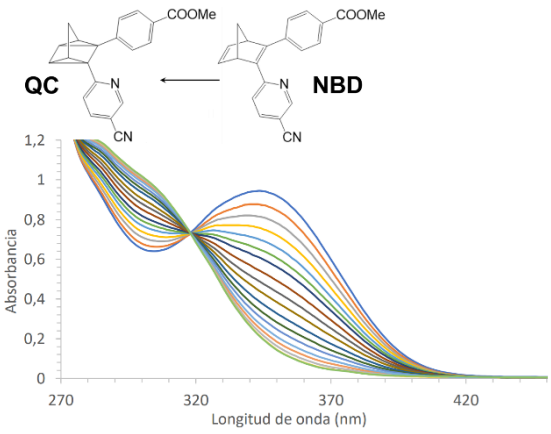
[2]Laboratorio de Química Fina, Instituto Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, Universidad de la República, Pando, Uruguay.

[3]Área Química Orgánica, DQO, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

glautarolopezperdomo@gmail.com

Recientemente, derivados del norbornadieno (NBD) han sido ensayados como sistemas moleculares para almacenamiento de energía solar-térmica (MOST, por su acrónimo en inglés). El almacenamiento energético ocurre producto de la conversión fotoinducida de los NBD en un isómero más energético (cuadriciclano, QC). La energía absorbida se almacena bajo la forma de nuevos enlaces por distintos períodos (típicamente de días), lo cual depende de la vida media del QC. Posteriormente, la energía almacenada puede ser liberada a demanda ↓a través de diferentes estímulos externos↓, etapa que regenera el NBD y cierra un ciclo sin emisiones.

Es deseable que la fotoisomerización NBD□QC se induzca con luz visible. Una estrategia eficiente para ello involucra la incorporación de un grupo donador y otro aceptor de electrones en las posiciones 2 y 3 del anillo, respectivamente. Esto conforma un sistema *push-pull*, lo que origina corrimientos batocrómicos del máximo de absorción respecto al NBD prístino. Sin embargo, esta estrategia da lugar típicamente a compuestos altamente conjugados e hidrofóbicos, por lo que la aplicación de estos sistemas como MOST está limitada a solventes orgánicos.



Para ampliar la aplicabilidad de los sistemas MOST y desarrollar alternativas amigables con el ambiente, nuestro grupo se ha enfocado en la obtención de NBDs solubles en agua. En este trabajo, se presentan resultados preliminares de una nueva estrategia explorada, que consiste en la incorporación de un grupo piridin-derivado en la posición 2 del NBD ↓que se transformará en un grupo piridonio para permitir la solubilización del NBD en agua. El nuevo compuesto contiene un grupo 5-cianopiridina en la posición 2 y un grupo *p*-carbometoxifenilo en la posición 3. Este derivado del NBD, que resultó absorber luz visible, mostró buenas propiedades como sistema MOST y esto contribuye a la viabilidad de la nueva estrategia para obtener alternativas de almacenamiento energético sustentables.

Síntesis de híbridos piridina-ácido borónico como inhibidores de betalactamasas de amplio espectro

Lucía Sadi[1]; Graciela Mahler[1]; Magdalena Rodríguez[1]; Cecilia Pozzi[2]; Alejandro Vila[3]; Brenda Warecki[3]; María Mojica[4]

[1]*Laboratorio de Química Farmacéutica, DQO, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[2]*Dipartimento di biotecnologie, chimica e farmacia, Università di Siena, Siena, Italia*

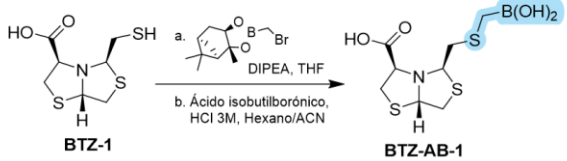
[3]*Instituto de Biología Molecular y Celular de Rosario, UNR – CONICET, Rosario, Argentina*

[4]*Department of Molecular Biology and Microbiology, Case Western Reserve University, Cleveland, US*

lsadi@fq.edu.uy

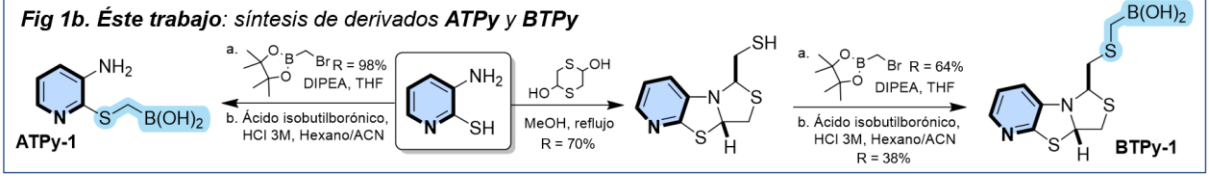
Las β-lactamasas (βL) son la principal causa de resistencia a antibióticos β-lactámicos (ATβ)[1]. Se clasifican en *serino-β-lactamasas* (SβLs), que hidrolizan el ATβ mediante un residuo serina, y *metalo-β-lactamasas* (MβLs), que utilizan una molecula de agua activada al coordinar con iones de Zn^{2+1}. La aparición de cepas que coexpresan NDM-1 (MβLs) y KPC-2 (SβLs) ha sido reportada a nivel regional y presenta una amenaza terapéutica creciente[2]. Una estrategia para contrarrestar la resistencia a ATβ es el desarrollo de inhibidores que restauren su eficacia. Actualmente, se comercializan únicamente inhibidores de SβL por lo que es de gran interés el desarrollo de inhibidores duales. En este sentido, los ácidos borónicos presentan un gran potencial, dada su capacidad de interactuar con el sitio activo de ambos tipos de enzimas[1]. Nuestro grupo tiene experiencia en síntesis de bistiazolidinas (**BTZ**) funcionalizadas con ácidos borónicos (Fig. 1a)[3]. En este trabajo se realizó la síntesis de nuevos derivados bistiazolopiridina (**BTPy**) y aminotiopiridina (**ATPy**), mediante una sustitución nucleofílica del grupo tiol y una estrategia de transesterificación para la desprotección del ácido borónico (Fig. 1b). El compuesto **BTPy-1** presentó actividad del orden micromolar frente a NDM-1 y SβLs (KPC-2, OXA-23). Mediante cristalografía de rayos X de los complejos **BTPy-1**:VIM-2 y **BTPy-1**:KPC-2 se confirmó la interacción del boro con el centro catalítico de las enzimas. A su vez, se determinó la citotoxicidad de los híbridos de **BTZ** y **BTPy** en líneas normales murinas y humanas. Se estudiará la CIM de los compuestos preparados y en base a estos resultados se diseñarán nuevos derivados con mayor potencia.

***Fig 1a. Antecedentes**: síntesis de derivados **BTZ** y actividad en MβL y SβL*



	IC_{50} MβL (μM)		IC_{50} SβL (μM)	
Compuesto	**NDM-1**	**VIM-2**	**KPC-2**	**OXA-23**
BTZ-1	13	7.2	>50	>50
BTZ-AB-1	49	2.3	0.2	>50

Fig 1b. Éste trabajo**: síntesis de derivados **ATPy** y **BTPy



(1) Brem, J.; et. al. *Nat Commun* **2016**, *7*, 12406; (2) Vásquez-Ponce, F.; et.al. *Microbiol. Spectr.* **2022**, 10 (5), e01159-22; (3) Villamil, V. Tesis de doctorado, UdelaR, 2022.

Evaluación ex vivo de la absorción de albendazol en *Mesocestoides vogae*: impacto de su formulación como nanocristales

Gerardo Duarte[1]; Elisa Melian[1]; Lucía Lopez Vidal[2]; Santiago Palma[3]; Beatriz Munguia[1]

[1]*Area Farmacología, CIENFAR, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Medical Biology Centre, School of Pharmacy, Queen's University Belfast, Northern Ireland, United Kingdom*

[3]*Unidad de Investigación y Desarrollo en Tecnología Farmacéutica (UNITEFA), CONICET y Departamento de Farmacia, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.*

gerardod@fq.edu.uy

Los cestodos son helmintos parásitos que afectan significativamente la salud humana y animal. Su tegumento sincitial, la capa externa que los recubre, desempeña un papel clave en la absorción de nutrientes y en la interacción con fármacos. Los benzimidazoles, en particular el albendazol (ABZ), son antihelmínticos ampliamente utilizados y efectivos contra este tipo de parásitos. Se ha identificado que la difusión pasiva es la principal vía de absorción de este compuesto y otros de la familia de los benzimidazoles, por lo que las estrategias de formulación destinadas a mejorar su solubilidad y permeabilidad podrían impactar positivamente en su eficacia. Como es sabido, la formulación de fármacos con baja solubilidad en forma de nanocristales permite mejorar tanto la velocidad de disolución como la solubilidad aparente del principio activo. En este trabajo se propuso utilizar un ensayo *ex vivo* en *Mesocestoides vogae* para evaluar si esta mejora en la velocidad de disolución se traduce en una mayor absorción a nivel del parásito, explorando así la utilidad del modelo como herramienta para estudios de absorción parasitaria.

Se recuperan larvas tetratirideas de *M. vogae* de la cavidad peritoneal de ratones infectados, y se incuban inmediatamente en PBS a 37 °C durante 60 y 120 minutos con dos formulaciones distintas de ABZ: ABZ–Poloxámer 188 en forma de nanocristales (NC-ABZ) y la mezcla física de sus componentes (MF) (6 réplicas). Tras la incubación, los parásitos se sometieron a un tratamiento de muestra mediante ultrasonido y posterior extracción en fase solida con columna C18 Sep-Pak para extraer ABZ y sus dos metabolitos sulfoxidados. Los eluatos finales se analizan mediante HPLC-DAD. La linealidad del método fue estudiada en el rango de calibración definido (168,7–3,2 nmol/mL). Además, se cuantificó la cantidad de proteínas en cada homogeinato utilizando un ensayo con kit de BCA con seroalbúmina bovina como estándar, para expresar los resultados de concentración de ABZ y sus metabolitos como nmol/mg de proteína del parásito. El análisis estadístico se realizó mediante un *unpaired t test* utilizando el software GraphPad Prism 10.

Tras 2 hs de incubación, la acumulación de ABZ fue significativamente mayor en los parásitos tratados con la formulación NC (168,8 ± 47,4 nmol/mg de proteína) en comparación con la MF (115,5± 29,9 nmol/mg de proteína) ($p < 0,05$). Estos resultados sugieren que este modelo *ex vivo* podría ser una herramienta de interés para estudios de absorción parasitaria y evaluación de nuevas estrategias de formulación de antihelmínticos cestocidas en desarrollo.

Síntesis de epóxidos en forma regio y estereoselectiva sobre plataformas no naturales

Florencia Carballido[1]; Margarita Brovetto[1]

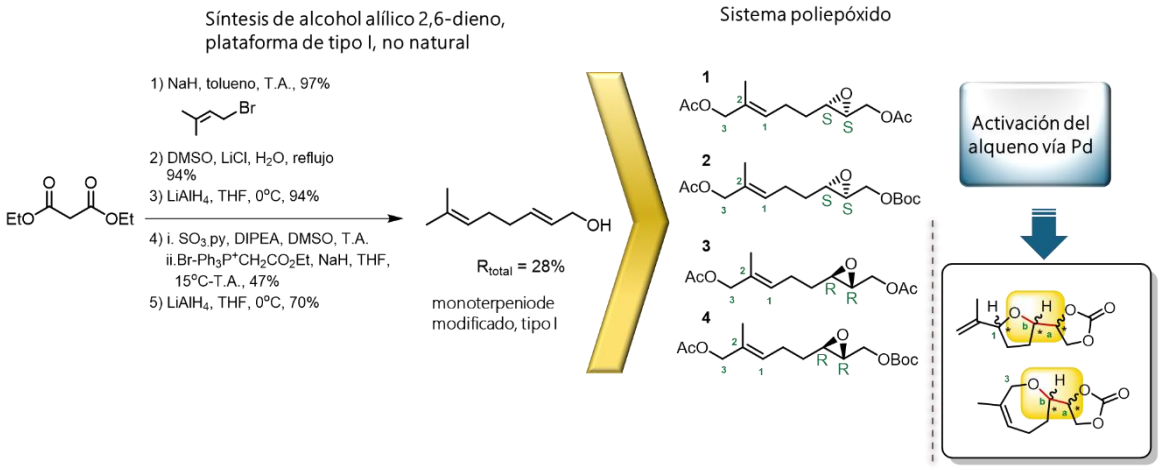
[1]*Laboratorio de Síntesis Orgánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química,*

Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

fcarballido@fq.edu.uy

Los alcoholes alílicos 2,6-dienos, del tipo geraniol son plataformas utilizadas para sintetizar oxaciclos en forma regioselectiva. Para ello una de las metodologías utilizadas se basa en la activación del alqueno terminal presente en este tipo de compuestos. Estas unidades presentan en su estructura tres zonas de reactividad bien diferenciada: alcohol alílico, doble enlace alílico interno y doble enlace aislado y terminal. Las dos primeras permiten la síntesis con diversidad estereoquímica de los poliepóxidos. Mientras que la tercera, mediante activación controlada, permite la correspondiente reacción de oxaciclación de los epóxidos, obteniéndose oxaciclos presentes en productos naturales marinos con diversidad estructural y relevantes actividades biológicas.[1,2] Si bien a partir del geraniol y sus epóxidos (obtenidos de forma regio y estereoselectiva) se puede predecir el tipo de oxaciclos mayoritarios a obtener mediante esta metodología; cuando se usan sistemas monoterpenoides modificados de tipo **I**, análogos no naturales del geraniol (Figura), la predicción es incierta.

Con el objetivo de estudiar cómo se comportan estos sistemas de tipo **I** frente a la oxaciclación nos propusimos sintetizar esta plataforma no natural y sus epóxidos. En el presente trabajo se presenta la síntesis de la plataforma de tipo **I**, a partir de ésteres malónicos; así como los avances hacia la síntesis de sus epóxidos en forma regioselectiva. El monoterpenoide análogo de geraniol se logró sintetizar en 5 pasos con un rendimiento global de 28% (Figura). Al momento nos encontramos en las etapas de síntesis de los epóxidos de forma regio y estereoselectiva.[3]



[1] Blunt, J. W.; Copp, B. R. *et al. Nat. Prod. Rep.***2013**, *30*, 237-323. [2] Vilotijevic, I.; Jamison, T. F. *Marine Drugs* **2010**, *8*, 763-809. [3] a) Katsuki, T.; Martin, V. S. *Org. React.* **1996**, *48*, 1-2; b) Katsuki, T.; Sharpless, K. B. *J. Am. Chem. Soc.* **1980**, *102*, 5974-5976; c) Brandes, B. D.; Jacobsen, E. N. *J. Org. Chem.* **1994**, *59*, 4378-4380; d) Jacobsen, E. N.; Zhang, W.*et al. J. Am. Chem. Soc.* **1991**, *113*, 7063-7064; e) Shi, Y. *Acc. Chem. Res.* **2004**, *37*,488-496

Síntesis de chalconas heterocíclicas como potenciales agentes antifúngicos

Matias Amaro[1]; Gabriel Jorge Sagrera[1,2]

[1]*Departamento de Quimica Organica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Instituto de Quimica Biologica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

mato_08@hotmail.es

El desarrollo de los fármacos antifúngicos se inició más tardíamente y de forma más lenta comparado con el de los antibacterianos. En las últimas décadas se han producido importantes avances en el conocimiento de la patogenia, diagnóstico y tratamiento de las micosis más frecuentes. Sin embargo, existen problemas relacionados con el uso de antifúngicos: toxicidad, espectro de acción limitado, baja biodisponibilidad o aparición de resistencia. Esto ha derivado en el consenso general mundial respecto a la necesidad de nuevas drogas antifúngicas, más eficaces y menos tóxicas. Existen varios tipos de antifúngicos, siendo el grupo de los compuestos azólicos uno de los más importantes. Los flavonoides son compuestos de estructura general C6-C3-C6, se encuentran ampliamente distribuidos en la naturaleza y aparecen en casi todas las plantas terrestres. Muchos flavonoides naturales y sintéticos poseen algún tipo de actividad biológica en animales y el hombre, o son utilizados en la industria. Entre las actividades biológicas se encuentran: antioxidantes, antimicrobianas, anticancerígenas, antialérgicas y antiinflamatorias. Los flavonoides son componentes importantes en la dieta humana, a pesar de que se consideran generalmente como no nutrientes. Se estima que la ingesta diaria de flavonoides oscila entre 50 y 1000 mg y se ha sugerido que deben poseer una toxicidad mínima si son ingeridos en las cantidades de una dieta típica vegetariana. Las chalconas son una familia de flavonoides que poseen una estructura general del tipo PhA-CO-CH=CH-PhB, donde PhA y PhB son anillos aromáticos.

En el marco de nuestra investigación relacionada con la síntesis y evaluación biológica de flavonoides, hemos sintetizado previamente una serie de chalconas sustituídas con grupos imidazolilo que han mostrado interesante actividad contra un panel de hongos patógenos de importancia en humanos.

En este trabajo se describe la síntesis de una pequeña biblioteca de chalconas sustituidas con anillos de indol, carbazol grupos de híbridos chalcona-miconazol.

Chalconas sustituidas con heterociclos: En primer término se preparan los benzaldehidos 4-sustituidos por reaccion entre 4-fluorobenzaldehido y un heterociclo nitrogenado (indol, carbazol, bencimidazol). Estos benzaldehidos se hacen reaccionar con las acetofenonas en medio basico para obtener las correspondientes chalconas.

Chalconas hibridas: En primer término se preparó el intermedio clave O-(4-carboxifenil)-1-(2,4-diclorofenil)-2-(1-imidazolil)etanol, a partir de 2,4-dicloroacetofenona, en cinco pasos de síntesis. Las chalconas hibridas se obtuvieron por condensación aldólica entre las correspondientes acetofenonas y el intermedio anterior

Todos los compuestos fueron purificados por recristalización o cromatografía en columna y caracterizados por RMN y EM

Síntesis de dihidrochalconas como potenciales antioxidantes para su uso en alimentos

Sebastian Alvarez[1]; Gabriel Jorge Sagrera[1,2]

[1]*Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

sebas1333@gmail.com

Los flavonoides se encuentran ampliamente distribuidos en el reino vegetal y poseen diversas actividades biológicas, entre ellas antioxidantes, antimicrobianas y anticancerígenas. Los alimentos comunes contienen una variedad de flavonoides cuya concentración oscila desde trazas hasta varios gramos por kilogramo de peso fresco. Son componentes importantes en la dieta humana, aunque se consideran como no nutrientes. Se estima que la ingesta diaria de flavonoides oscila entre 50 y 1000 mg, dependiendo del consumo de vegetales y frutas, vino tinto y té, aunque esta cantidad puede ser superior en personas que suplementan sus dietas con flavonoides. Se ha sugerido que los flavonoides deben poseer una toxicidad mínima si son ingeridos en las cantidades de una dieta típica vegetariana. Existe un interés creciente en el uso de flavonoides como antioxidantes naturales en preservación de alimentos, debido al rechazo de los consumidores a los antioxidantes sintéticos y también a sus propiedades beneficiosas para la salud. Las dihidrochalconas son una familia de flavonoides que poseen la estructura PhA-CO-CH2-CH2-PhB, donde PhA y PhB son grupos fenilo y muchas de ellas poseen propiedades antioxidantes

En el marco de nuestra investigación relacionada con la síntesis y evaluación biológica de flavonoides nos hemos propuesto preparar una pequeña biblioteca de dihidrochalconas que posean sustituyentes de diferentes características electrónicas, las que luego serán evaluadas como antioxidantes

En primer término se preparó una serie de precursores (acetofenonas y benzaldehídos) no disponibles comercialmente. Las chalconas se sintetizaron por condensación aldólica a partir de las correspondientes acetofenonas y benzaldehídos, en condiciones básicas
Las dihidrochalconas se prepararon por hidrogenación catalítica de las chalconas con formiato de amonio en presencia de Pd/C.

Todos los compuestos fueron purificados por recristalización o cromatografía en columna y caracterizados por RMN y EM

La actividad antioxidante será determinada en una etapa posterior por tres métodos: a) decoloración del radical difenilpicrilhidrazilo, b) oxidación acoplada de betacaroteno y ácido linoleico y c) fotoquímico (consumo de especies reactivas de oxígeno).

Estudio experimental y teórico de la apertura regio y estereoselectiva de epóxidos en sistemas cíclicos

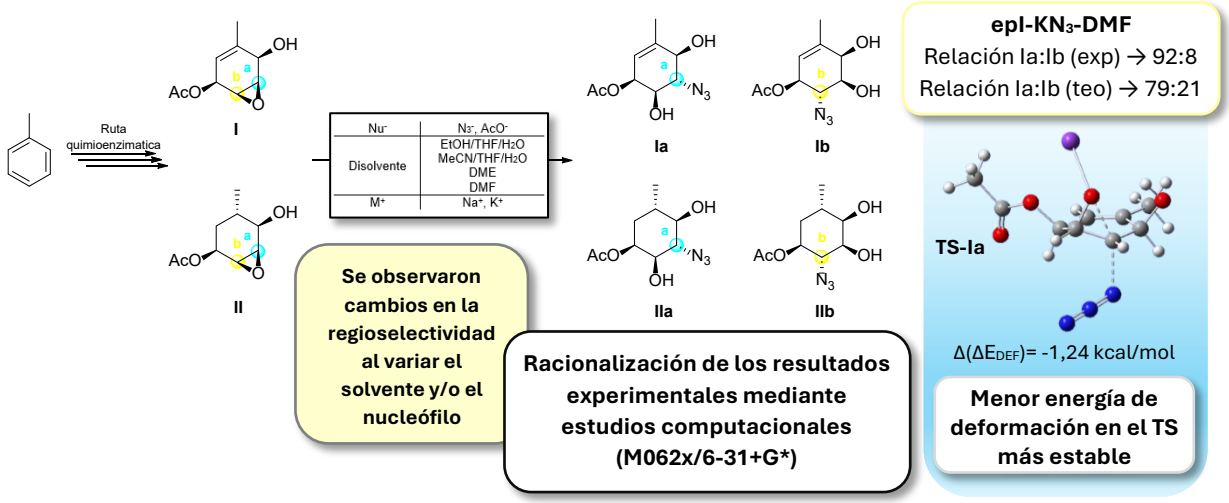
Natalia Cardozo[1]; Margarita Brovetto[1]; Nicolás Veiga[2]

[1]*Laboratorio de Síntesis Orgánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Quimica Inorgánica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

ncardozo@fq.edu.uy

Los epóxidos, heterociclos de tres miembros, tienen un atractivo especial que deriva de su aparente simplicidad y arquitectura espartana. Sin embargo, estos sistemas son multifacéticos y la literatura continúa brindando evidencia de su diversidad, tanto en términos de rutas preparativas como de transformaciones posteriores. Estos heterociclos presentan un balance sintético muy útil entre estabilidad y reactividad, por lo que a menudo se emplean como intermedios versátiles y selectivos. En particular los epóxidos presentes en sistemas cíclicos, del tipo epoxi-ciclohexanos, presentan a la hora de su apertura una regio y estereoselectividad sumamente dependiente de la estructura del epóxido, la naturaleza de los sustituyentes presentes en el ciclo y las condiciones de reacción (nucleófilo, disolvente, presencia de agentes coordinantes).[1,2] En este contexto, se estudió la apertura de epóxidos del tipo **I** y **II** (Figura) obtenidos mediante una ruta quimioenzimática a partir del tolueno. Para ello se emplearon diferentes nucleófilos (nitrogenados/oxigenados), disolventes (próticos/apróticos) y agentes coordinantes, buscando evaluar la influencia de estos parámetros en la regioquímica del sistema. Los cálculos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) permitieron identificar exitosamente los estados de transición, así como los factores electrónicos y estructurales que controlan la regioquímica de la reacción, y estimar la proporción de productos esperada a partir de la teoría del estado de transición[3].



(1) Thirumalaikumar, M. Ring Opening Reactions of Epoxides. A Review. Org. Prep. Proced. Int. 2022, 54 (1), 1–39.
(2) Padwa, A.; Murphree, S. S. Epoxides and Aziridines-A Mini Review. ARKIVOC 2005, 2006 (3), 6–33.
(3) Hansen, T.; Vermeeren, P.; Yoshisada, R.; Filippov, D. V.; Van Der Marel, G. A.; Codée, J. D. C.; Hamlin, T. A. How Lewis Acids Catalyze Ring-Openings of Cyclohexene Oxide. J. Org. Chem. 2021, 86 (4), 3565–3573.

Autoacoplamiento de benceno-1,2-diaminas para formar benzo[*c,g*][1,2,5,6]tetrazocina en presencia de *N*-heteroarenos

Andres Benitez[1]; Lourdes Gotopo,[2] Angel H. Romero[1]

[1]Grupo de Química Orgánica Medicinal, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.
[2]Laboratorio de Síntesis Orgánica, Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Central de Venezuela, Caracas, Venezuela.

andresb705@gmail.com

La identificación de nuevos heterociclos es de gran relevancia en la química orgánica en el diseño de nuevos fluoróforos, agentes con actividad biológica o por su rol en la catálisis química.[1] En particular, la benzo[*c,g*][1,2,5,6]tetrazocina es un sistema único que se caracteriza por poseer un anillo de tetrazocina de ocho miembros que se encuentra fusionado por las cara *c* y *g* con anillos bencénicos. La tetrazocina posee propiedades en diversos campos incluyendo química de materiales con propiedades únicas de conductividad, luminiscencia así como para la construcción de moléculas orgánicas más complejas.[2] Hasta el momento no existen reportes relacionados con la benzo[*c,g*][1,2,5,6]tetrazocina, siendo muy interesante el desarrollo de una estrategia de síntesis simple para su obtención así como reconocer sus posibles propiedades únicas.

Entonces, en esta investigación presentamos un método simple y práctico para obtener la benzo[*c,g*][1,2,5,6]tetrazocina utilizando únicamente una benceno-1,2-diamina en presencia de un *N*-heterociclo (piridina, bipiridina). Las benceno-1,2-diaminas son reactivos de gran utilidad en la síntesis orgánica por su rol como sustrato en la síntesis de benzimidazoles, benzotriazoles, quinoxalinas y 1,5-benzodiazepin-2(*3H*)-onas.[3] El sistema químico también es utilizado como organocatalizador y ligando para preparación de catalizadores en catálisis química.[4] Entonces, la reacción consiste de una autociclación vía intermolecular de dos moléculas de benceno-1,2-diaminas en solución acuosa y al aire libre bajo condiciones fuertes de calor y tiempo (120-140°C, 24-48 horas). Sus análogos, parcialmente NH-reducidos, totalmente NH hidrogenados y totalmente *N*-deshidrogenados fueron identificados. La reacción fue extendida a una variedad de benceno-1,2-diaminas, encontrando una relación entre la función química y el porcentaje de conversión. Un sólido mecanismo de reacción basado en experimentos y cálculos teóricos nos permitió verificar el rol *N*-heteroarenoy la influencia de su sustitución química en la promoción del proceso redox necesario para la ciclación intermolecular de la benceno-1,2-diaminas para formar la benzo[*c,g*][1,2,5,6]tetrazocina y sus análogos. Finalmente, algunos agentes fluorescentes fueron identificados de esta reacción con propiedades fotofísicas interesantes incluyendo emisión en región amarilla así como moderados rendimientos cuánticos.

Agradecimientos: Proyecto CSIC I+D 2022 (22520220100622UD) y PEDECIBA-QUIMICA.

Referencias:

[1] Kerru, N., et al. *Molecules* **2020**, 20, 1909.
[2] 1,3,5,7-Tetramethyltetrahydro-2,6(*1H,3H*)-1,3,5,7-tetrazocine-2,6-dione. Tetrazocine. Compound Overview.
[3] (a) Wagner, E.C.; Millett, W.H. Org. Synth. **1939**, *19,* 12. (b) Damschroder, R.E.; Peterson, W.D. Org. Synth. **1940**, *20*, 16. (c) Renault, J.; et al. *Eur. J. Med. Chem.* **1981**, *16,* 545. (d) Ortíz de Zárate, A.; Pérez-Torralba; M.; Bonet; I.; Lavandera, J.L. *Antioxidants* **2021**, *10*, 1584.
[4] Ciber; L.; Klemenčič, K.; Golob; A.; Brodnik, H.; Požgan, H.; Svete, J.; Štefane, B.; Grošelj, U. *Catalysts* **2024**, *14*, 274.

Nuevas evidencias para soportar el mecanismo de Bloomfield en la bromación bencílica fotoinducida utilizando *N*-bromosuccinimida

Francisco Delgado[1,2,3]; Lourdes Gotopo[4]; Gustavo Cabrera[4]; Angel H. Romero[1]

[1]*Grupo de Química Orgánica Medicinal, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*
[2]*Laboratorio de Química Teórica y Computacional, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*
[3]*Laboratorio de Biología Redox de Tripanosomas, Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay*
[4]*Laboratorio de Síntesis Orgánica, Escuela de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Central de Venezuela, Caracas, Venezuela*
jdelgado@fcien.edu.uy

La bromación bencílica es una reacción clave en síntesis orgánica para la funcionalización selectiva de metilos activados en anillos aromáticos. [1] En presencia de N-bromosuccinimida (NBS), puede seguir dos rutas: el mecanismo de Goldfinger (más aceptado), donde el radical bromo abstrae el hidrógeno bencílico, o el de Bloomfield, en el que dicha abstracción es realizada por el radical succimida. En el presente trabajo se mostró nueva evidencia para soportar el mecanismo de Bloomfield basado en la bromación bencílica de una serie de 4-nitrotoluenos sustituidos en la posición 2 del anillo aromático por sustituyentes con diferentes características electrónicas y estéricas, buscando verificar si el efecto estérico es relevante en el porcentaje de bromación. Porcentajes de conversión al producto bencílico monobromado como función de la orto-sustitución fue analizado para estudiar dicha bromación. La conversión a productos monobromados fue cuantificada por espectroscopia de protones. Las reacciones se llevaron a cabo bajo condiciones estándar: acetonitrilo como disolvente, 60 °C, irradiación con luz blanca (13 W), durante 6 horas.[2] En general, los compuestos con sustituyentes 2-arilo mostraron rendimientos de conversión elevados (70–75 %), mientras que aquellos con sustituyentes halógenos exhibieron rendimientos significativamente menores (7–44 %), siguiendo la tendencia F > Cl > Br >> I. El 4-nitrotolueno sin sustituyente orto presentó la mayor conversión (~94 %). Estos resultados sugieren que sustituyentes fuertemente electronegativos o voluminosos en posición 2 dificultan el proceso de bromación, presumiblemente por efectos electrónicos y/o estéricos. Para verificar la influencia del efecto estérico, se realizó un estudio computacional de interacción intermolecular utilizando el modelo de Counterpoise para analizar la interacción entre el sustrato de 4-nitrotoluenos 2-sustituidos y el radical de succimida o bromo por separado. Los resultado teóricos arrojaron que la energía de acomplejamiento es fuertemente dependiente de la naturaleza del orto-sustituyente en los aductos de succimida, siendo ligeramente más energético (menos estables) aquellos derivados de 4-nitrotolueno 2-arilados. Este resultado teórico y experimental soporta el mecanismo de Bloomfield abriendo el debate para más investigaciones en orden de demostrar la ruta más probable.

Referencias:

[1] S.S. Friedrich, E.C. Friedrich, L.J. Andrews, R.M. Keefer. *J. Org. Chem.* **1969**, *84*, 900.
[2] (a) G.F. Bloomfield, *J. Chem. Soc.* **1944**, *114*, 69. (b) J. Adams, P.A. Gosselain and P. Goldfinger, *Nature* **1953**, *171*, 704.
[3] D. Cantillo, O. de Frutos, J.A. Rincon, C. Mateos, C.O. Kappe. *J. Org. Chem.* **2014**, *79*, 223.

Actividad biológica de los fármacos comerciales tripanosomicidas e inmunoestimulantes contra modelos *in vitro* de *L. infantum* y *T. cruzi*

Maia Mancilla[1]; Giuliano Suguetti[1]; Elena Aguilera[1]; Diego Benítez[2]; Marcelo Comini[2]; Angel H. Romero[1]; Hugo Cerecetto[1,3]

[1]Grupo de Química Orgánica Medicinal, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.
[2]Grupo de Biología Redox de Tripanosomas, Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay.
[3]Área de Radiofarmacia, Centro de Investigaciones Nucleares, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

mmorenamancilla@gmail.com; gsugueti@gmail.com

La leishmaniasis visceral (LV) y el Mal de Chagas (MC) son consideradas por la Organización Mundial de la Salud como enfermedades parasitarias tropicales desatendidas, que afectan a millones de personas alrededor del mundo, en particular en zonas tropicales y subtropicales de América, África y Asia.[1] La LV ha mostrado en Uruguay una prevalencia de al menos 1 caso por año desde 2017, y los riesgos van en aumento por la cercanía con el Brasil quien acumula el 95 % del total de casos de América, la existencia del vector del mosquito de *Lutzomyia longilpalpis* en el litoral Norte del País y numerosos casos de leishmaniasis canina.[2a] Por otro lado, el MC es prevalente en el Uruguay, siendo común en pacientes adultos-ancianos infectados de forma crónica y con una potencial transmisión vectorial en zonas rurales por la presencia del insecto vector intradomiciliario. No existen vacunas y el tratamiento es netamente farmacológico siendo imperioso buscar mecanismos para optimizar la alternativa terapéutica. Para el tratamiento de LV se utiliza, la anfotericina, miltefosina y fármacos antimoniales (antimoniato de meglutamina-glucantime y estibogluconato de sodio-pentostam), mientras que benznidazol y nifurtimox para el tratamiento de MC. Por otro lado, inmunoestimulantes basados en agonistas de *Toll like receptor 7 y 8* tal como el imiquimod y resiquimod, si bien han sido probados en modelos *in vivo* de leishmaniasis cutánea con significativa reducción de carga parasitaria[3], su uso en modelos de LV y de MC ha sido discreto. Con base a lo anterior, en el presente trabajo, se planteó evaluar la actividad antiparasitaria de los fármacos leishmanicidas y antichagásicos mencionados arriba así como el potencial de cuatro inmunoestimulantes, imiquimod, resiquimod, gardiquimod y selgatolimod, contra modelos *in vitro* en estadios extracelulares e intracelulares de *L. infantum* y de *T. cruzi*.[4] Se presentará una discusión de los resultados en ambos estadios, así como el potencial de los inmunoestimulantes y la actividad de agentes leishmanicidas y antichagásicos en modelos *in vitro* de *T. cruzi* y *L. infantum*, respectivamente. **Agradecimientos:** CSIC I+D 2024 (22520240100580UD),PEDECIBA, DYCIT-MEC-FVF_2023_441 y FOCEM_COF 03/11.

Referencias:

[1] (a) World Health Organization: WHO. *Leishmaniasis*. https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/leishmaniasis. (b) WHO. *Enfermedad de Chagas (tripanosomiasis americana)*. https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/chagas-disease-

[2] (a) Ministerio de Salud Pública, Dirección General de la Salud División Epidemiología (2022). Document 12/001/3/3754/2022. (b) R. Salvatella, *Arch. Pediatr. Urug.* **2016**, *87*, 49.

[3] S. Buates, G. Matlashewski. *J. Inf. Dis*. **1999**, *179*, 1485.

[4] (a) Romero, A.H, et al. *RSC Med Chem.* **2023**, 14, 1992-2006. (b) Benítez, D. et al. *Methods Mol. Biol.* **2022**, *2524*, 127–147.

Sintesis de *w,w'*-bis(hidroxifenil)alcanos como potenciales antioxidantes para su uso en alimentos

Michel Techera[1]; Gabriel Jorge Sagrera[1,2]

[1]*Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la Republica, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la Republica, Montevideo, Uruguay*

micheltc@gmail.com

Los polifenoles son compuestos naturales y se encuentran ampliamente distribuidos en el reino vegetal. Son metabolitos secundarios de las plantas y se encuentran involucrados en la defensa contra la radiacion UV o agresión de patógenos. Los polifenoles son componentes importantes en la dieta humana, aunque se consideran como no nutrientes. Se consumen en frutas, vegetales y cereales. Los productos manufacturados a partir de frutas, también contienen polifenoles en cantidades significativas. Diversas frutas (uvas, manzanas, peras y bayas) contienen hasta 2-3 gramos de polifenoles por cada kilogramo de peso fresco. Típicamente un vaso de vino tinto o una taza de café o té contiene 100 mg de polifenoles. Diversos estudios indican que el consumo a largo plazo de dietas que contengan polifenoles ofrecen cierta protección contra el desarrollo de cáncer, enfermedades cardiovasculares, diabetes, osteoporosis y enfermedades neurodegenerativas. Existe un interés creciente en el uso de polifenoles como antioxidantes naturales en preservación de alimentos, debido al rechazo de los consumidores a los antioxidantes sintéticos y también a sus propiedades beneficiosas para la salud. Los polifenoles se clasifican según el número de anillos aromáticos que contienen y la naturaleza de la cadena hidrocarbonada que los une (Cn). Dentro del término polifenoles se incluyen las siguientes estructuras: a) compuestos con un anillo aromatico: àcidos benzoicos y cinámicos, b) compuestos con dos anillos aromáticos: estilbenos (C2), flavonoides (C3) y lignanos (C4). Se ha reportado que *w,w'*-bis(hidroxifenil)alcanos, de estructura general Ar1-(CH_2)n-Ar_2, con n entre 3 y 10, muestran una actividad antioxidante que depende del largo de la cadena (n) y de los sustituyentes en los anillos A y B.

Como continuación de una línea de investigación relacionada con la síntesis y evaluación biológica de flavonoides, en este trabajo se describe la síntesis de una pequeña biblioteca de compuestos de estructura general PhA-(CH_2)n-PhB , con n = 3 o 5 y donde PhA y PhB son grupos fenilos que poseen diferentes sustituyentes, entre ellos grupos OH. En primer término se sintetizo una serie de chalconas por condensación aldólica a partir de las correspondientes acetofenonas y benzaldehídos, en condiciones básicas, las que fueron convertidas a sus correspondientes dihidrochalconas por hidrogenación. Los 1,3-difenilpropanos se prepararon a partir de las dihidrochalconas por medio de las siguientes reacciones: a) reducción del grupo carbonilo a alcohol, b) deshidratación al alqueno, c) hidrogenación catalítica del doble enlace. Para la sintesis de 1,5-difenilpropanos se utilizo una estrategia similar, pero partiendo de analogos de chalconas obtenidos a partir de acetofenonas y cinamaldehidos. Todos los compuestos fueron purificados por recristalización o cromatografía en columna y caracterizados por RMN y EM.

La actividad antioxidante será determinada en una etapa posterior por tres métodos: a) decoloración del radical difenilpicrilhidrazilo, b) oxidación acoplada de betacaroteno y ácido linoleico y c) fotoquímico (consumo de especies reactivas de oxígeno).

Variación del perfil de giberelinas en ovarios de mandarina 'Afourer' bajo distintos tratamientos agronómicos

Ignacio Migues[1]; Natalia Guimaraes[2]; Álvaro Otero[2]; Fernando Rivas[2]; Horacio Heinzen[1]

[1]*Farmacognosia, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Programa Nacional de Citricultura, INIA, Salto Grande, Uruguay*

imigues@fq.edu.uy

Las giberelinas (GAs) son fitohormonas esenciales en la regulación del desarrollo reproductivo de las plantas, incluyendo la inducción floral y el cuajado de frutos [1]. Su estudio en ovarios de cítricos es clave para comprender los mecanismos fisiológicos que determinan la productividad y calidad del cultivo [2]. En este trabajo se evaluó la evolución de cinco giberelinas endógenas (GA_1, GA_4, GA_9, GA_{20} y GA_{34}) en ovarios de mandarina 'Afourer' (*Citrus reticulata* Blanco) sometidos a distintas prácticas de manejo agronómico.

El experimento se llevó a cabo en la estación experimental INIA Salto Grande en árboles en etapa productiva. Se estudiaron cinco tratamientos: árboles mallados con colmenas intercaladas (autopolinización favorecida por abejas), árboles mallados con una y dos aplicaciones foliares de AG_3 (30 ppm, inductor del cuajado), árboles mallados (autopolinización), y árboles sin malla (polinización cruzada). Los ovarios fueron recolectados en cuatro momentos del desarrollo floral: apertura floral, flor sin pétalos (con estilos), flor sin pétalos ni estilos, y fruto cuajado (4–5 mm de diámetro). Las muestras fueron sometidas a una extracción tipo QuEChERS para su análisis mediante LC-MS/MS.

Los resultados mostraron una dinámica específica para cada giberelina, tanto en función del momento de muestreo como del tratamiento aplicado. En general, GA_1 y GA_9 presentaron concentraciones más elevadas en las primeras y últimas etapas florales, disminuyendo en etapas intermedias. Se observaron efectos marcados de la aplicación exógena de AG_3 sobre los niveles de precursores como GA_{20} y GA_9, mientras que el uso de colmenas o la malla sola también modificaron el perfil hormonal, indicando una interacción relevante entre las prácticas de manejo y el metabolismo hormonal endógeno.

Este estudio muestra cómo diferentes estrategias agronómicas impactan la concentración y evolución de giberelinas en ovarios de cítricos durante fases del desarrollo reproductivo. Los resultados contribuyen al entendimiento del control hormonal en mandarina 'Afourer' y orientan prácticas de manejo destinadas a optimizar la producción y calidad del fruto.

Referencias:

1. Ritonga, F.N.; Zhou, D.; Zhang, Y.; Song, R.; Li, C.; Li, J.; Gao, J. The Roles of Gibberellins in Regulating Leaf Development. *Plants (Basel, Switzerland)* **2023**, *12*, doi:10.3390/plants12061243.
2. Talon, M.; Zacarias, L.; Primo-Millo, E. Gibberellins and parthenocarpic ability in developing ovaries of seedless mandarins. *Plant Physiol.* **1992**, *99*, 1575–1581, doi:10.1104/pp.99.4.1575.

Efecto de la iluminación en el perfil de Carotenoides y Norisprenoides en uvas Tannat

Gonzalo Baldivia [1]; Eduardo Boido [1]; Andrés Coniberti; Eduardo Dellacassa [1]; Laura Fariña[1]

[1]*Área de Enología y Tecnología de las Fermentaciones. Deparetamento de Ciencia y Tecnología de los Alimentos-Facultad de Química-Universidad de la República, Uruguay*

[2]*Instituto Nacional de Invesigación Agropecuaria, Uruguay*

gbaldivia@fq.edu.uy

La apreciación organoléptica es el aspecto más importante en la valoración de los vinos y está directamente vinculada al precio que pueda lograr, particularmente el aroma juega un rol fundamental en esa apreciación. El aroma de un vino es formado por los compuestos volátiles que pueden ser percibidos por el olfato, dentro de los que más importancia tienen son los C13-norisoprenoides, estos compuestos son formados en la uva vía degradación de carotenoides, su perfil y concentración, está fuertemente influenciados por la exposición que tengan los racimos a la luz solar. En el caso de los vinos Tannat, el aumento de concentración de estos compuestos son clave en la mejora de percepción del aroma de los vinos.
Una práctica cultural extendida con el fin de aumentar la iluminación sobre las bayas es el deshoje en la zona de los racimos para incrementar su exposición. Este aumento de iluminación incrementa la temperatura de las bayas, que puede llegar a causar en ciertas condiciones el efecto contrario en la formación de carotenoides y norisoprenoides, además de acarrear riesgos de quemado de tejidos vegetales.
En este trabajo se evaluó el efecto de la implantación de tratamientos de deshoje en dos momentos de maduración (tamaño arveja y envero) y en dos niveles de deshoje distintos (leve e intenso) sobre parámetros fisicoquímico clásicos, componentes aromáticos glicosidados y carotenoides en dos vendimias consecutivas. Se analizan para las cosechas 2023 y 2024 los parámetros inmediatos de vendimia: azúcar, pH, acidez total, nitrógeno aminoacídico, amonio, ácido tartárico y ácido málico, índices polifenólicos en uva, perfil de carotenoides por HPLC-DAD y precursores glicosidados por GC-MS.
Los resultados de este trabajo permitieron identificar 35 precursores glicosidados de diversas estructuras químicas (norisoprenoides, terpenos, fenoles y alcoholes C6). Se observó una modificación del perfil de precursores aromáticos como consecuencia del momento e intensidad de los deshojes realizados.
Los resultados obtenidos demuestran que las variaciones observadas en carotenoides y glicósidos de terpenos y norisoprenoides entre los tratamientos no tuvieron efecto significativo sobre los parámetros inmediatos de vendimia de las uvas al momento de la cosecha. Esto muestra que es posible modificar el perfil de precursores aromáticos sin modificar los parámetros clásicos de la uva en cosecha, lo que permitiría con el deshojado modular el perfil aromático de los vinos, sin cambiar su composición de azúcar, ácidos, pH y compuestos nitrogenados.
Este trabajo busca demostrar que como casi toda acción que hacemos sobre la planta de vid va a tener efecto al momento de beber el vino obtenido, y el deshoje también influencia el aroma de los vinos siendo necesario continuar la investigación para definir los cambios en los perfiles de los compuestos.

Exploración de aspectos estructurales claves en la actividad tripanosomicida de derivados de isoquina, imiquimod y quinolin-3-hidrazonas

Francisco Jourdan[1]; Elena Aguilera,[1] Diego Benítez,[2] Angel H. Romero[1]

[1]Grupo de Química Orgánica Medicinal, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.
[2]Laboratorio de Biología Redox de Tripanosomas, Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay.

franciscojourdan3@gmail.com

La leishmaniasis visceral y el Mal de Chagas son consideradas por la OMS como enfermedades parasitarias tropicales desatendidas, que afectan a millones de personas alrededor del mundo, en particular en zonas tropicales y subtropicales.[1] El Mal de Chagas tiene prevalencia en el Uruguay, en particular en zonas rurales por la presencia del insecto vector de chinchas, mientras la leishmaniasis visceral ha mostrado una prevalencia de al menos 1 caso por año desde 2017, y los riesgos van en aumento por la cercanía con el Brasil quien acumula el 95% del total de casos de América y la existencia del vector del mosquito de *Lutzomyia longilpalpis* en regiones del litoral Norte del País.[2] Por otra parte, no existe vacunas y el tratamiento es principalmente basado en abordaje farmacológico. Los fármacos utilizados presentan diversos efectos adversos, son pocos efectivos en especial en fases avanzadas de estas enfermedades, se han descubierto cepas resistentes, las administraciones son complejas e incómodas para el paciente.[1] Entonces, nuevas estrategias deben ser desarrolladas para el diseño de agentes anti-tripanosomátidos más específicos y efectivos, siendo esencial considerar aspectos vitales en la supervivencia del parásito y su relación con el macrófago. En ese sentido, los sistemas quinolinas han demostrado ser una excelente plataforma para el diseño de agentes leishmanicidas efectivos y seguros, actuando adicionalmente como un modulador de la activación del sistema inmune de células huésped de macrófagos infectados con estos parásitos, en especial de *Leishmania* y con capacidad de acumularse en el fagolisosoma.[3-5] En el presente trabajo de investigación se plantea la evaluación de tres grupos de nuevas quinolinas, una de ellas sustituida en la posición 3 por aril/heteroarilhidrazonas, otro grupo sustituido en la posición 4 por sustituyentes de anilinos (análogos de isoquina) y un último grupo perteneciente a pre-análogos de imiquimod. Los compuestos fueron evaluados *in vitro* en contra de estadios extracelulares de *L. infantum* y *T. cruzi*. Para los compuestos más promisorios la toxicidad fue evaluada en macrófagos murinos de la línea J774.1 y contra el estadio intracelular y clínicamente relevante de *L. infantum*. Una discusión sobre la estructura-actividad y selectividad fue desarrollada para interpretar resultados e identificar farmacóforos claves en la optimización de quinolinas como plataforma líder.

Referencias:
[1] OMS. (a) Leishmaniasis. https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/leishmaniasis . (b) Enfermedad de Chagas (tripanosomiasis americana). https://www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/chagas-disease-(american-trypanosomiasis) .
[2] (a) R. Salvatella, Chagas en Uruguay, 1937-2016. Información básica para su prevención, control y atención, Arch. Pediatr. Urug. 2016, 87, 49. (b) Ministerio de Salud Pública, Dirección General de la Salud División Epidemiología (2022). Document 12/001/3/3754/2022.
[3] A.H. Romero, et al. Archiv Pharm. 2019, 352: 1800281.
[4] A.H. Romero, F. Delgado. Front. Chem. 2025, 12: 1527946 .
[5] E. Del Carpio, F. Jourdan, A.H. Romero, et al.. Front. Chem. 2025, 13: 1586044.

Aleaciones de Ni y Ni/Mo para la mejora de la actividad de la reacción de evolución de hidrógeno: un estudio teórico

Ricardo Faccio[1]; Luciana Fernández-Werner[1]; Martin Esteves[1]; Lucía Amy[2]

[1] *Área Física, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2] *Grupo de Física del Estado Sólido, Instituto de Física, Facultad de Ingeniería. Uruguay*

rfaccio@fq.edu.uy

Una comprensión fundamental del mecanismo de la reacción de evolución de hidrógeno (HER) es clave para el desarrollo de electrodos eficientes y sin metales preciosos para la electrólisis alcalina del agua. En este trabajo, realizamos un estudio detallado mediante teoría del funcional de la densidad (DFT) sobre los mecanismos HER en superficies Ni(111) y Ni(111) dopadas con Mo, enfocándonos en la aleación Ni_3Mo. Se calcularon sistemáticamente las energías libres de adsorción (ΔG) para los principales intermediarios -H*, OH* y H_2O*- en ambas superficies. Los resultados indican que la incorporación de Mo modifica la estructura electrónica del Ni, conduciendo a un valor de ΔG_H* mucho más cercano al valor ideal termoneutral (~0 eV), según el principio de Sabatier. Este cambio termodinámico mejora el equilibrio entre la adsorción y desorción del hidrógeno, un factor clave en la eficiencia de la HER. Además, los perfiles de energía obtenidos mediante cálculos Nudged Elastic Band (NEB) muestran que la barrera energética para la disociación del agua se reduce significativamente en Ni_3Mo en comparación con Ni puro, facilitando la etapa de Volmer de la HER. Para evaluar el comportamiento dinámico de las especies adsorbidas a temperaturas finitas, se realizaron simulaciones de dinámica molecular ab initio (AIMD), asistidas por Machine Learning Force Fields (MLFF-AIMD). Estas simulaciones confirman la estabilidad térmica de los sitios activos y la persistencia de configuraciones de adsorción favorables bajo condiciones realistas. Los resultados de este estudio están en buen acuerdo con resultados experimentales recientes en electrodos porosos de Ni/Mo, donde se ha observado un mejor desempeño de la HER. Se destaca el rol clave del Mo en la optimización tanto de la termodinámica como de la cinética del proceso HER mediante interacciones electrónicas desarrolladas en la superficies de los electrodos.

Referencias:

[1]J.K. Nørskov et al., J. Phys. Chem. B 108, 17886 (2004).
[2] A. Grimaud et al., Nat. Energy 2, 16189 (2016).
[3] F. Egert et al., Adv. Energy Mater. 2025, 2405285 (2025).

Posters

Sesión 3 (Jueves 23/10 – 8:30-10:00)

S3.P01_BQ Natali Mena - *Desarrollo de un ensayo en Caenorhabditis elegans para evaluar la actividad inhibidora de análogos de ibogaína sobre el canal de potasio hERG*

S3.P02_BQ Pablo Miranda - *Perfil Farmacocinético Intraocular de un Implante Biodegradable Mixto DEX-MOX y su Actividad Protectora frente a Infecciones Causantes de Endoftalmitis*

S3.P03_BQ Diego Umpierrez Puchalvert - *Explorando el potencial biocatalítico de las metiltransferasas bacterianas CouO y NovO*

S3.P04_BQ Florencia Cavallaro Di Blasi - *Descubrimiento in silico y validación experimental de halogenasas regioselectivas en Streptomyces de suelos uruguayos*

S3.P05_BQ Silvina Guaz; Constanza Hitta; Julieta Schmidt; Victoria Lencina - *Síntesis y caracterización de trisulfuros y polisulfuros de glutatión*

S3.P06_BQ Johana Ebert - *Monitoreo dinámico de lipoperóxidos en hepatocitos: un modelo de cribado para identificar moléculas hepatoprotectoras*

S3.P07_BQ Lucía Patrón - *Mutantes de citosina desaminasa para la conversión de 5-fluorocitosina*

S3.P09_BQ Gerónimo Huerta-Firpo - *Desarrollo y evaluación de agentes de unión a bacterias Gram negativas basados en el receptor scavenger CD6 humano*

S3.P10_BQ Malena Dalies - *Caracterización de un preparado inmovilizado de la poliprenil fosfato manosa sintasa de Rhodococcus erythropolis*

S3.P11_BQ Nicolas Soriano - *Producción sostenible de L-sorbosa mediante Gluconobacter oxydans como biocatalizador*

S3.P12_BQ Kevin Karlen - *Inmunoensayo no competitivo para la detección de microcistinas*

S3.P13_IA Santiago Valiero - *Estudio experimental y teórico de propiedades magnéticas de compuestos de renio(IV) y lantánidos*

S3.P14_IA Santiago Romero - *Síntesis de quantum dots de ZnO encapsulados en Eu-MOF como materiales de emisión dual*

S3.P15_IA Luisina Zabala - *Quantum dots de CdS decorados con iones lantánidos*

S3.P16_IA Daniela Díaz - *Caso Clínico: Ingesta Intencional de Mercurio Elemental en Uruguay*

S3.P17_IA Carolina Pacheco - *Propiedades magnéticas de materiales 1D obtenidos por autoensamblaje a partir de Ln^{3+} y $[Ru^{III}Cl_2(ox)_2]^{3-}$*

S3.P18_IA Ana Clara Bath - *Using Ion Mobility-Mass Spectrometry to Understand Single-Chain De Novo Designed α-Helical Coiled Coils*

S3.P20_IA Natalia Gérez - *Puesta a punto de una metodología para el análisis selectivo de residuos de Etilen bis ditiocarbamatos en frutas y hortalizas*

S3.P21_IA Martín Braga - *Ensayos de degradaciones forzadas de Ivermectina*

S3.P22_IA Inés Santos - *Desarrollo y validación de una metodología analítica para la determinación de residuos de pesticidas en colza (Brassica napus L.)*

S3.P23_IA Pablo González - *Avances en la determinación de Cr(VI) en aguas naturales mediante voltamperometría de barrido lineal*

S3.P24_IA Livia Arizaga - *Upcycling del residuo de catalizador gastado del proceso de cracking catalítico, como aditivo puzolánico para morteros*

S3.P25_IA Bruno Sanabria - *Síntesis de estructuras dinucleares de iones lantánidos y β-dicetonas a través de la dimerización in-situ de imidazoles asimétricos*

S3.P26_IA Eduardo Dellacassa - *Aplicaciones analíticas al estudio de pigmentos en sellos emitidos en Uruguay en 1864-1865*

S3.P27_IA Carolina Patrón - *Nanomateriales emisores de luz basados en quantum dots de ZnS decorados con iones lantánidos*

S3.P28_IA Carlos Rojas - *Diseño, obtención e implementación de imanes moleculares en dispositivos de espintrónica molecular*

S3.P29_FQ Paula Lostao - *Síntesis y caracterización de nanotubos de titanato de sodio para degradación de contaminantes*

S3.P30_FQ Rocío Serra - *Passiflora caerulea como fuente de pigmentos para DSSC*

S3.P31_FQ Alejandro Amaya - *Modificaciones texturales y térmicas en un catalizador $NiMo/Al_2O_3$ usado en hidrotratamiento de aceites residuales*

S3.P32_FQ Carmina Reyes Plascencia - *Adsorción de colorante con lignina y lignina funcionalizada*

S3.P33_FQ Carolina De los Santos - *Electrorremediación de suelos contaminados con compuestos organoclorados*

S3.P34_FQ Claudia Pereyra Huelmo - *El intercambio de cationes multivalentes en nanopartículas de telururo de cobre induce polarización electroquímica y almacenamiento de energía*

S3.P35_FQ Jorge De Vivo - *Selección de carbón activado generado a partir de residuos de biomasa para captura de CO_2*

S3.P36_FQ Julián Antonio Villarreal Murúa - *Transiciones de fase topológicas en Xenos del grupo 14*

S3.P37_FQ Luciana Fernández Werner - *Modelado mediante DFT de la interacción de iones multivalentes con MXenes $Ti_3C_2T_X$: estabilidad, adsorción y difusión*

S3.P38_FQ Marc Segovia - *Evaluación de métodos DFT para la optimización de geometría y termoquímica en SVECV-f12: hacia una alternativa eficiente y precisa*

S3.P39_FQ Martin Esteves - *Investigación in situ de difracción de polvo de rayos X sobre el desarrollo de carbonos templados con zeolita en zeolita FAU [1]*

S3.P41_QO Claudia Veira - *Reposicionamiento de fármacos para la enfermedad de Chagas: tratando de superar la etapa de prototipo-candidato a estudios preclínicos*

S3.P42_QO Federico Rodriguez - *Síntesis organocatalítica de iminoazúcares miméticos de L-pentofuranosas con actividad biológica mejorada*

S3.P43_QO Pilar Camaño - *Valorización de alperujo mediante extracción ultrasónica de polifenoles y síntesis de hidroxitirosol*

S3.P44_QO Gabriel Fernández - *Homobarrelenonas como andamiajes para la obtención de símiles de productos naturales: Evaluación de su reactividad ante nucleófilos nitrogenados*

S3.P45_QO Lucía Victoria Urban - *Síntesis de Enol Ésteres Cíclicos Precursores de Tiocarbazúcares*

S3.P46_QO Carolina Brindisi - *^{18}F y carboazúcares: explorando nuevas rutas para radiofármacos*

S3.P47_QO María Belén Valdez - *Evaluación de la actividad antiinflamatoria de psicodélicos utilizando una línea celular de colon reportera de NF-kB*

S3.P48_QO Martina Silvarrey - *Síntesis, marcación y evaluación biológica de derivados MAG3 para aplicaciones en Medicina Nuclear*

S3.P50_QO Guillermo Morera - *Impacto del método de secado y conservación de hongos psicodélicos en el contenido de triptaminas a lo largo de un año*

S3.P51_QO Luis Reina - *Obtención de polisacárido a partir de corteza de Erythrina crista-galli*

S3.P52_QO Carolina Sosa Labadie - *Desarrollo de un método para determinar ácidos grasos esenciales en suplementos nutricionales para abejas*

S3.P53_FQ Mauricio Rodríguez - *Dispersión de compuestos microplástico-lípido en un flujo de Poiseuille*

S3.P54_QO Magdalena Rodríguez - *Síntesis enantioselectiva de benzo-bisheterociclos utilizando monoaminooxidasas de Aspergillus niger*

Desarrollo de un ensayo en *Caenorhabditis elegans* para evaluar la actividad inhibidora de análogos de ibogaína sobre el canal de potasio hERG

Natali Mena[1]; Juan Manuel Mesa[2]; Ignacio Carrera[2]; Nuria Flames[3]; Laura Romanelli[4]; Inés Carrera[1]

[1]*Laboratorio de Experimentación Animal, Departamento de Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Química, Universidad de la República*

[2]*Laboratorio de Síntesis Orgánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República*

[3]*Unidad de Neurodesarrollo, Instituto de Biomedicina de Valencia, España*

[4]*Laboratorio de Biología de Gusanos, Institut Pasteur de Montevideo*

nmena@fq.edu.uy

La ibogaína es un alcaloide natural con potencial terapéutico en el tratamiento del trastorno por abuso de sustancias [1] . Sin embargo, su uso está limitado por su capacidad de bloquear el canal de potasio hERG, esencial para la repolarización cardíaca provocando arritmias mortales [2], [3]. En este contexto, planteamos desarrollar un ensayo de cribado en *Caenorhabditis elegans* (*C. elegans*) que permita investigar la relación entre la estructura química de los alcaloides de la iboga y su actividad como bloqueantes del canal hERG, buscando diseñar análogos más seguros. Para ello, se emplea una cepa transgénica que expresa un canal hERG quimérico con una mutación de ganancia de función, provocando parálisis en el gusano, la cual puede revertirse administrando compuestos bloqueadores de hERG [4]. Actualmente ponemos a punto un ensayo automatizado que mide motilidad de los gusanos, utilizando bloqueadores de referencia como dofetilide y clofilium, con el objetivo de establecer su sensibilidad y reproducibilidad. Resultados preliminares muestran que estos compuestos son capaces de aumentar la motilidad únicamente en los gusanos que sobreexpresan hERG y no en gusanos no transgénicos. Paralelamente, estamos evaluando el efecto de la ibogaína, lo cual permitirá sentar las bases para el cribado de la quimioteca de análogos estructurales. Los resultados preliminares muestran respuestas dosis-dependientes ante dofetilide como bloqueador de referencia, lo que apoya la utilidad del modelo. Este ensayo podría convertirse en una herramienta de cribado accesible, económica y escalable para evaluación temprana del riesgo de bloqueo hERG en compuestos con potencial uso terapéutico antes de su avance en etapas clínicas.

Referencias:

[1] Brown, T. K. & Alper, K. Am J Drug Alcohol Abus. 44, 24–36 (2018).
[2] Jiang, Q. *et al*. Nat Commun 9, 3941 (2018).
[3] Koenig X, Hilber K. Molecules. 2015;20(2):2208–2228.
[4] Vlaanderen, L. *et al*. Clin Toxicol 52, 642–643 (2014).

Perfil Farmacocinético Intraocular de un Implante Biodegradable Mixto DEX-MOX y su Actividad Protectora frente a Infecciones Causantes de Endoftalmitis

Pablo Miranda[1]; Ignacio Tártara[2]; Analía Castro[1]; Santiago Palma[3]; Álvaro W. Mombrú[4]; Helena Pardo[1,4]

[1]*Centro NanoMat, Área Física-DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Cátedra de Física Biomédica, Facultad de Ciencias Médicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina*

[3]*Unidad de Investigación y Tecnología Biomédica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina*

[4]*Cátedra de Física, Área Física-DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

ps.miranda.f@gmail.com

En este trabajo se caracterizó el comportamiento intraocular in vivo de un sistema biodegradable de entrega de fármacos de liberación prolongada, conteniendo el corticosteroide dexametasona (DEX) y el antibiótico moxifloxacina (MOX), en conejos albinos. La formulación fue diseñada con el fin de prevenir la aparición de infecciones tras la operación de cataratas, y mejorar la recuperación postquirúrgica al reducir la inflamación y eliminar la necesidad de medicación posterior. En ese sentido, se estudió la actividad antibiótica in vivo del inserto luego de una exposición directa a una cepa comercial de *Pseudomonas aeruginosa*, comparando su performance frente a una dosis de ataque de un tratamiento convencional con ceftazidima. Se observó que 36 % de los ojos que recibieron dicho antibiótico desarrollaron infección. En presencia del inserto, esto ocurrió en 12.50 % de los casos, de los cuales todos se recuperaron de forma natural. A su vez, se evaluó el perfil farmacocinético intraocular de la formulación en ojos con y sin cirugía. Se observó que DEX se ajustó siempre a un modelo bicompartimental con eliminación lineal y absorción de primer orden, alcanzando su concentración máxima a las 36 horas. El mismo modelo fue válido para MOX en ojos con cirugía de cataratas. En los sanos, el ajuste cambió a monocompartimental. En ambos casos, la concentración máxima de MOX se alcanzó antes de las 24 horas.

Explorando el potencial biocatalítico de las metiltransferasas bacterianas CouO y NovO

Diego Umpierrez Puchalvert[1,2]; Belén Gloria[1]; Gonzalo López[3]; César Iglesias[3]; Agustina Vila[2]; Gabriela Irazoqui[1]

[1]*Área Bioquímica, DepBio, Facultad de Química, Udelar*

[2]*Laboratorio de Biocatálisis y Biotransformaciones, DepBio-DQO, Facultad de Química, Udelar*

[3]*Área Microbiología, DepBio, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

dumpierrez@fq.edu.uy

La metilación influye significativamente en las propiedades biológicas y fisicoquímicas de los compuestos orgánicos. Las estrategias tradicionales de alquilación presentan limitaciones en cuanto a la regioselectividad y estereoselectividad, lo que ha motivado el desarrollo de alternativas eficientes. En este contexto, el uso de metiltransferasas (MTs) es una alternativa prometedora. No obstante, el potencial de estas enzimas ha estado históricamente restringido por su alta especificidad de sustrato y su dependencia del cofactor S-adenosilmetionina (SAM) como cosustrato estequiométrico[1], debido a que es un reactivo costoso e inestable.[2] Afortunadamente, en los últimos años se han desarrollado sistemas de regeneración de SAM destacando el basado en una haluro metiltransferasa de *Chloracidobacterium thermophilum* (ChtHMT), que permite sintetizar SAM a partir de S-adenosilhomocisteína (SAH) e ioduro de metilo.[3] Este sistema es muy ventajoso al requerir una única enzima y emplear un precursor accesible como el ioduro de metilo.

En este trabajo se propone el desarrollo de un derivado inmovilizado de ChtHMT, con el objetivo de facilitar la recuperación del medio de reacción y la reutilización del biocatalizador, simplificando así la purificación de los productos finales. En paralelo, se busca ampliar el espectro de sustratos aceptados por las C-metiltransferasas NovO de *Streptomyces spheroides* y CouO de *Streptomyces rishiriensis*, mediante el diseño racional de mutantes con especificidad ampliada, con especial énfasis en la metilación de compuestos indólicos.

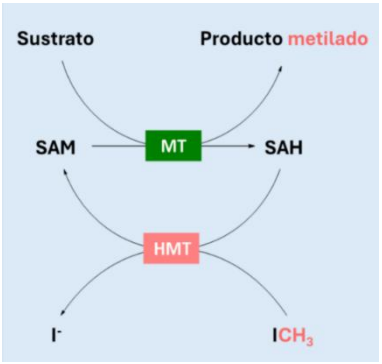


Figura 1. Sistema de regeneración propuesto

Se logró la expresión soluble de NovO, CouO y ChtHMT y su purificación mediante IMAC. Se presentarán los avances en la caracterización bioquímica de las enzimas purificadas y la inmovilización de ChtHMT, así como en la generación *in silico* de mutantes con potencial aplicación en síntesis orgánica.

Referencias:
(1) Wu, S. et al. Angewandte Chemie - International Edition 2021, 60 (1), 88–119.
(2) Romero, E. et al. Angewandte Chemie - International Edition 2021, 60 (31), 16824–16855.
(3) Liao, C. et al. Nature Catalysis 2019, 2 (August).

Descubrimiento *in silico* y validación experimental de halogenasas regioselectivas en *Streptomyces* de suelos uruguayos

Florencia Cavallaro Di Blasi[1]; Agustina Vila[1]; Valentina Croce[2]; Sofía Zeballos[2]; María Inés Siri[2]; Cesar Iglesias[2]

[1]*Laboratorio de Biocatálisis y Biotransformaciones, DEPBIO, DQO, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Microbiología Molecular, DEPBIO, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

fcavallaro@fq.edu.uy

La halogenación es una estrategia importante en la síntesis de compuestos bioactivos, pero requiere reactivos costosos y condiciones no amigables con el ambiente. Se conoce una gran cantidad de productos naturales halogenados que son producidos por diversos organismos de todos los reinos, y actualmente métodos in silico se utilizan como estrategia para hallar las enzimas responsables de estas transformaciones, conocidas como halogenasas[1].En este trabajo se analizaron los genomas de 12 cepas de *Streptomyces* aisladas previamente de suelos uruguayos, y seleccionadas por su potencial biosintético evidenciado en estudios previos[2]. Se realizó un análisis bioinformático de secuencias de halogenasas FAD-dependientes reportadas en bases de datos públicas, identificando motivos conservados y residuos catalíticos esenciales para su actividad. Estos motivos fueron utilizados como criterios de búsqueda en los genomas de Streptomyces previamente aislados, lo que permitió identificar cuatro cepas que albergan genes candidatos de interés. Asimismo, se construyó un árbol filogenético que permitió clasificar las halogenasas detectadas en grupos según su patrón de regioselectividad. Los genes identificados se clonaron en pET28(a)+ para su expresión en *E. coli*BL21(DE3), y se testearon en la biotransformación del triptófano y triptamina como sustrato modelos analizando los crudos de reacción por HPLC-DAD y HPLC-MS. Los resultados preliminares revelan que las halogenasas de *Streptomyces* sp. nativos ofrecen un espectro de regioselectividad interesante, específicamente en la posición 5 y 7 del anillo indólico, subrayando su potencial para aplicaciones biotecnológicas en la síntesis sostenible de compuestos halogenados. Se están llevando a cabo estudios bioinformáticos que incluyen docking, simulaciones de dinámica molecular y análisis de energía libre, con el objetivo de seleccionar mutantes con mayor reactividad frente a triptamina y explorar nuevas actividades catalíticas sobre sustratos de mayor volumen como el harmano.

Referencias

1. Crowe, C. et al. Chem Soc Rev 50, 9443–9481 (2021).
2. Croce, V. et al.. Front Microbiol 12, (2021).

Síntesis y caracterización de trisulfuros y polisulfuros de glutatión

Silvina Guaz; Victoria Lencina; Julieta Schmidt; Constanza Hitta; Matías Möller

Laboratorio Fisicoquímica Biológica, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

silvinaguaz@gmail.com

El sulfuro de hidrógeno (H2S) se produce de manera enzimática en los organismos vivos, y tanto este compuesto como sus derivados tienen variedad de efectos fisiológicos. Se plantea que los trisulfuros y polisulfuros (tetrasulfuro, pentasulfuro, etc.) de glutatión, serían de gran importancia en el organismo por su función como reservorio de H2S o su capacidad de producir persulfuros, que mediarían las acciones biológicas del H2S. En base a esto se propone caracterizar trisulfuros y polisulfuros de glutatión. En este trabajo se sintetizó trisulfuro y polisulfuros de glutatión mediante la reacción de H2S con glutatión disulfuro (GSSG). Esta reacción dio lugar a varios productos que fueron separados por HPLC de fase reversa, y mediante análisis de espectrometría de masa se identificaron los productos como GSSSG, GSSSSG, GSSSSSG. Se obtuvieron los espectros UV-vis de cada derivado y para obtener las absortividades correspondientes se redujo cada fracción con TCEP y se cuantificó el glutatión resultante por derivatización con monobromobimano y HPLC en comparación con estándares. Además se estudió la estabilidad del GSSSG en el tiempo mediante espectros de absorción con VariosKan en distintos buffers ; NaPi, Tris y HEPES. Como referencia se realizó GSSG en buffer Tris. Para GSSSG se observó decaimiento en todas las condiciones lo que indica poca estabilidad a pH 7.4, siendo menos estable en HEPES.

Estos resultados ayudarán a obtener resultados cuantitativos sobre el rol del GSSSG y otros polisulfuros en sistemas biológicos.

Monitoreo dinámico de lipoperóxidos en hepatocitos: un modelo de cribado para identificar moléculas hepatoprotectoras

Johana Ebert; Guillermo Litvins; Marcelo Comini; Gonzalo Scalese; Natalia Oddone

Laboratorio de Biología Redox de Tripanosomas, Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay

jebert@pasteur.edu.uy

Los lipoperóxidos (LOOH) son especies inestables formadas por la oxidación incompleta de ácidos grasos poliinsaturados presentes en los fosfolípidos de membranas celulares. Su acumulación excesiva se asocia con el desarrollo y progresión de diversas patologías, incluidas las hepáticas. Para su detección en tiempo real, en nuestro laboratorio se desarrolló y caracterizó un biosensor fluorescente genéticamente codificado y redox sensible, capaz de monitorear de manera no invasiva y dinámica los niveles de LOOH en citosol, mitocondria y núcleo celular, tanto en modelos parasitarios como en hepatocitos humanos HepG2.
El objetivo de este trabajo fue generar y caracterizar líneas celulares de expresión estable del biosensor en hepatocitos humanos (HepG2) y evaluar la magnitud de la lipoperoxidación bajo un estado patológico de esteatosis hepática. Para ello, las secuencias codificantes del biosensor, previamente clonadas en vectores de expresión transitoria, fueron subclonadas en vectores pLenti y utilizadas para la generación de líneas celulares mediante infección con partículas lentivirales y posterior selección con antibióticos. La expresión estable del biosensor en las distintas regiones subcelulares se confirmó mediante microscopía de epifluorescencia, confocal y citometría de flujo.
Todas las líneas celulares respondieron al tratamiento con hidroperóxido de cumeno, validando su funcionalidad frente a un estímulo desencadenante de lipoperoxidación. Posteriormente, se evaluó su comportamiento en un modelo de hígado graso inducido por pretratamiento con ácidos grasos (palmítico y oleico), observándose una respuesta dependiente del tiempo de exposición.
En conjunto, estas líneas celulares constituyen una plataforma robusta para estudiar dinámicamente la formación de lipoperóxidos en condiciones fisiopatológicas y representan una herramienta estratégica para el cribado de moléculas con potencial efecto hepatoprotector, aportando al desarrollo de nuevas terapias dirigidas a enfermedades hepáticas.

Mutantes de citosina desaminasa para la conversión de 5-fluorocitosina

Lucía Patrón[1]; Valeria Grazú[2]; Margot Paulino[3]; Cecilia Ortíz[1]; Lorena Betancor[1]

[1]*Laboratorio de Biotecnología, Facultad de Ingeniería, Universidad ORT, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (INMA, CSIC-UNIZAR) Zaragoza-España.*

[3]*Área Bioinformática, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay.*

lucia.patron@fi365.ort.edu.uy

La citosina desaminasa (CD) es una aminohidrolasa que cataliza la desaminación de citosina a uracilo y amoníaco. Su relevancia biotecnológica radica en su capacidad para transformar el profármaco 5-fluorocitosina (5-FC) en 5-fluorouracilo (5-FU), un metabolito citotóxico ampliamente utilizado en terapias oncológicas. Sin embargo, la limitada afinidad por el profármaco y la moderada eficiencia catalítica de las variantes naturales de CD representan desafíos para su aplicación clínica y biotecnológica. Con el objetivo de optimizar la conversión de 5-FC, en este estudio se diseñaron, generaron y evaluaron variantes mutantes de CD. Se seleccionaron el mutante S126R que ha sido asociado a un posible aumento en la afinidad por 5-FC al facilitar su acceso al sitio catalítico, y la variante D314A que fue propuesta para mejorar su posicionamiento en el centro activo y eficiencia de conversión. [1-2] Con el fin de potenciar ambos efectos y obtener un mutante con mayor afinidad y eficiencia catalítica, se diseñó un doble mutante D314A-S126R, que combina estas dos sustituciones. Las variantes de CD, junto con la enzima salvaje de *Escherichia coli* K12, fueron expresadas en *E. coli* BL21(DE3) utilizando el sistema pET-28a. Los mutantes simples como el doble mostraron rendimientos similares, siendo 53±2, 45±3, 55±4 mg de proteína por litro de cultivo, respectivamente. Con una pureza superior al 90% en todos los casos determinada por gel SDS-Page. Posteriormente, se determinó la actividad total y específica de cada variante mediante un ensayo colorimétrico que responde a cambios en la concentración de amonio, desarrollado en nuestro laboratorio. Las actividades específicas se ubicaron en un rango de 0.06±0.01, 0.39±0.02 y 0.66±0.01 U/mg para S126R, D314A-S126R y la enzima salvaje respectivamente. La caracterización cinética reveló que la CD salvaje presentó los mejores parámetros catalíticos para ambos sustratos, mientras que para los mutantes fue de 0.005±0.001$mM^{-1}s^{-1}$ para S126R, 0.032±0.004$mM^{-1}s^{-1}$ para D314A-S126R y 0.084±0.019$mM^{-1}s^{-1}$ para la salvaje. Los ensayos de competencia entre sustrato natural y 5-FC mediante HPLC evidenciaron que los mutantes presentan una menor afinidad por el sustrato natural, siendo especialmente marcado este efecto en el doble mutante, lo que reduce la competencia frente al profármaco y mejora la eficiencia relativa de conversión en condiciones mixtas. Este cambio en el perfil de especificidad de sustrato inducido por las mutaciones combinadas, representa una estrategia promisoria para diseñar variantes de CD con mayor selectividad hacia 5-FC, con potenciales aplicaciones terapéuticas.

1. Mahan, S. D ., et. al. (2004). Protein Engineering Design and Selection, 17(8), 625–633.

2. Kohila, V., et. al. MedChemComm, 2012, 3(10),1316.

Desarrollo y evaluación de agentes de unión a bacterias Gram negativas basados en el receptor scavenger CD6 humano.

Gerónimo Huerta-Firpo[1]; Florencia Castagna[1]; Camila Cedres[1]; Martin Flo[2]; Gustavo Mourglia-Ettlin[1]; Gabriel Lassabe[1]

[1]Área Inmunología. DEPBIO, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.
[2]Unidad de biofísica de proteínas, Institut Pasteur, Montevideo, Uruguay

gerohuertafirpo@gmail.com

CD6 es una glicoproteína transmembrana expresada en algunas poblaciones de linfocitos, y está involucrada en procesos de activación y diferenciación celular. El ectodominio de CD6 presenta una organización característica compuesta por tres dominios extracelulares en tándem del tipo SRCR (del inglés, *Scavenger Receptor Cysteine-Rich*), y estudios recientes en ratones deficientes en CD6 mostraron que presenta un papel importante en la respuesta inmune frente a infecciones bacterianas. Dichas funciones serían atribuibles a la capacidad de sus dominios SRCR para interactuar con componentes bacterianos, como por ejemplo lipopolisacáridos (LPS). De hecho, la administración de la forma recombinante soluble del ectodominio de CD6 ha mostrado efectos profilácticos y terapéuticos en modelos murinos de sepsis bacteriana. Por ello, con el objetivo de identificar y caracterizar regiones del ectodominio de CD6 con potencial valor terapéutico frente a infecciones bacterianas, se generaron las proteínas recombinantes denominadas rCD6.D1 y rCD6.D3, correspondientes al dominio SRCR distal y proximal respectivamente, así como sus versiones diméricas mediante su fusión al fragmento Fc de la IgG1 humana (hFc). Las cuatro proteínas recombinantes se produjeron por transfección transitoria en células HEK293T y se purificaron del sobrenadante mediante cromatografía de afinidad; obteniéndose productos de alta pureza y estabilidad. La capacidad de las proteínas de unirse a bacterias Gram negativas, así como de unirse específicamente a LPS, se evaluó mediante inmunoensayos de ELISA y ensayos de aglutinación bacteriana. Los resultados permitieron comparar la afinidad relativa de los distintos dominios, así como evaluar el potencial de fusionar las proteínas a una región hFc. En base a los resultados obtenidos, se continuará con la evaluación funcional *in vitro* de las proteínas recombinantes en términos de capacidad neutralizante de LPS.

Caracterización de un preparado inmovilizado de la poliprenil fosfato manosa sintasa de *Rhodococcus erythropolis*

Malena Dalies[1,2]; Cecilia Ortiz[1]; Ryan Packer[3]; Manuela Tosin[3]; Lorena Betancor[1]

[1]*Laboratorio de Biotecnología, Departamento de Biotecnología, Facultad de Ingeniería, Universidad ORT Uruguay, Montevideo, Uruguay*

[2]*PEDECIBA Química, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[3]*Chemical Biology Research Facility, Department of Chemistry, University of Warwick, Coventry, United Kingdom*

maledalies@hotmail.com

Las poliprenil fosfato manosa sintasas (PPMSs) son glicosiltransferasas que transfieren un grupo manosa desde un azúcar activado hacia poliprenoles fosforilados, generando fosfolípidos manosilados[1]. Estos compuestos presentan interés por su actividad biológica, participación en virulencia y resistencia a antibióticos[2]. El uso de PPMSs como biocatalizadores ha sido escasamente explorado debido a su inestabilidad intrínseca[3].

En este trabajo se logró expresar, purificar e inmovilizar una PPMS recombinante de *Rhodococcus erythropolis* (RePPMS) en una matriz de Ni-IDA agarosa. La enzima purificada presentó una pureza aproximada del 90 %. Aunque la cantidad de proteína pura fue constante entre los lotes, la actividad específica varió, con un promedio de $0{,}022 \pm 0{,}016$ U/mg, posiblemente debido a pérdidas de actividad durante el proceso de purificación.

Se determinaron los parámetros cinéticos para ambas formas en presencia de GDP-manosa y fitanil-fosfato. Para GDP-manosa, la RePPMS libre presentó Km = 305 ± 37 µM y kcat = $0{,}40 \pm 0{,}02$ s^{-1}, para la inmovilizada, Km = 32 ± 4 µM y kcat = $0{,}157 \pm 0{,}003$ s^{-1}. Para fitanil fosfato, la enzima libre presentó Km = 450 ± 60 µM y kcat = $0{,}26 \pm 0{,}03$ s^{-1}, para la inmovilizada, Km = 196 ± 40 µM y kcat = $0{,}40 \pm 0{,}03$ s^{-1}. Esta mejora en los parámetros cinéticos podría deberse a una mayor exposición del sitio activo al quedar fijado en la matriz.

Se estudió la estabilidad de ambas formas a 25, 37 y 50 °C durante 1 h y se observó una mayor estabilidad por parte del inmovilizado. En un ensayo de cinética de inactivación a 50 °C, la vida media del inmovilizado fue 27 veces mayor que la de la enzima libre, reteniendo $63{,}98 \pm 0{,}67$ % de su actividad tras 24 h. El inmovilizado fue reutilizado hasta 4 veces, conservando el 50% de su actividad. En un ensayo en lote a 25 °C durante 48 h, se logró una conversión del $31{,}4 \pm 1{,}0$ %. Estos resultados validan la inmovilización de la RePPMS como estrategia para estabilizar la enzima y avanzar hacia aplicaciones biotecnológicas.

1. Lommel, M. & Strahl, S. Protein O-mannosylation: Conserved from bacteria to humans. Glycobiology 19, 816–828 (2009).

2. Gibson, K. J. C. et al. Disruption of Cg-Ppm1, a Polyprenyl Monophosphomannose Synthase, and the Generation of Lipoglycan-less Mutants in Corynebacterium glutamicum *. Journal of Biological Chemistry 278, 40842–40850 (2003).

3. Holman, N. D. M., Wilkinson, A. J. & Smith, M. C. M. Alanine-scanning mutagenesis of protein mannosyl-transferase from Streptomyces coelicolor reveals strong activity-stability correlation. Microbiology 167, 001103 (2021).

Producción sostenible de L-sorbosa mediante *Gluconobacter oxydans* como biocatalizador

Florencia Pirotti[1,2]; Nicolas Soriano[2]; Magdalena Ripoll[2]; Colin Barrow[1]; Lorena Betancor[2]

[1]*Centre for Sustainable Bioproducts, Faculty of Science, Engineering and Built Environment (SEBE), Deakin University, Waurn Ponds, Victoria 3216, Australia*

[2]*Laboratorio de Biotecnología, Universidad ORT Uruguay, Mercedes 1237, 11100 Montevideo, Uruguay*

nicolas.soriano@fi365.ort.edu.uy

Las biotransformaciones constituyen una alternativa eficiente y ambientalmente sustentable para la síntesis de compuestos químicos de valor[1]. Mediante el uso de microorganismos como biocatalizadores renovables, es posible alcanzar alta regio- y estereoselectividad bajo condiciones de reacción suaves, lo que permite reducir tanto el consumo energético como la generación de subproductos no deseados[2]. Sin embargo, la obtención de biocatalizadores continúa siendo un proceso costoso y, en ciertos casos, poco optimizado. Por ello, resulta fundamental realizar una evaluación integral de sostenibilidad que contemple la producción del biocatalizador hasta su desempeño catalítico y reutilización[3]. En este contexto, el presente trabajo se centra en la producción de L-sorbosa, un intermediario clave en la síntesis industrial de vitamina C, a partir de D-sorbitol utilizando *Gluconobacter oxydans* como biocatalizador. Con el objetivo de mejorar la sostenibilidad del proceso, se implementaron diversas estrategias. En primer lugar, se evaluó el uso de jugo de manzanas de descarte como medio de cultivo para la producción del biocatalizador; un medio conteniendo 50% de jugo permitió obtener productividades de biomasa (0,047 ± 0,002 g/L.h) comparables a las del medio comercial de referencia (0,032 ± 0,001 g/L.h). Luego, se estudió la capacidad catalítica de las células crecidas en medio, demostrando ser capaces de producir eficientemente 36,5 ± 1,3 g/L L-sorbosa (88,3 ± 8,7 %) en 10 h en un medio de conversión compuesto únicamente por D-sorbitol en agua. Finalmente, se llevaron a cabo estudios sobre la mejora y reusabilidad del biocatalizador. Se comparó la inmovilización celular en una matriz híbrida de alginato-sílice frente al uso de células libres en reposo durante 10 ciclos consecutivos de conversión de 24 horas. Mientras que las células inmovilizadas perdieron el 70% de su actividad tras el segundo ciclo, las células en reposo conservaron más del 90% de su actividad inicial durante seis ciclos, descendiendo progresivamente hasta un 10% en el décimo. Las causas de este comportamiento están siendo analizadas mediante tinción diferencial de viabilidad celular y observación por microscopía confocal. En conjunto, este estudio busca aportar una visión integral para la optimización sostenible de procesos de biotransformación.

1. Bell, E. L., Finnigan, W., France, S. P., Green, A. P., Hayes, M. A., Hepworth, L. J., Lovelock, S. L., Niikura, H., Osuna, S., Romero, E., Ryan, K. S., Turner, N. J., & Flitsch, S. L. (2021). Biocatalysis. *Nature Reviews Methods Primers*, *1*(1), 46. https://doi.org/10.1038/s43586-021-00044-z
2. Sheldon, R. A., Basso, A., & Brady, D. (2021). New frontiers in enzyme immobilisation: robust biocatalysts for a circular bio-based economy. *Chemical Society Reviews*, *50*(10), 5850–5862. https://doi.org/10.1039/D1CS00015B
3. Pirotti, F. D., Soriano, N., Ripoll, M., Domínguez de María, P., Barrow, C. J., & Betancor, L. (2025). Improving the sustainability of Gluconobacter oxydans l-sorbose production using food waste media and recyclable resting cells. *Sustainable Chemistry and Pharmacy*, *46*, 102098. https://doi.org/10.1016/j.scp.2025.102098

Inmunoensayo no competitivo para la detección de microcistinas

Kevin Karlen; Paula Segovia; Gualberto González

Laboratorio de Inmunología, DEPBIO, Facultad de Química, UDELAR, Montevideo, Uruguay

kkarlen@higiene.edu.uy

Las microcistinas (MCs), toxinas hepatotóxicas producidas por cianobacterias, representan un riesgo para la salud humana y los ecosistemas acuáticos. Su monitoreo es prioritario, dado que la Organización Mundial de la Salud (OMS) establece un nivel guía de 1 µg/L para microcistina-LR en agua potable. Los métodos de detección vigentes están basados principalmente en inmunoensayos competitivos. En este trabajo se busca desarrollar un inmunoensayo no competitivo con el potencial de ofrecer varias ventajas. En primer lugar, la señal generada es directamente proporcional a la concentración del analito en la muestra, lo que permite una lectura más intuitiva. Además, los ensayos no competitivos son generalmente más sensibles, pueden ofrecer una mayor especificidad debido al reconocimiento por dos anticuerpos, y a menudo presentan un rango de trabajo más amplio.

El ensayo emplea un formato sandwich no competitivo mediante dos “nanobodies”: A2 (anti-MC-LR) para captura y K3 para detección del inmunocomplejo. El Nb K3 se seleccionó mediante *phage display* a partir de una biblioteca de Nbs generada al inmunizar una llama con complejos A2-hFc/MC-LR, donde A2-hFc es una fusión diseñada para potenciar su inmunogenicidad. Este diseño garantiza que K3 reconozca exclusivamente el complejo antígeno-anticuerpo sin unión a A2 libre.

El ensayo mostró un límite de detección (“LOD”) de 0,05 µg/L y se validó un nivel mínimo reportable (MRL) de 0,10 µg/L según el método 546 de la agencia de protección medioambiental de los Estados Unidos (“EPA”). La precisión se cuantificó mediante estudios de intraensayo (15 réplicas en una misma placa) e interensayo (75 réplicas en cinco días), obteniendo coeficientes de variación (CV) ≤15% y ≤20% respectivamente como indican los umbrales de aceptación internacionales. Se evaluó la reactividad cruzada frente a variantes estructurales (MC-LR, MC-RR, MC-YR, MC-LA, MC-LF) obteniendo buena reactividad cruzada.

La robustez analítica del método y sensibilidad, así como su diseño, facilitan su implementación en tiras reactivas “point of care” (POC). Esta adaptabilidad permitiría el monitoreo descentralizado de MCs en recursos hídricos, reduciendo tiempos de análisis y garantizando cumplimiento normativo en entornos remotos.

Estudio experimental y teórico de propiedades magnéticas de compuestos de renio(IV) y lantánidos

Carolina Ferrari-Argachá[1]; Carlos Rojas-Dotti[1]; Santiago Valiero[1,4]; Aparicio Loaces[1]; Nicolás Moliner[2]; Leopoldo Suescun[3]; Francisco Lloret[2]; José Martínez-Lillo[2]; Joan Cano[2]; Ricardo González[1]

[1]*Química Inorgánica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Química Inorgánica, Instituto de Ciencia Molecular, Universidad de Valencia, Valencia, España*

[3]*CRYSSMAT, Departamento de Experimentación y Teoría de la Materia y sus Aplicaciones, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[4]P*rograma de posgrados de la Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay*

svaliero@fq.edu.uy

Los Single Molecule Magnets (SMMs) son compuestos discretos que retienen la magnetización en ausencia de un campo magnético y encuentran potencial aplicación en la computación cuántica y espintrónica[1,2]. La mayor parte de los compuestos estudiados comprenden iones 3*d* y 4*f*. Los iones 5*d*, a pesar de presentar interesantes respuestas magnéticas, han sido comparativamente menos estudiados. Dentro de estos, el ion Re(IV) presenta una importante constante de acoplamiento espín-orbita, que en compuestos octaédricos le confiere alta anisotropía magnética en el estado fundamental[3]. En este trabajo presentamos el estudio magnético experimental y teórico del compuesto mononuclear $NBu_4[ReBr_5(3,4\text{-}H_2pydc)]\cdot 0{,}5H_2O$ (**1**) y los compuestos heteropolinucleares: $(NBu_4)_2\{Ln(EtOH)(py_2COOEt)[ReBr_5(3,5\text{-}Hpydc)]_2\}n\cdot 3{,}5H_2O\cdot MeOH$; Ln = Dy(**2**), Tb(**3**) y $\{Ln[ReBr_5(3,4\text{-}pydc)](DMF)_3(MeOH)\}n\cdot DMF$; Ln = Dy(**4**), Tb(**5**), Gd(**6**).

Los compuestos **2** y **4** presentan relajación lenta de la magnetización que fue ajustada a mecanismos tipo Orbach y túnel cuántico. Los resultados teóricos muestran que las propiedades magnéticas del compuesto **1** son correctamente reproducidas por cálculos de tipo CASSCF+NEVPT2 considerando un espacio activo de 3 electrones y 5 orbitales. Por otro lado, el estudio de las interacciones magnéticas en el compuesto **6** mediante el formalismo broken-symmetry (BS-DFT) indica que no existe canje magnético de tipo Re(IV)-Ln(III) ni Ln(III)-Ln(III), mientras que se detecta una leve interacción entre iones Re(IV) de la misma cadena que ayuda a validar el ajuste experimental propuesto.

Agradecimientos: CAP, CSIC, PEDECIBA, ANII y Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (España, proyecto PID2019-109735GB-I00)

Referencias: [1] Ferrando-Soria, J. *et al*. (**2017**) *Coord. Chem. Rev.,* vol. 339 17–103. [2] Coronado, E. (**2020**). Nat. Rev. Mater., vol. 5(2), 87-104. [3] Martínez-Lillo, J. *et al*. (**2015**) Coord. Chem. Rev., vol. 289–290 215–237.

Síntesis de quantum dots de ZnO encapsulados en Eu-MOF como materiales de emisión dual

Santiago Romero[1]; Martin Esteves[2]; Julia Torres[1]

[1]Área Química inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay
[2]Área Física, DETEMA, Facultad de Química, UDELAR, Montevideo, Uruguay

sromero@fq.edu.uy

Los materiales de emisión dual permiten el diseño de sensores autocalibrables ya que, en presencia de un determinado analito, pueden modificar selectivamente una de las señales, siendo la respuesta normalizada prácticamente independiente de las condiciones experimentales e instrumentales empleadas. En este trabajo se presenta la preparación de nanomateriales híbridos de emisión dual basados en la encapsulación de quantum dots (QD) de ZnO en un ensamblaje tipo *metal-organic-framework* de europio(III) (Eu-MOF). El material se preparó mediante precipitación del ZnO-QD directamente en los poros de una suspensión estable del nanoEu-MOF, tomando como base los procedimientos reportados para la preparación de los componentes ZnO-QD[1] y Eu-MOF (de Eu(III) y ácido trimésico)[2]. Las suspensiones de material nanométrico obtenidas fueron evaluadas mediante dispersión dinámica de luz y espectroscopia UV-visible y fluorescencia. A su vez, los materiales sólidos aislados se caracterizaron mediante espectroscopia infrarroja, análisis elemental y difracción de rayos X de polvo. El material híbrido muestra que la estructura del Eu-MOF se mantiene y asimismo tiene lugar la emisión dual en estado sólido con una banda correspondiente al ZnO-QD centrada en 450 nm y la emisión característica del Eu(III) en 595 y 616 nm (Figura 1).

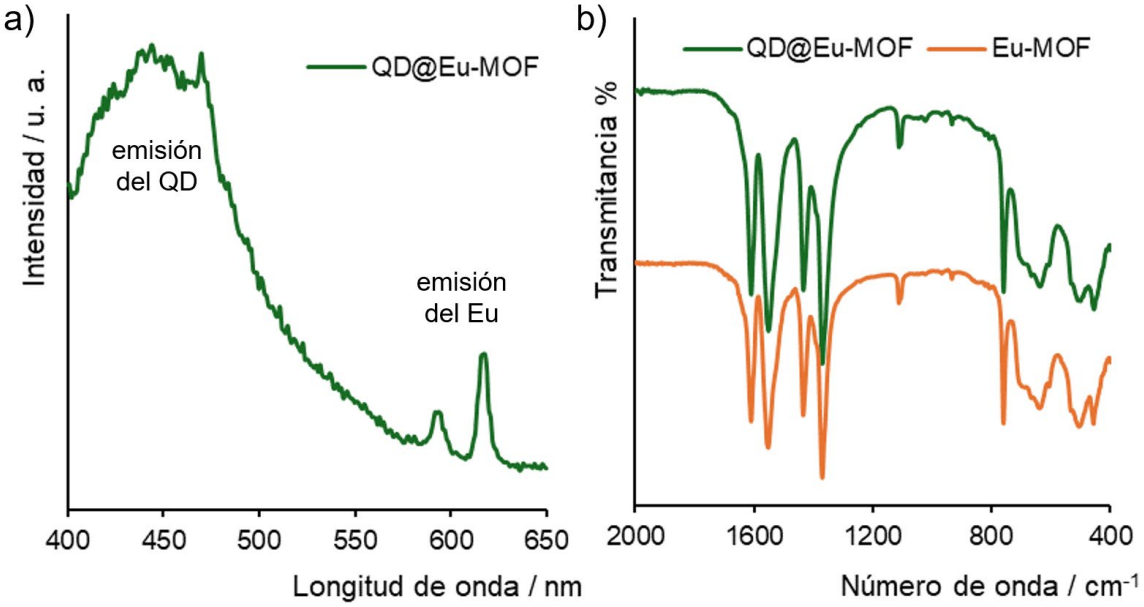


Figura 1- Caracterización del material híbrido ZnO-QD@Eu-MOF: a) Luminiscencia dual (longitud de onda de excitación 350 nm. b) Espectro infrarrojo mostrando la similitud con Eu-MOF.

[1] J. Oliva, L. Díaz-Torres, A. Torres-Castro, P. Salas, L. Perez-Mayen, E. De la Rosa, *Optical Materials Express*, 2015, **5**, 1109.
[2] K. Liu, H. You, Y. Zheng, G. Jia, L. Zhang, Y. Huang, M. Yang, Y. Song, H. Zhang, *CrystEngComm*, 2009, **11**, 2622.

Quantum dots de CdS decorados con iones lantánidos

Luisina Zabala; Julia Torres; Carolina Mendoza

Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

lzabala@fq.edu.uy

La sensibilización eficiente de los iones lantánidos Eu y Tb, emisores en el rango visible, posibilita el diseño de materiales con perfiles ópticos adecuados para diversas aplicaciones. Dicha sensibilización puede lograrse por ejemplo mediante la combinación de esos iones con quantum dots (QD), siempre que los mecanismos de transferencia resulten eficientes en relación a los mecanismos competitivos de decaimiento no radiante. En este trabajo se explora el diseño de emisores de Eu y Tb sensibilizados por QD de CdS. Para ello se prepararon CdS-QD de tamaño medio del orden de 6 nm mediante modificación de un procedimiento reportado,[1] empleando como ligando de recubrimiento cisteína. Este ligando bifuncional cuenta con un grupo tiol para anclaje a la superficie del QD y un grupo carboxilato para coordinar a los Ln. Posteriormente, con el fin de decorar los QD obtenidos, se exploraron distintos procedimientos para lograr la efectiva unión de los Ln al QD sin desestabilizar la suspensión acuosa coloidal. Los resultados muestran que la emisión del CdS-QD centrada en 500 nm prácticamente se suprime en CdS-Eu y se intensifica ligeramente en CdS-Tb (Figura 1a). La comparación del perfil óptico de los QD decorados con Ln muestran para el Eu la desaparición del espectro característico (Figura 1c para 0.4 mg/mL de Eu(III)), mientras que para el Tb se observa un aumento de intensidad en relación al ion no sensibilizado (Figura 1b para 2 mg/mL de Tb(III)). Los resultados con Tb resultan promisorios para su empleo como sensor en agua.

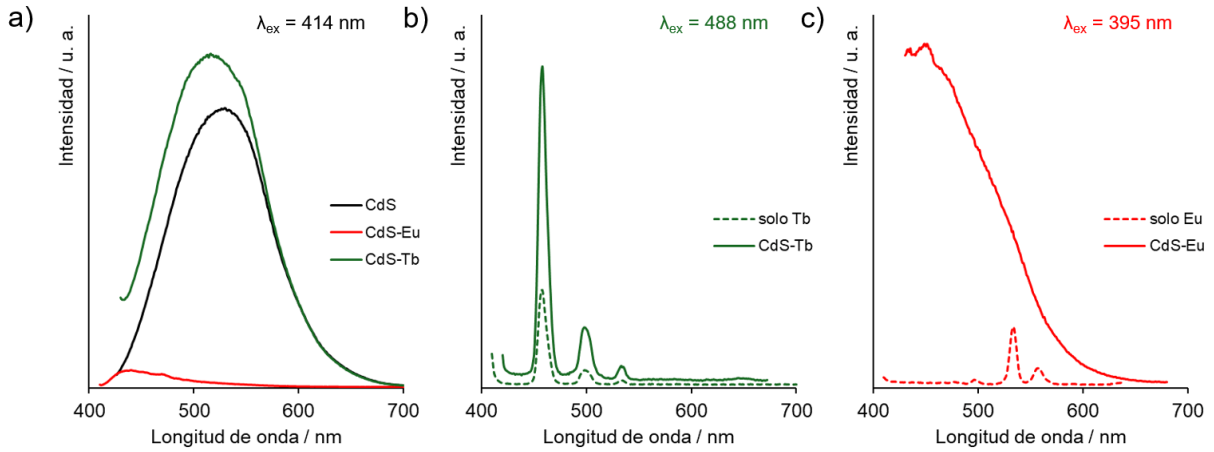


Figura 1- Perfiles de emisión de las suspensiones acuosas de los CdS-QD obtenidos y los derivados decorados con Eu o Tb. Las longitudes de onda de excitación empleadas permiten maximizar la emisión de a) QD, b) Tb, c) Eu. En líneas punteadas se muestran los perfiles de los blancos en iguales concentraciones y condiciones.

[1] J. Zhuang, X. Zhang, G. Wang, D. Li, W. Yang, T. Lia, J. Mater. Chem., 2003, 13, 1853

Caso Clínico: Ingesta Intencional de Mercurio Elemental en Uruguay

Daniela Díaz[1]; María José Castro[1]; Lucía Dellepiane[1]; Eleuterio Umpiérrez[1]; Laura del Puerto[2]; Alba Negrin[2]; Cecilia Collazo[3]; Romina Caraballo[3].

[1]*Unidad de Medio Ambiente, Drogas y Doping, Instituto Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química – UdelaR.*

[2]*Unidad Académica de Toxicología Clínica, Facultad de Medicina, UdelaR.*

[3] *Sanatorio Cooperativa Regional de Asistencia Médica Integral (CRAMI), Canelones, Uruguay.*

ddiaz@fq.edu.uy

El mercurio puede encontrarse en tres formas principales: elemental, inorgánico y orgánico. La elección del biomarcador adecuado para evaluar la exposición depende del tipo de mercurio implicado. Los biomarcadores más utilizados son sangre y orina, apropiados para la detección de mercurio elemental e inorgánico, aunque con una ventana diagnóstica limitada: luego de 30 horas, el metal puede ser completamente eliminado del organismo.
CASO CLÍNICO: en marzo de 2023, un hombre de 47 años, residente en Canelones, se presenta alegando la ingesta intencional de mercurio elemental. Antecedentes personales: múltiples intentos previos de autoeliminación. No se declara el volumen exacto ingerido, pero se estima entre 200 y 300 mL. Se inicia un monitoreo semanal de los biomarcadores en orina y sangre, utilizando un Analizador Directo de Mercurio DMA-80 (Milestone) y materiales de referencia certificados por el NIST. Además, se realizaron radiografías toracoabdominales para seguimiento clínico.
La evolución no fue favorable: el paciente fallece 104 días después del episodio. Debido a la naturaleza del compuesto ingerido, el tratamiento post mortem del cuerpo implicó riesgos de contaminación ambiental, lo que requirió una coordinación especial entre personal técnico de la unidad, médicos tratantes y autoridades de la Intendencia de Canelones, a fin de definir un protocolo de sepultura seguro y evitar la posible liberación de vapores de mercurio.
El miércoles 18 de octubre de 2023, se concurre al cementerio Los Fresnos para realizar mediciones de mercurio en aire previas a la exhumación del cuerpo. Para ello se utilizó un analizador de vapores de mercurio Jerome 431-X (Arizona Instruments). Las mediciones se efectuaron en el hall del edificio, en la cámara refrigerada y en el entorno del féretro, sin hallarse valores detectables o adversos. Ante esto, se autorizó la exhumación y el traslado del cuerpo a un ataúd metálico para su inhumación definitiva.
Este caso representa un precedente nacional, tanto desde el punto de vista clínico como operativo, al no existir antecedentes en Uruguay sobre el manejo de una ingesta masiva de mercurio elemental. Constituye un desafío interdisciplinario que involucró a profesionales de la salud, toxicología, gestión ambiental y autoridades locales, y genera un antecedente valioso en caso de futuras situaciones similares.

Propiedades magnéticas de materiales 1D obtenidos por autoensamblaje a partir de Ln^{3+} y $[Ru^{III}Cl_2(ox)_2]^{3-}$

Carolina Pacheco[1]; Federico Mesa[1]; Lorena Martínez[1]; Javier González Platas[2]; Leopoldo Suescun[3]; Carlos Cruz[4]; Verónica Paredes[4]; Raúl Chiozzone[1]

[1]*Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

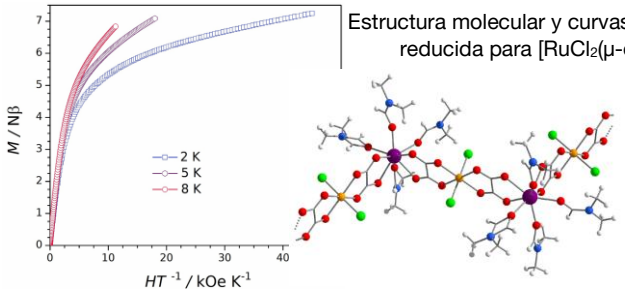
[2]*Departamento de Física Fundamental II, Universidad de la Laguna, Tenerife, España*

[3]*Cryssmat-Lab, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay,*

[4]*Departamento de Cs. Químicas, Facultad de Cs. Exactas, Universidad Andrés Bello, Santiago, Chile*

cpacheco@fq.edu.uy

Los compuestos de coordinación de rutenio(III) han atraído una atención considerable debido a sus diversas aplicaciones potenciales, incluido su uso como catalizadores, agentes anticancerígenos y componentes en materiales magnéticos o dispositivos de energía solar. En nuestro caso, nos interesa estudiar el comportamiento magnético de compuestos de Ru(III), especialmente cuando se combinan con otros centros metálicos paramagnéticos [1].
En este trabajo se reporta la síntesis de una familia de compuestos de fórmula general $[RuCl_2(\mu\text{-}ox)_2Ln(dmf)_4(H_2O)_x]_n$ (ox = oxalato; dmf = dimetilformamida; Ln = Ce, Gd, Tb, Dy, Ho; x = 0, 1), que se obtienen a partir de *trans*-$(PPh_4)_2[RuCl_2(Hox)(ox)]\cdot 5H_2O$ y $LnCl_3\cdot xH_2O$ y cristalizan de agua:dmf como agujas amarillas. Estos nuevos polímeros de coordinación se caracterizaron mediante espectroscopia FT-IR y UV-vis, análisis elemental de C, H y N, difracción de polvo y fluorescencia de rayos X. Se obtuvieron cristales adecuados para la difracción de rayos X directamente de la solución madre. La estructura cristalina de estos compuestos está constituida por unidades $[Ln(dmf)_4(H_2O)_x]^{3+}$ y $[RuCl_2(ox)_2]^{3-}$ alternadas, formando cadenas neutras en zig-zag, en las que los ligandos oxalato actúan como puente bisdidentado entre los centros metálicos.
Estudios preliminares confirman la presencia de anisotropía magnética en algunos de estos compuestos. Sin embargo, a diferencia de lo observado en el precursor mononuclear de rutenio o en la cadena análoga con lantano(III), no se ha encontrado en ningún caso relajación lenta de la magnetización, lo que puede atribuirse a una interacción débil entre los iones Ru(III) y Ln(III) en la cadena.



Estructura molecular y curvas de magnetización reducida para $[RuCl_2(\mu\text{-}ox)_2Dy(dmf)_4]_n$

[1] G. Marinescu, A. M. Madalan, C. Maxim, S. Shova, R. Clérac and M. Andruh, Dalton Trans., 2019, 48, 15455–15464.

Using Ion Mobility-Mass Spectrometry to Understand Single-Chain *De Novo* Designed α-Helical Coiled Coils

Ana Clara Bath Alén[1]; Liuwei Meng[1]; Katarzyna Ozga[2]; Derek Woolfson[2]; Perdita Barran[1]

[1]*Barran Group, Department of Chemistry, Faculty of Science and Engineering, University of Manchester, Manchester, United Kingdom*

[2]*Woolfson Group, Department of Chemistry, Faculty of Science and Engineering, University of Bristol, Bristol, United Kingdom*

Single-chain *de novo* designed α-helical coiled coils have recently been developed. They are robust and readily tuneable, making them attractive scaffolds for biocatalyst design.[1] Enzymatic activity will likely require the introduction of flexibility, but there is currently no analytical workflow to measure their dynamics.

Native ion mobility-mass spectrometry (nIM-MS) measures the mass-to-size and size-to-charge ratios of biomacromolecules, using soft ionisation conditions to preserve native structure on transfer to the gas phase.[2] Subjecting protein ions to collisions with inert gas molecules allows us to probe the conformational changes that occur on heating (collision-induced unfolding). We have used this technique to generate a repeatable stability assay capable of differentiating scaffolds with just a handful of amino acid modifications. This data will inform the design of new, more flexible coiled coils.

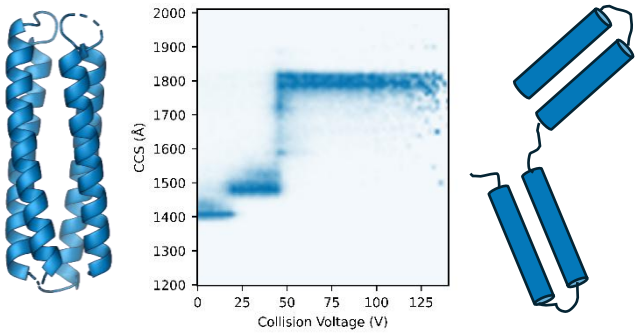


Figure 1: Crystal structure of four helix antiparallel single-chain coiled coil (a), it's unfolding fingerprint (b) and a proposed unfolded intermediate (c).

Now that we can quantitate coiled coil stability, we are applying this workflow to investigate the effect of ligand binding affinities and the effect of binding on unfolding. This approach, as opposed to the fluorescence assay currently in use, allows a broader range of substrates to be screened.

Collision-induced unfolding mechanisms are not well understood.[3] α-Helical coiled coils are an excellent model system to investigate gas-phase unfolding. We have used activated nIM-MS to explore their unfolding, identifying a stepwise mechanism in which non-covalent interactions between helices are sequentially broken. In addition, we observe a correlation between energy required to cleave a peptide bond and its AlphaFold pLDDT score, highlighting the potential for collision-induced dissociation-based structural characterisation in future.

1. D. N. Woolfson, *J. Bio. Chem.*, 2023, 299, 104579 (10.1016/j.jbc.2023.104579)
2. E. Christofi and P. Barran, *Chem. Rev.*, 2023, 123, 2902–2949 (10.1021/acs.chemrev.2c00600)

Puesta a punto de una metodología para el análisis selectivo de residuos de Etilen bis ditiocarbamatos en frutas y hortalizas

Natalia Gérez García[1,2,3]; Elisa Leoncini[2], María Verónica Cesio[2]; Horacio Heinzen[2]

[1]*Programa de Posgrado en Química, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[2] *Grupo de Análisis de Compuestos Traza, DQO, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*

[2] *Área Química Analítica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*

ngerez@fq.edu.uy

Los ditiocarbamatos (DTC) son fungicidas de contacto que se aplican generalmente en forma preventiva. Según información del Ministerio de Ganadería, Agricultura y Pesca del Uruguay, el Mancozeb es el segundo fungicida más importado a nivel nacional, quedando debajo solamente de la combinación de Protioconazole y Trifloxostrobin. Los DTC, en especial el Mancozeb, son muy utilizados en cultivos hortofrutícolas ya que combaten hongos en perales, cebollas, uvas, morrones, papas y tomates. A nivel reglamentario, la definición de residuo de DTC según el Reglamento Europeo 396/2005 se reporta el contenido total de DTC expresado como disulfuro de carbono (CS_2). Su determinación indirecta es a través de la digestión ácida reductiva, que produce cuantitativamente CS_2 que es atrapado en isooctano. Un problema que se plantea es la inespecificidad del método: Los etilenbisditiocarbamatos (EBDTC) como el Mancozeb han sido prohibidos en Europa y están en revisión en diferentes países. Se busca desarrollar una estrategia para distinguir entre ambas clases de compuestos. Se propone realizar una derivatización previa con dimetilsulfato (DMS). Los ETBDC metilados pueden extraerse mediante una extracción sólido-líquido en un esquema similar al QuEChERS y posterior análisis instrumental empleando LC-MS/MS.

Se presentan los resultados de la puesta a punto de esta metodología. Se ajustó la reacción de metilación, y se testeó en una matriz vegetal. Se seleccionó tomate donde los EBDTC están aprobados, por su disponibilidad en plaza, los datos de consumo de la dieta uruguaya y la oferta anual de la Lista Inteligente.

La metodología consta de 4 etapas:1) Derivatización de la muestra con DMS 0.05M en acetonitrilo, 2) Extracción sólido líquido con sulfato de magnesio y cloruro de sodio en la etapa del *salting-out* 3) Clean-up dispersivo con amina primaria y secundaria, 4) análisis instrumental por LC-QqQ-MS en modo de Monitoreo de Reacciones Múltiples. La veracidad y precisión fueron acordes a las especificaciones del documento SANTE (Recuperaciones entre 73-90% con RSD's <20%). La linealidad se evaluó realizando Calibración por Procedimiento y con estándar externo, con r^2 >0.999 en ambos casos. El método demuestra ser una herramienta válida para distinguir entre las familias de DTC: los DTC simples, autorizados y los EBDTC, más tóxicos y en vías de prohibición.

Ensayos de degradaciones forzadas de Ivermectina

Martín Ignacio Braga Gonzalez[1]; Ana Vidarte[1]; Guillermo Valdomir[2]; Mariela Pistón[3]

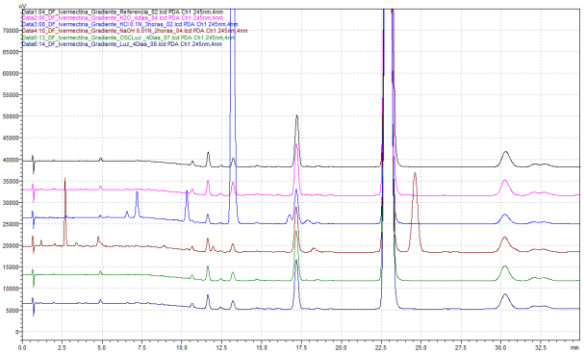
[1]*Laboratorio de Química Analítica de Medicamentos, Departamento de Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Laboratorio de Química Farmacéutica, Departamento de Química Orgánica (DQO), Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[3]*Área de Química Analítica, Departamento Estrella Campos (DEC), Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

bragamartin@fq.edu.uy

La Ivermectina es una lactona macrocíclica perteneciente al grupo de las avermectinas, las cuales son compuestos de origen natural obtenidos a partir de la bacteria *Streptomyces avermitilis*. Este fármaco se emplea como un agente antiparasitario de amplio espectro, con aplicaciones tanto en medicina humana como veterinaria.
El objetivo del presente trabajo es desarrollar una metodología analítica para el análisis de ivermectina en formulaciones farmacéuticas veterinarias inyectables de antiparasitarios combinados.
Para desarrollar métodos analíticos específicos e indicativos de estabilidad, que permitan la cuantificación del principio activo en las formas farmacéuticas y la detección de impurezas orgánicas, se deben identificar los productos de degradación del principio activo. Para tal fin, se realizan estudios de degradaciones forzadas, cuyo propósito es establecer las principales vías de degradación del principio activo y sustentar el desarrollo preliminar de métodos indicadores de estabilidad, mediante la obtención de muestras representativas que permitan evaluar la especificidad del método analítico. Este enfoque contribuye directamente al establecimiento de los Atributos Críticos de Calidad (CQA) del método en desarrollo.
Se llevaron a cabo las reacciones de degradaciones forzadas buscando obtener porcentajes de degradación total entre un 5 y 20% para cada condición estudiada. Las muestras degradadas se analizaron utilizando el método en desarrollo en un LC-DAD, los cromatogramas se muestran en la figura adjunta. Se verificó la separación de los productos de degradación de la ivermectina en las condiciones estudiadas para finalmente analizarlas por LC-MS para lograr una identificación presuntiva de los productos mayoritarios mediante la comparación de los espectros obtenidos con los reportados en bibliografía. [1]



Con estos estudios, se logró evaluar la selectividad del método para la ivermectina y sus productos de degradación, lo cual permitirá continuar con el desarrollo para analizar formulaciones farmacéuticas e incluir otros principios activos.

[1] Adhikari, S., Rustum, A. M.. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*. 214 (2022).

Desarrollo y validación de una metodología analítica para la determinación de residuos de pesticidas en colza (*Brassica napus* L.)

Inés Santos; Sofía Curbelo; Lucía Pareja

Laboratorio de Compuestos Trazas, Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay

mariaines.8226@gmail.com

La colza, oleaginosa invernal de la familia de las crucíferas, ha crecido exponencialmente en Uruguay, posicionándose como el segundo cultivo de invierno tras el trigo. Este avance responde a mejores precios internacionales y un manejo agronómico más eficiente. No obstante, la incorporación de nuevos productores y la falta de información sistematizada plantean desafíos para garantizar estándares internacionales de calidad e inocuidad. Dado que más del 70 % de la producción se exporta a mercados exigentes como Europa, es esencial cumplir con los Límites Máximos de Residuos (LMR) de pesticidas. En este escenario, la química analítica desempeña un papel clave en el control de residuos y la validación de prácticas agrícolas sostenibles. El presente trabajo tiene como objetivo desarrollar y validar una metodología analítica para la determinación de residuos de pesticidas en grano de colza, que permita evaluar prácticas fitosanitarias aplicadas en campo y asegurar el cumplimiento de los requisitos de inocuidad de los mercados de exportación. El desarrollo del método consistió en una primera etapa de comparación de diferentes variaciones del método QuEChERS: original, citrato y acetato. Los mismos difieren principalmente en la etapa de extracción y *salting-out* donde, en los últimos dos, se produce la formación de buffers *in situ* que favorecen la extracción de ciertos pesticidas pH-dependientes. En una segunda etapa se evaluó la adición o no de una etapa de purificación. El método que presentó los mejores porcentajes de recuperación y reproducibilidad fue el QuEChERS citrato sin *clean-up* mediante *freeze-out* durante una hora. Posteriormente se filtra el extracto a viales de autosampler para su inyección en HPLC-MS/MS. La validación del método se realizó conforme a los lineamientos del documento SANTE [1] a 3 niveles de concentración (10, 25 y 50 µg/kg, por quintuplicado) para los pesticidas más comúnmente empleados en colza. Los analitos estudiados presentaron recuperaciones y reproducibilidad en el rango del 70–120%, con límites de cuantificación de 10 µg/kg y buena linealidad. La aplicabilidad de la metodología se evaluó a partir del análisis de muestras reales. El método desarrollado permite asegurar el cumplimiento de los LMR establecidos por el Codex Alimentarius [2] y constituye una herramienta robusta para el monitoreo de residuos en este cultivo estratégico.

[1] European Commission, Guidance document on analytical quality control and method validation procedures for pesticides residues analysis in food and feed. SANTE/11312/2021v2.

[2] Codex Alimentarius Commission Procedural Manual – Thirtieth edition. FAO & WHO. **2025**, Rome.https://doi.org/10.4060/cd4216en

Avances en la determinación de Cr(VI) en aguas naturales mediante voltamperometría de barrido lineal

Pablo González[1]; Eduardo Mendez[2]; Alicia Mollo[1]

[1]*Área de Química Analítica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Biomateriales, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

pablog@fq.edu.uy

El cromo es un elemento químico que, en disolución acuosa, presenta una química compleja, con diversas especies en disolución. Dicho elemento es ampliamente utilizado en diversas industrias como la siderúrgica y la industria de curtido de pieles. Debido a estos procesos industriales, el cromo es vertido en cursos de agua donde se descargan los efluentes.

Los estados de oxidación del cromo más comunes en aguas son el Cr(III) y el Cr(VI). El Cr(III) es un nutriente esencial (con una ingesta recomendada de 50 a 200 µg al día para adultos); mientras que el Cr(VI) es un potente cancerígeno. La normativa uruguaya establece como valor máximo permitido de cromo en aguas clase 1, 2a, 2b y 3 (cursos de agua destinados a la potabilización, riego, recreación, preservación de flora y fauna hídrica respectivamente) de 0,05 mg L^{-1} (cromo total); mientras que para las aguas clase 4 (cursos de agua de zonas urbanas o para riego de cultivos no destinados al consumo humano) el valor máximo permitido es de 0,5 mg L^{-1} (cromo total). Ambos niveles son fácilmente accesibles con técnicas absorciométricas, pero requieren de equipamiento costoso, y no siempre permiten distinguir el estado de oxidación. Debido a la relevancia toxicológica del Cr(VI), es necesario contar con una técnica que permita determinar el cromo en un estado de oxidación específico.

En el presente trabajo, se muestran los primeros resultados de la determinación de Cr(VI) a niveles del orden de los µg L^{-1} en aguas mediante la técnica de la voltamperometría de barrido lineal (*Linear Sweep Voltammetry*). En esta técnica, se aplica un potencial que varía linealmente con el tiempo, registrándose la corriente farádica generada en el sistema.

El sistema consta de un electrodo de oro (electrodo de trabajo), uno de platino (auxiliar) y uno de Ag | AgCl | KCl 3M (referencia). Todas las medidas se llevaron a cabo a pH = 2. Se realizaron barridos de potencial de 0,8 V a 0,15 V y de 1,3 V a -0,2 V; en el rango de velocidades entre 0,05 V/s y 0,20 V/s. Con el barrido de 1,3 a -0,2 V y velocidad de barrido de 0,2 V/s; se obtuvo linealidad en la respuesta ($I = 4{,}548.[Cr] - 4{,}509$; $R^2 = 0{,}997$) ensayada con disoluciones desde 10 µg L^{-1} hasta 50 µg L^{-1}.

Este sistema, en sus primeros resultados, se muestra prometedor para determinar niveles de Cr(VI) bajos. Resta evaluar su desempeño en muestras de los distintos tipos de agua para su consideración como una metodología alternativa de bajo costo para la determinación de Cr(VI).

Los autores agradecemos a PEDECIBA – Química por el apoyo brindado; y a la CSIC en el marco del proyecto 22520220100148UD por la financiación brindada.

Upcycling del residuo de catalizador gastado del proceso de cracking catalítico, como aditivo puzolánico para morteros

Marcela Núñez[1]; Alma Varela[2]; Livia Arizaga[3]

1. *Gerencia de Ingeniería, Administración Nacional de Combustibles, Alcohol y Portland, ANCAP*
2. *Taller Apolo, Instituto de Proyecto, Facultad de Arquitectura, Diseño y Urbanismo, UdelaR*
3. *Área Química Inorgánica, Departamento Estrella campos, Facultad de Química, UdelaR*

larizaga@fq.edu.uy

Este trabajo estudia la potencialidad de desarrollar nuevos materiales de construcción que aporten beneficios ambientales, económicos y tecnológicos. Se trata del reciclaje del residuo del catalizador gastado, del craqueo catalítico por lecho fluido de la refinación del petróleo en Uruguay, para la elaboración de morteros. Se quiere demostrar que es factible elaborar morteros que presenten un desempeño igual o superior a uno tradicional, a un costo menor o similar, y que reduzcan los consumos tradicionales del cemento en morteros. Se propone ahondar en este tema para generar un nuevo material cementicio.

El catalizador fresco que se utiliza en la refinería de La Teja es un catalizador zeolítico sintético del tipo Y proporcionado por la Fábrica Carioca de Catalizadores, RJ Brasil. El residuo del catalizador gastado es el residuo industrial más voluminoso de la refinería que aún no se ha valorizado y su manejo y disposición final tiene un alto costo para la empresa. En la última parada técnica de la refinería del año 2024 se remodeló la unidad de Cracking Catalítico se logró mejorar la eficiencia de la unidad en cuanto al proceso de refinación, pero como consecuencia de esto se aumentó el volumen del residuo. Se estima que actualmente, el volumen anual generado es de aproximadamente 500 toneladas.(1)

Este residuo está catalogado por DINACEA como un residuo de peligrosidad alta, residuo peligroso con cierto grado de toxicidad, fundamentalmente por su contenido de hidrocarburos, metales pesados y carbón. ANCAP ha gestionado este residuo de tres maneras, uno depositándolo temporariamente en galpones acondicionados en el predio frente a la refinería, dos llevándolo a la planta de Minas como materia prima en la molienda del clinker en sustitución de la caliza, y tres depositándolo en la Celda de seguridad para residuos sólidos industriales de la Cámara de Industrias del Uruguay a un costo mensual de 210 dólares la tonelada. (2). Deshacerse de este residuo tiene un alto costo económico y ambiental para la empresa y por ello hay interés de poder reciclarlo o valorizarlo.

Se realizó la caracterización fisicoquímica y mineralógica del residuo mediante técnicas de FRX, DRX y SEM-EDS; se determinó el índice de puzolanidad,y se realizaron ensayos particulares para morteros frescos y endurecidos en porcentajes de sustitución de cemento del 0, 10, 15 y 20% y a los 1, 7, 28 y 56 días. Los resultados coinciden por lo que es esperable y varía según el porcentaje de sustitución.

Referencias:

(1) Datos proporcionados por el Ing. Quim. Marcel Sabag, Gerencia de Refinación, Administración Nacional de Combustibles, Alcohol y Portland, ANCAP (11/07/2025). msabag@ancap.com.uy

(2) Datos proporcionados por la Ing. Daniela Larrea, Gerencia de Medio Ambiente, Administración Nacional de Combustibles, Alcohol y Portland, ANCAP (11/07/2025). mlarrea@ancap.com.uy

Síntesis de estructuras dinucleares de iones lantánidos y β-dicetonas a través de la dimerización *in-situ* de imidazoles asimétricos

Bruno Sanabria[1]; Federico Mesa[1]; Thomaz Andrade[2]; Rafael A. Cassaro[3]; Raúl Chiozzone[1]; María G. F. Vaz[2]; Juan C. Ramos[4]; Lorena Martínez[1]

1) Área Química Inorgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

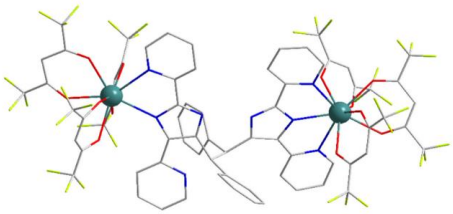
2) Laboratorio de Magnetismo Molecular, Instituto de Química, Universidade Federal Fluminense, Niterói, Brasil.

3) Instituto de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil

4) Instituto Polo Tecnológico de Pando, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Canelones, Uruguay.

bsanabria@fq.edu.uy

Nuestro grupo de investigación se enfoca en la síntesis de complejos dinucleares de iones lantánidos con conectores asimétricos y β-dicetonatos como coligandos. En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización magnética de compuestos dinucleares obtenidos a partir de precursores $Ln(hfac)_3(H2O)_x$ (Ln = Dy, Tb, Yb) con ligandos imidazólicos 2,4,5-trisustituidos. En particular, la reacción con (tert-butoxi-(fenil)metil)-dipiridina-imidazol da lugar a la obtención de complejos de tipo $[Ln(hfac)_3(\mu\text{-}L)(hfac)_3Ln]$, donde L = bis(bencil)-dipiridina-imidazol. La formación de este ligando se produce por una reacción de dimerización del precursor imidazólico, que se da únicamente en presencia del ion lantánido.



Estructura de los complejos $[Ln(hfac)_3(\mu\text{-}L)(hfac)_3Ln]$

Estudios de difracción de rayos X en monocristal muestran que los entornos de coordinación de los iones metálicos no son equivalentes. Esto está favorecido por la formación *in situ* del ligando bis-imidazólico, que genera sitios de coordinación diferenciales de tipo (NN) y (NNN). El estudio de las propiedades magnéticas indica que estos complejos no presentan interacciones de canje intramoleculares de magnitud significativa. Las medidas de susceptibilidad AC para el complejo de Tb(III) muestran dos procesos de relajación distintos en la misma molécula.

Estos resultados abren camino para la obtención a futuro de compuestos heterodinucleares y la generación de conocimiento en un área de estudio aún incipiente como es la de los conectores asimétricos.

Aplicaciones analíticas al estudio de pigmentos en sellos emitidos en Uruguay en 1864-1865

Eduardo Boido; Romina Curbelo; Eduardo Dellacassa; Mariela Pistón

Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

eboido@fq.edu.uy

El estudio químico de los pigmentos utilizados en sellos filatélicos clásicos es una investigación desafiante en el ámbito de la química del patrimonio cultural. A nivel nacional, en el año 1862 Uruguay adoptó el sistema monetario decimal lo que provocó una reestructuración de las tarifas postales. En 1864 se emitió una serie de sellos postales conocida como "Escuditos" de cuatro valores (6, 8, 10 y 12 centésimos), asociados respectivamente a los colores rojo, verde, amarillo y azul[1].

La caracterización de los pigmentos puede permitir autenticar ejemplares y detectar falsificaciones mediante la identificación de compuestos no contemporáneos. En este trabajo se presentan los resultados de la caracterización precisa de estos compuestos mediante un abordaje con técnicas analíticas instrumentales no destructivas: espectrometría dispersiva de fluorescencia de rayos X (EDXRF Shimadzu 7200) y espectroscopia IR por transformada de Fourier con reflectancia total atenuada (FTIR-ATR, Shimadzu). En paralelo, se realizó un análisis por LC-MS (Shimadzu, LCMS 8040) para evaluar la presencia de compuestos orgánicos específicos utilizados en la época para tonalidades rojas.

Las tonalidades rojas presentaron principalmente mercurio y azufre indicando el uso del bermellón (HgS). Sin embargo, en los tonos rosa no se detecta mercurio, y en cambio se encuentra aluminio, calcio y estaño. Estos compuestos eran usados como sales para dar la laca de ácido carmínico, el cual fue determinado en el análisis mediante LC-MS (ESI^+). En los tonos verde el análisis EDXRF muestra señales de hierro, cromo y plomo, indicando el uso de azul de Prusia ($Fe_4[Fe(CN)_6]_3$), y el amarillo de cromo ($PbCrO_4$) una mezcla común usada en la época para tonos verdes. El uso de azul de Prusia se confirma mediante FT-IR con la banda típica a 2100 cm^{-1}. La mezcla de pigmentos también se observa en los tonos amarillo/ocre con presencia de amarillo de cromo y cinabrio en distintas proporciones. En las tonalidades azules el análisis EDXRF e IR confirman el de azul de Prusia. Según los tonos se observan distintas intensidades en la señal de Pb y Ba indicando el uso de sulfato de bario o blanco de plomo. Se concluye que el análisis mostró variaciones cromáticas significativas dentro de cada denominación, esto podría atribuirse tanto a factores técnicos del proceso de impresión como a posibles diferencias en la formulación según quienes los han fabricado.

1. Boido, E., Hällström, J. Uruguay - "Escuditos" Issues 1864-1866. The Eduardo Boido Collection. Edition d´Or, vol. 77. Global Philatelic Network, Germany, 2025

Nanomateriales emisores de luz basados en *quantum dots* de ZnS decorados con iones lantánidos

Carolina Patrón; Julia Torres; Carolina Mendoza

Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

cpatron@fq.edu.uy

Una estrategia efectiva para el diseño de nanomateriales emisores de luz resulta de sensibilizar las propiedades ópticas de los iones lantánidos (Ln) mediante su anclaje a quantum dots (QD), cuya energía de emisión depende del tamaño. En este trabajo se presentan avances de una estrategia aún poco explorada en la que se busca conectar químicamente ambos componentes utilizando ligandos bifuncionales lineales que cuentan con un grupo tiol para anclaje a la superficie del QD y un grupo carboxilato para coordinar a los iones lantánidos. En particular, se prepararon exitosamente QD de ZnS, con diámetro entre 5-6 nm, mediante adaptación de un protocolo reportado[1] al que se incorporó polivinilpirrolidona como agente estabilizante. Se exploraron diferentes ligandos bifuncionales de recubrimiento como *L*-cisteína, ácidos tioglicólico, mercaptosuccínico, mercaptobenzoico y mercaptopropiónico, siendo este último el que mostró mejor rendimiento y reproducibilidad en la síntesis, presentando asimismo un perfil de emisión adecuado (centrado en 425 nm cuando se emplea una longitud de onda de excitación de 293 nm, ver Figura 1). La decoración posterior de los QD con iones Eu^{3+} empleando como coligando con ácido dipicolínico (DPA), resultó en la supresión de la emisión del QD, con la concomitante emisión del Ln, lo que sugiere un posible mecanismo de transferencia de energía no radiante (FRET). La sensibilización mediada por el QD (longitud de onda de excitación de 293 nm) es de alta eficiencia, si bien es similar a la que se logra empleando únicamente el ligando cromóforo. Actualmente se evalúan otros coligandos con potencial para mejorar esta transferencia.

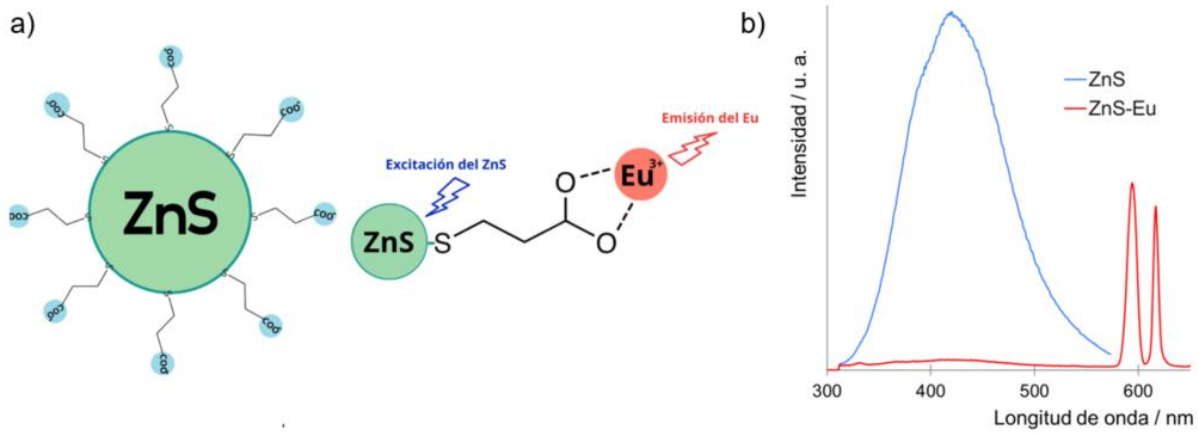


Figura 1- a) Esquema del posible mecanismo FRET mediado por un ligando de recubrimiento bifuncional. b) Perfiles de emisión del QD-ZnS empleando como ligando de recubrimiento ácido mercaptopropiónico (azul) y el mismo sistema luego del agregado de Eu(III) y coligando DPA.

[1] Li, H., Shih, W. Y., & Shih, W. H. (2010). *Industrial & Engineering Chemistry Research*, **49**, 579

Diseño, obtención e implementación de imanes moleculares en dispositivos de espintrónica molecular

Carlos Rojas-Dotti[1], Babu Ram Sanki[2], Marzieh Savadkoohi[2],Erwan Peigney[2], Hayden Brown[2], Pius Suh[2], Nicolás Moliner[3], José Martínez-Lillo[3]; Pawan Tyagi[2]

[1]*Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[2] *Center for Nanotechnology Research and Education, Mechanical Engineering, University of District of Columbia, Washington, USA*

[3] *Departamento de Química Inorgánica, Instituto de Ciencia Molecular (ICMol), Universidad de Valencia, Valencia, España*

carlosrojas@fq.edu.uy

La integración de imanes moleculares (SMMs) en uniones túnel magnéticas (MTJs) ofrece un potencial significativo para el avance de la espintrónica molecular, particularmente en dispositivos de memoria de nueva generación, computación cuántica y tecnologías de almacenamiento de energía como las celdas solares. [1-3] Este trabajo presenta un enfoque integral sobre el diseño e impacto del uso de SMMs en dispositivos de espintrónica molecular, explorando dos aplicaciones complementarias: memoria espintrónica y celdas solares dependientes del espín. Para ello se han diseñado, obtenido y caracterizado imanes moleculares basados en Mn(III) de fórmula general $[Mn_6(\mu_3\text{-}O)_2(H_2N\text{-}sao)_6(L)_2(EtOH)_6]$, donde H_2N-sao es salicilaldoxima y 'L' es un ligando ácido carboxílico de cadena alifática de 3 a 12 carbonos de longitud, funcionalizado con un grupo tioéster terminal.

Los SMM fueron probados para su incorporación en diferentes arquitecturas de MTJ, demostrando en algunos casos versatilidad como canal de transporte de espín y capacidad para inducir ordenamientos magnéticos de largo alcance. Mediante su incorporación en un MTJ formado por electrodos de FeMn (antiferromagnético) y NiFe (ferromagnético), separados por una barrera de AlOx, se observó la formación de canales de espín que permitieron un transporte electrónico mejorado y la alteración de las propiedades magnéticas y electrónicas, destacando la formación de nuevos estados de polarización de espín. Posteriormente, se ha logrado integrar el efecto fotovoltaico espín-dependiente en un MTJ convencional de CoFeB/MgO/CoFeB. Tras la incorporación del SMM, el dispositivo mostró un efecto celda solar bajo luz blanca no polarizada, con una tensión de circuito abierto de ~80 mV y densidad de corriente de saturación de ~10 mA/cm^2. Ambos estudios confirman que el SMM puede inducir estados magnéticos estables y modificables, permitiendo tanto control espintrónico como colección de energía lumínica. Estos resultados posicionan al SMM como un elemento de gran interés para futuras tecnologías que combinen almacenamiento de datos, conversión energética y computación cuántica en una plataforma única a escala molecular.

[1] B. Chowrira, et al., Quantum advantage in a molecular spintronic engine that harvests thermal fluctuation energy, Adv. Mater. 34 (49) (2022) 2206688.
[2] Ferrando-Soria, et al., M. Molecular magnetism, quo vadis? A historical perspective from a coordination chemist viewpoint. Coord. Chem. Rev. 339 (2017) 17–103.
[3] Cornia, A.; Pierre Seneor, P. The molecular way. Nat. Mater. 16 (2017) 505–506.

Síntesis y caracterización de nanotubos de titanato de sodio para degradación de contaminantes

Paula Lostao; Martín Esteves; Luciana Fernández Werner; Ricardo Faccio

Área Física, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

plostao@fq.edu.uy

Las propiedades de los nanotubos de titanatos de sodio (NaNT) producidos a partir de TiO_2 anatasa resultan de interés en la actualidad para la degradación de contaminantes ambientales. En particular, su gran área superficial y su estructura tubular que favorece la mayor direccionalidad en la conducción de carga son características importantes en los procesos de fotodegradación. En estos procesos, los electrones de valencia del semiconductor NaNT son promovidos hacia la banda de conducción, dando lugar a reacciones redox que pueden resultar en la degradación de compuestos de interés.

En este trabajo se presentará la síntesis y caracterización de nanotubos de titanato de sodio, NaNT. La síntesis es realizada por método hidrotermal alcalino a partir del precursor TiO_2 anatasa, y la caracterización incluye microscopía TEM, espectroscopía UV-Vis, difracción de rayos X y espectroscopía de impedancia [1].

Además, se presentará un estudio de adsorción y cinética de fotocatálisis utilizando azul de metileno (MB) como contaminante modelo. A partir del estudio de adsorción en oscuridad de MB se obtuvo una cinética de pseudo-segundo orden y un ajuste al modelo de Langmuir con una capacidad de adsorción máxima en el entorno de 220 mg MB/g NaNT. Para el estudio de la cinética de fotocatálisis del colorante se utilizó luz proveniente de un simulador solar AM 1.5, y se realizó la comparación de los resultados con los obtenidos al irradiar con una fuente UV.

[1] Esteves, M., Fernandez-Werner, L., Pignanelli, F., Romero, M., Chialanza, M. R., Faccio, R., & Mombru, A. W. (2020). A step forward towards the structural characterization of $Na_2Ti_2O_2{\bullet}H_2O$ nanotubes and their correlation with optical and electric transport properties. Ceramics International, 46(3), 2877-2886.

Passiflora caerulea como fuente de pigmentos para DSSC

Rocío Serra; Mauricio Avila; María Fernanda Cerdá

Laboratorio de Biomateriales, IQB, Facultad de Ciencias, UDELAR, Montevideo, Uruguay

rserra@fcien.edu.uy

La energía solar representa una alternativa a las fuentes convencionales de energía altamente atractiva, debido a que dicho recurso natural es renovable y potencialmente inagotable. Es una solución para sustituir la energía fósil y reducir la contaminación que la misma genera. Entre las tecnologías fotovoltaicas disponibles, las celdas solares sensibilizadas por pigmentos (DSSC), o también conocidas como celdas de Grätzel, representan una alternativa de gran interés.[1] Se destacan por su bajo costo y la posibilidad de ser fabricadas de manera sencilla con recursos locales. Gracias a su característica de ser translúcidas, pueden integrarse en diversas infraestructuras (BIPV), lo que permite combinar eficiencia energética con un uso óptimo de los espacios [2].

Con el fin de ser empleados como sensibilizadores en celdas DSSC, flores y frutos de mburucuyá (*Passiflora caerulea*) fueron usados como fuentes de pigmentos. Para ello, se realizaron extractos en EtOH de los filamentos que conforman la corona de la flor, obteniéndose un pigmento de color violeta. También se realizó un segundo extracto con hexano a partir de la cáscara del fruto, obteniéndose un pigmento de color amarillo.
El proceso de purificación fue seguido por medidas en el UV-visible, mostrando la presencia mayoritaria de antocianinas en los extractos provenientes de las flores, y de carotenoides en los obtenidos de los frutos. Los extractos purificados de pigmentos fueron además caracterizados por medidas de fluorescencia. El comportamiento redox de los extractos fue registrado por medidas de voltamperometría cíclica, por medidas a diferentes velocidades de barridos de potencial, usando electrodos serigrafiados de oro.
A partir de las medidas espectroscópicas y de potenciales redox, es posible pronosticar una aplicación satisfactoria de los pigmentos obtenidos como sensibilizantes en celdas del tipo DSSC. Sus características espectrales y redox muestran la posibilidad termodinámica de inyección de electrones desde los pigmentos hacia el semiconductor en que están depositados, además de la posibilidad de regeneración de los mismos dentro de la celda.

Referencias:
(1) O'Regan, B., & Grätzel, M. (1991). A low-cost, high efficiency solar cell based on dye-sensitized colloidal TiO_2 films. *Nature*, *353*(6346), 737–740

(2) Hosenuzzaman, M., Rahim, N. A., & Selvaraj, J. (2015). Global prospects, progress, policies, and environmental impact of solar photovoltaic power generation. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, *41*, 284–297

Modificaciones texturales y térmicas en un catalizador $NiMo/Al_2O_3$ usado en hidrotratamiento de aceites residuales

Agustín Rubbo[1]; Elisa Volonterio[1]; Iván Jachmanián[1]; Alejandro Amaya[2]

[1]Área Grasas y Aceites, Departamento de Ciencia y Tecnología de los Alimentos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

[2]Laboratorio de Fisicoquímica de Superficies, Departamento de Teoría y Experimentación de la Materia y sus Aplicaciones, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

arubbo@fq.edu.uy

El hidrotratamiento catalítico de grasas y aceites residuales es una estrategia prometedora para la producción de biocombustibles. Mediante este proceso, los materiales grasos son convertidos a hidrocarburos (HC) utilizando altas temperaturas y presiones de hidrógeno, en presencia de un catalizador adecuado.

En este trabajo se evaluó el comportamiento de un catalizador bimetálico de níquel y molibdeno soportado en alúmina ($NiMo/Al_2O_3$) al ser sometido a tres ciclos de hidrotratamiento consecutivos utilizando diferentes aceites de origen residual como materia prima.

Previo a su uso, el catalizador fue reducido en un reactor tubular continuo de lecho fijo a 400 °C bajo un flujo de H_2 (36 bar, 50 mL/min). Se fijaron las condiciones operativas de las corridas en 350 °C, 80 bar, con flujo de H_2 de 50 mL/min y un flujo de aceite de 0,05 mL/min durante 3 horas. Se recolectaron muestras de producto y catalizador luego de cada corrida.

El análisis termogravimétrico (TGA) del catalizador en atmósfera oxidante reveló picos a temperaturas por debajo de los 250°C (temperatura de autoignición para los combustibles más reactivos). Estos se adjudicaron a compuestos que se volatilizan y picos a temperaturas superiores, probablemente asociados a procesos de descomposición térmica o desorción de especies adsorbidas fuertemente. Estos últimos, junto a otros compuestos en baja proporción que desvolatilizan a mayores temperaturas, son compatibles con fenómenos de desactivación y podrían estar vinculados a la disminución de la conversión a HC del producto observada en las corridas sucesivas.

Asimismo, se observaron diferencias importantes en las características texturales de los catalizadores antes y después del uso que reflejan modificación de la superficie debida al uso en el proceso.

Adsorción de colorante con lignina y lignina funcionalizada

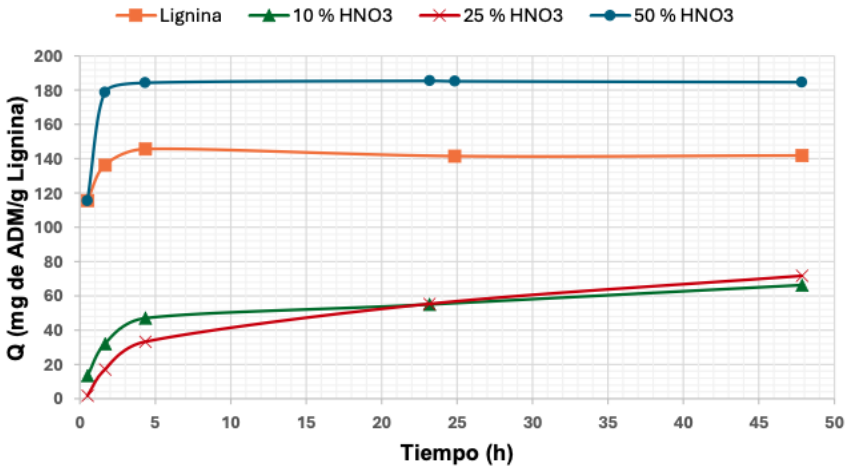
Carmina Reyes Plascencia; Kiby Mora

Laboratorio de Energías Renovables, IPTP, Facultad de Química, Udelar, Pando, Uruguay

carmina@fq.edu.uy

La adsorción se ha destacado como una de las principales opciones para la remoción de contaminantes en fase acuosa debido a su eficiencia, flexibilidad, facilidad de uso y su relación costo-beneficio [1]. Una opción para la síntesis de estos adsorbentes son los residuos lignocelulósicos, como los residuos de pino, ampliamente disponibles en el país.

La composición lignocelulósica de esta biomasa presenta una oportunidad para su valorización y aplicación dentro del marco de la bioeconomía circular, a través de su transformación en biorrefinerías, dónde los carbohidratos (celulosa y hemicelulosa) son utilizados para la generación de moléculas de interés comercial. Mientras que la lignina puede ser utilizada para la producción de adsorbentes.
Este estudio evaluó la capacidad adsorbente de lignina y lignina funcionalizada, utilizando residuos lignocelulósicos de madera de pino. Se aisló lignina mediante el método organosolv, y se realizaron tratamientos de funcionalización con HNO_3. El adsorbente obtenido se utilizó en la eliminación de colorantes como el azul de metileno en efluentes acuosos.



La funcionalización ácida con HNO_3 incrementó la presencia de grupos oxigenados, mejorando la adsorción. La lignina sin funcionalizar también mostró buena capacidad adsorbente. Los mejores resultados se obtuvieron con lignina funcionalizada al 50 % con HNO_3, que alcanzó una capacidad de adsorción de185 mg/g, un 32% más que la lignina sin tratar.

[1] Üner, O., et al. Adsorption of Methylene Blue by an Efficient Activated Carbon Prepared from Citrullus lanatus Rind: Kinetic, Isotherm, Thermodynamic, and Mechanism Analysis. Water, Air, and Soil Pollution 227, (2016).

Electrorremediación de suelos contaminados con compuestos organoclorados

Carolina De los Santos[1]; Andres Tiban-Anrango[2]; Manuel Rodrigo[2]; Cristina Sáez[2]

[1]Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Universidad De la República, Montevideo, Uruguay.

[2]Laboratorio de Ingeniería Electroquímica, Procesos de Membrana y Biotecnología, Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Ciencias Químicas y Tecnología, Universidad de Castilla La Mancha, La Mancha, España.

Cdlsantos@fq.edu.uy

La contaminación de suelos y cursos de agua es una problemática que afecta actualmente al mundo. Es por esto que desde hace décadas la comunidad científica está abocada en la generación de tecnologías limpias de producción o en procesos de tratamientos de efluentes previo a su contacto con el ambiente. El desafío actual es el desarrollo o implementación de nuevos procesos de remediación que permitan recuperar espacios contaminados para que vuelvan a ser utilizables por las comunidades

La electrorremediación es una tecnología sumamente atractiva para ser aplicada en la remediación de espacios contaminados por sus ventajas de implementación y ejecución. El principio de esta tecnología es la aplicación de un campo eléctrico entre electrodos ubicados en un suelo o lodo, como consecuencia se generan diferentes procesos físicos, electroquímicos y electrocinéticos que permiten movilizar a los contaminantes en el suelo entre dichos electrodos para luego lograr la extracción o la descomposición del contaminante.

En este trabajo se presenta la electrorremediación de un suelo real contaminado con compuestos organoclorados los cuales tienen su origen en el depósito de residuos industriales de la síntesis de Lindano. El proceso de electrorremediación constó de un sistema en el que se colocaron dos pozos electródicos (catódico y anódico) a una distancia de 10 cm. Se empleo agua como fluido de lavado, un electrodo de grafito como ánodo y un electrodo de acero inoxidable como cátodo. El procedimiento constó en la incorporación del fluido en los pozos (mismo volumen para cátodo y ánodo), con la extracción del fluido remanente en los pozos cada 30 min. Este ciclo de incorporación y extracción de fluidos se realizó hasta alcanzar las 24 hs de operación. El potencial aplicado fue de 1 Vcm^{-1} a temperatura ambiente. Durante el experimento se cuantificó la corriente eléctrica de la celda y la temperatura del suelo. Al finalizar el proceso se realizó un estudio del suelo para evaluar el contenido de organoclorados remanentes y su distribución (longitudinal y transversal).

Los resultados obtenidos indican que efectivamente se dieron las reacciones electródicas en principio del fluido indicado por el cambio de pH en las soluciones extraídas. Se observo la movilización de los organoclorados la cual varía según el tipo de molécula determinada por la cantidad de cloros presentes en estas.

El intercambio de cationes multivalentes en nanopartículas de telururo de cobre induce polarización electroquímica y almacenamiento de energía

Claudia Pereyra Huelmo[1]; Ricardo Faccio[2]; Federico Iribarne[1]; Christopher B Murray[3,4]

[1]*Área Matemática, DETEMA, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*
[2]*Área Física, DETEMA, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*
[3]*Department of Chemistry, University of Pennsylvania, Philadelphia, Pennsylvania, United States.*
[4]*Department of Materials Science and Engineering, University of Pennsylvania, Philadelphia, Pennsylvania, United States.*

cpereyra@fq.edu.uy

El almacenamiento eficiente de energía constituye la base de las tecnologías limpias emergentes, abarcando aplicaciones que van desde el almacenamiento en búfer de la red a gran escala hasta sistemas capacitivos a nanoescala. Mecanismos como la formación de doble capa eléctrica y el almacenamiento de energía mediado por polarización están bien documentados, en particular en condensadores ferroeléctricos de película delgada clásicos y supercondensadores eléctricos de doble capa. Sin embargo, el impacto de la polarización de carga resultante del intercambio catiónico multivalente sigue siendo poco explorado. Las nanopartículas de calcogenuro, en particular, representan una plataforma atractiva donde se intersectan los reordenamientos atómicos, la incorporación de iones multivalentes y los gradientes de potencial internos, lo que en conjunto respalda prometedoras aplicaciones para el almacenamiento de energía. Investigaciones previas han mejorado nuestra comprensión de los cambios estructurales durante el intercambio iónico; sin embargo, es necesario dilucidar las consecuencias electroquímicas. Para abordar este punto, utilizamos dinámica molecular atomística (MD) y simulaciones de Monte Carlo (MC) del intercambio catiónico multivalente en nanopartículas de Cu_2-xTe, considerando modelos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT). Este esquema computacional permitió el seguimiento preciso de los efectos de polarización específicos de iones, los gradientes de potencial electrostático y la acumulación de energía, en función del contenido y la distribución de iones. Nuestros hallazgos revelan que las relaciones Cu/Te específicas conducen a una redistribución asimétrica de los iones de cobre y cadmio intercambiados dentro de las nanopartículas de calcogenuro, lo que resulta en la separación espacial de la carga y la generación de un campo eléctrico interno y un momento dipolar. Sorprendentemente, la densidad de energía gravimétrica teórica calculada para estos materiales es similar, o incluso mayor, que la de las baterías de iones de litio convencionales. Estos descubrimientos contribuyen a comprender los mecanismos de acumulación de carga específicos de iones de una manera más completa. Además, constituyen nuevas tácticas de mejora del almacenamiento de energía a través del intercambio catiónico controlado dentro de los marcos de los calcogenuros.

Selección de carbón activado generado a partir de residuos de biomasa para captura de CO_2

Jorge De Vivo; Patrice Portugau; Martin Torres; Alejandro Amaya; Jorge Castiglioni; Carolina De los Santos

Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

Jdevivo@fq.edu.uy

Como producto de la degradación oxidativa de contaminantes orgánicos volátiles (COVs) se obtiene H_2O y CO_2. Este último de gran impacto en el proceso del calentamiento global y el cambio climático que afecta al planeta. Por tanto, es necesario dar solución a los procesos post-combustión mediante la captura de este CO_2 para que el proceso de eliminación de COVs sea amigable con el ambiente. Uno de los procesos más empelados para la captura de CO_2 es la adsorción. Para lograr una buena eficiencia de captura de CO_2 es necesario que el adsorbente presente buenas propiedades texturales y químicas. Un material que cumple con estas características es el carbón activado (CA). Los CA son sólidos de muy elevada área superficial la cual está influenciada por el proceso de activación que se le realiza al carbón.

En el presente trabajo se emplearon dos biomasas para desarrollar dos CA y evaluar cómo es su desempeño en la captura de CO_2. Uno de los CA (CAC) se obtuvo a partir de un residuo agroindustrial (cáscara de arroz) y el otro CA (CAF) se preparó a partir de un residuo de biomasa (fruto del árbol paraíso *(Melia azedarach)*). Ambos residuos fueron lavados, molidos y calcinados y luego se realizó un proceso de activación física empleando CO_2 como agente activante. El proceso de activación de los CAC y CAF consistió en el calentamiento en atmósfera de N_2 empleando un flujo de 100 cm^3/min a una tasa de calentamiento de 15 °C/min hasta 800 °C, posteriormente se cambia el flujo a CO_2 empleando 20 mL/min y se mantiene a 800 °C por 30 min. Por último, se dejó enfriar hasta temperatura ambiente con flujo de N_2. CAC y CAF fueron caracterizados mediante TGA, DRX, MEB y fisisorción de N_2.

Como última etapa del proceso de selección de los CA, se realizaron ensayos de adsorción de CO_2. Estos ensayos involucraron colocar una masa conocida de carbón activado en un recipiente, desgasificar el carbón calentándolo hasta 105 °C a vacío por una hora, refrigerarlo a 0 °C y luego inyectar una cantidad conocida de CO_2. Se determinó la cantidad adsorbida a partir de la diferencia entre la presión de gas inicial y la final, una vez alcanzado el equilibrio de adsorción.



Transiciones de fase topológicas en Xenos del grupo 14

Julián Antonio Villarreal Murúa; Ricardo Faccio

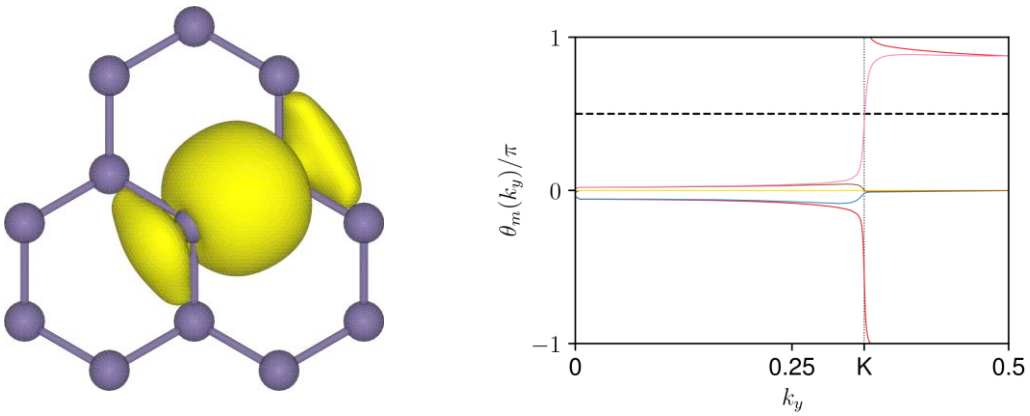
Área Física, DETEMA, Facultad de Química, UDELAR, Montevideo, Uruguay

javillarreal@fq.edu.uy

Un área que actualmente posee gran relevancia tecnológica son los materiales con propiedades topológicas debido a sus potenciales aplicaciones en nanoelectrónica. Particularmente relevantes son los aislantes topológicos, materiales que, a pesar de que presentan un *bandgap* en su estructura de bandas en el *bulk*, en los bordes poseen estados conductores protegidos por simetrías.

En este trabajo se buscó identificar teóricamente las diferentes fases topológicas en siliceno, germaneno y estaneno, a través de la determinación del invariante topológico Z_2, propuesto por Kane y Mele [1] para caracterizar las fases en aquellos sistemas que respetan la simetría de inversión temporal. Además, se pretendió precisar los valores críticos de campo eléctrico perpendicular frente a los cuales cada material sufre una transición de fase, utilizando la metodología propuesta por Yu *et al*. [2].

Los materiales se simularon utilizando el *software* Quantum Espresso y, posteriormente, se obtuvo una representación de *tight-binding* de los sistemas mediante funciones de Wannier altamente localizadas. Finalmente, se realizó un seguimiento de la evolución de los centros de las funciones de Wannier al hacer variar un parámetro que respetaba la simetría de inversión temporal del sistema, lo cual permitió calcular el invariante Z_2. Esto se repitió para diferentes valores de campo eléctrico, permitiendo identificar con precisión dos fases aislantes topológicamente disímiles para cada uno de los materiales estudiados.



Figuras: Función de Wannier altamente localizada y evolución de los centros para E_z = 0.8 V/Å.

[1] C. L. Kane & E. J. Mele. (2005). PRL 95 146802. DOI: 10.1103/PhysRevLett.95.146802.

[2] R. Yu *et al.* (2011). PRB 84 075119. DOI: 10.1103/PhysRevB.84.075119.

Modelado mediante DFT de la interacción de iones multivalentes con MXenes $Ti_3C_2T_X$: estabilidad, adsorción y difusión

Luciana Fernández Werner; Martín Esteves; Fernando Pignanelli; Benjamín Montenegro; Ricardo Faccio

Área Física/DETEMA, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

lucianaf@fq.edu.uy

Los MXenes son sistemas bidimensionales (2D) emergentes, compuestos por carburos, nitruros y carbonitruros de metales de transición, que exhiben propiedades estructurales, eléctricas y electroquímicas interesantes [1]. Estos materiales ofrecen una estabilidad químico-estructural excepcional, alta conductividad eléctrica, una amplia área superficial activa y un notable potencial de funcionalización superficial. Entre los diversos MXenes, $Ti_3C_2T_x$ es uno de los más estudiados (donde T_x representa los grupos terminales superficiales: -O, -OH, -F, -Cl, -Br, -I). Sobre esta base, el objetivo del presente trabajo es estudiar estos MXenes como potenciales electrodos para baterías de iones metálicos multivalentes (MMIBs), explicando la influencia del grupo terminal superficial en el mecanismo de difusión de cationes multivalentes Mg^{2+}, Al^{3+}, Ca^{2+} y Zn^{2+}, en el voltaje teórico de operación esperado y en las propiedades electrónicas.

Las simulaciones computacionales se llevaron a cabo utilizando métodos ab initio basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), implementados en el código VASP. Se construyeron modelos bidimensionales (slab) de $Ti_3C_2T_x$ con diferentes terminaciones superficiales. Para mejorar la descripción de las propiedades electrónicas, particularmente de los estados Ti-d, se aplicó el método DFT+U [2], optimizando los valores de U_eff = U – J.

El mecanismo de inserción y extracción iónica se estudió tanto a nivel superficial como en la intercalación estructural en el volumen. Se reportarán las energías de formación y los voltajes de equilibrio asociados a estos procesos (utilizando como referencia un electrodo metálico, según el caso). Los aspectos cinéticos se examinaron determinando las barreras de activación para la movilidad iónica (tanto superficial como volumétrica) mediante el método NEB (nudged elastic band) [3].

[1] M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser, J. Lu, J. Niu, M. Heon, L. Hultman, Y. Gogotsi, M.W. Barsoum, Advanced Materials23, 4248-4253 (2011).

[2] M. Cococcioni, S. de Gironcoli, Physical Review B, 71 (2005) 035105.

[3] G. Henkelman, B.P. Uberuaga, H. Jónsson, The Journal of Chemical Physics, 113 (2000) 9901-9904.

Evaluación de métodos DFT para la optimización de geometría y termoquímica en SVECV-f12: hacia una alternativa eficiente y precisa

Marc Segovia[1]; Alejandro Cardona[1,2]; Oscar N. Ventura[1]

[1]CCBG, DETEMA, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay

[2]UMR 8522, PhysicoChimie des Processus de Combustion et de l'Atmosphère − PC2A, Univ. Lille, Lille, Francia

marc@fq.edu.uy

Los métodos compuestos son herramientas computacionales que combinan diferentes niveles de teoría para alcanzar alta precisión en cálculos termoquímicos. SVECV-f12[1], desarrollado por nuestro grupo, es un método compuesto post-CCSD(T) que ha demostrado excelente desempeño en la predicción de barreras de reacción y energías de formación. Sin embargo, su alto costo computacional limita su aplicabilidad a sistemas más grandes.

Una etapa crítica en estos métodos es la optimización de geometría y la obtención de correcciones termoquímicas, que generalmente se realizan mediante teoría del funcional de la densidad (DFT). En la versión original de SVECV-f12, se emplea el funcional híbrido M06-2X con corrección de dispersión D3 de Grimme y la base aug-cc-pVTZ[2,3]. Aunque esta elección ofrece un buen compromiso entre precisión y costo, estudios preliminares indican que la relación entre el nivel de teoría y la energía electrónica no es lineal, lo que abre la posibilidad de mejorar esta etapa.

El objetivo de este trabajo es evaluar alternativas al DFT utilizado en la optimización de geometría y termoquímica dentro del esquema SVECV-f12, con el fin de reducir el costo computacional sin comprometer la precisión. Para ello, se han probado siete funcionales híbridos: M06-2X, MN15, B3LYP, CAM-B3LYP, PW6B95, ωB97X-D y ωB97M-D, en combinación con funciones de base de correlación consistente con exponente no mayor a triple-Zeta (ζ) usando las bases de datos HTBH38/08, NHTBH38/08 y DBH24/08 de Truhlar, que comprenden 68 barreras de reacción directa e inversa correspondientes a 38 reacciones diferentes. Los resultados se compararon en términos de precisión energética y tiempo de cálculo con los del método original. Esta evaluación busca establecer métricas que permitan seleccionar el mejor DFT para estas etapas clave, manteniendo la precisión global del método compuesto. La implementación de una alternativa más eficiente permitirá extender el uso de SVECV-f12 a moléculas de tamaño mediano, facilitando estudios en química atmosférica y otros campos, con un costo computacional accesible para grupos de investigación en química teórica y computacional.

Referencias

1. Ventura, O. N. *et al.* SVECV-f12: Benchmark of a composite scheme for accurate and cost effective evaluation of reaction barriers. *Int. J. Quantum Chem.* **121**, n/a-n/a (2021).
2. Grimme, S., Antony, J., Ehrlich, S. & Krieg, H. A consistent and accurate *ab initio* parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu. *J. Chem. Phys.* **132**, 154104 (2010).
3. Woon, D. E. & Dunning, T. H. Gaussian basis sets for use in correlated molecular calculations. III. The atoms aluminum through argon. *J. Chem. Phys.* **98**, 1358–1371 (1993).

Investigación in situ de difracción de polvo de rayos X sobre el desarrollo de carbonos templados con zeolita en zeolita FAU [1]

Thibaud Aumond[1]; Martin Esteves[2]; Cristian Mocuta[3]; Isabelle Batonneau-Gener[1]; Julien Haines[4]; Ricardo Faccio[2]; Alexander Sachse[1]

[1]*Institut de Chimie des Milieux et Matériaux de Poitiers (IC2MP) – UMR 7285, CNRS, Université de Poitiers, 4, rue Michel Brunet, Poitiers 86073 Cedex 9, France.*

[2] *Centro NanoMat & Area Física, Departamento de Experimentacíon y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones (DETEMA), Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[3] *Synchrotron SOLEIL, F-91192 Gif-sur-Yvette, France.*

[4] *Institut Charles Gerhardt Montpellier, CNRS, Université de Montpellier, ENSCM, 34293 Cedex 5, Montpellier, France.*

mesteves@fq.edu.uy

Las zeolitas son componentes cruciales en numerosas formulaciones de catalizadores industriales y se emplean predominantemente en procesos de transformación de hidrocarburos. La estabilidad de estos catalizadores se ve significativamente afectada por la formación de productos de reacción secundaria poliaromáticos, comúnmente conocidos como coque, lo que ha llevado a extensos esfuerzos de investigación destinados a desarrollar estrategias efectivas de mitigación del coque. Sin embargo, también hay un dominio en el que es deseable la formación controlada de coque, como en el caso de los carbonos templados con zeolita (ZTC).

A pesar del creciente interés en los materiales ZTC, sigue habiendo una brecha en la comprensión de su formación, probablemente debido a los desafíos en la caracterización de los materiales de carbono después de que se ha eliminado la plantilla de zeolita. Este trabajo presenta un estudio de difracción de polvo de rayos X in situ resuelto en el tiempo real, utilizando radiación sincrotrón. Esto permitió describir la evolución temporal de la estructura de la zeolita FAU durante el desarrollo de un carbono templado con zeolita (ZTC) en sus huecos porosos. Durante la formación de ZTC se observó la disminución de la intensidad de la mayoría de las reflexiones de la zeolita y el aumento simultáneo de la intensidad de la reflexión 222 (de intensidad nula en la zeolita prístina). El ajuste completo del perfil del patrón mediante el refinamiento de Rietveld permitió lograr una descripción detallada de la química subyacente, con llenado de poros coincidente con átomos de carbono en posiciones específicas y distorsión de la estructura. El seguimiento de los perfiles de intensidad de la reflexión 222 permitió evaluar la energía de la formación ZTC. Nuestros resultados contribuyen a una mejor comprensión de los fenómenos involucrados a escala atómica en la síntesis de ZTC.

[1] Aumond, T., Esteves, M., Mocuta, et al. In situ X-Ray Powder Diffraction Investigation on the Development of Zeolite-Templated Carbons in FAU zeolite. Chemistry-Methods, 4(12)

Reposicionamiento de fármacos para la enfermedad de Chagas: tratando de superar la etapa de prototipo-candidato a estudios preclínicos

Claudia Veira[1]; Belén Dávila[1]; Nilda Portillo[2]; Elva Serna[2]; Gloria Yaluff[2]; Guzmán Álvarez[3]; Hugo Cerecetto[1,4]; Elena Aguilera[1]

[1]*Grupo de Química Orgánica Medicinal, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, 11400 Montevideo, Uruguay*

[2]*Departamento de Medicina Tropical, Instituto de Investigaciones en Ciencias de la Salud, Universidad Nacional de Asunción, San Lorenzo, Paraguay*

[3]*Laboratorio de Moléculas Bioactivas, Centro Universitario Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay*

[4]*Área de Radiofarmacia, Centro de Investigaciones Nucleares, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, 11400 Montevideo, Uruguay*

veirac75@gmail.com

En continuidad con nuestro trabajo previo sobre el reposicionamiento de fármacos y el uso de combinaciones binarias, como agentes para el tratamiento de la enfermedad de Chagas, describimos aquí los esfuerzos para superar la etapa de prototipo-candidato a estudios preclínicos de los mejores agentes ensayados *in vitro* y sus mezclas binarias. Se evaluaron en un modelo murino de la enfermedad en fase aguda cinco principios activos reposicionados y cuatro combinaciones binarias de estos agentes, los que fueron seleccionados por su comportamiento isobolográfico *in vitro*.[1] En el estudio, estos nueve sistemas se administraron por vía oral, junto con los controles negativo y positivo (benznidazol), durante 15 días. Se evaluaron los cambios en los niveles de parasitemia y la supervivencia animal con el tiempo, junto con los niveles de anticuerpos anti-*T. cruzi* en los animales al final del tratamiento. La gabapentina fue el fármaco reposicionado más notable; reduciendo significativamente la parasitemia y los anticuerpos anti-*T. cruzi*, a la vez que mejoró adecuadamente la supervivencia animal. Cuando se combinó con naftazona, se consiguió un excelente perfil de supervivencia animal. Por otro lado, la mezcla binaria de naftazona con extracto de trébol rojo, comercializada en Uruguay como Climodin, fue otra combinación destacable. Esta combinación mostró un perfil de reducción de parasitemia muy fuerte, con la mejor reducción de anticuerpos, pero no el mejor perfil de supervivencia animal, lo cual concuerda con nuestros resultados *in vitro* previos.[1] Además, para avanzar en los estudios preclínicos, se analizó la mutagenicidad de ambas combinaciones binarias, con y sin activación metabólica, observando la ausencia de efectos mutagénicos.

Agradecimientos: Programa de Desarrollo de las Ciencias Básicas (PEDECIBA) y a la Agencia Nacional de Investigación e Innovación (FCE_3_2022_1_172684)

Referencias:

[1] Veira, C., Benítez, D., Pérez-Díaz, L., Álvarez, G., Cerecetto, H., Aguilera, E. (2025) Looking for approved-medicines to be repositioned as anti-Trypanosoma cruzi agents. Identification of new chemotypes with good individual- or in combination-biological behaviours. *Mem. Inst. Oswaldo Cruz.* 120, e240183. doi:10.1590/0074-02760240183

Síntesis organocatalítica de iminoazúcares miméticos de L-pentofuranosas con actividad biológica mejorada

Federico Rodriguez; Juan Mesa; Estefanía Dibello; Daniela Gamenara

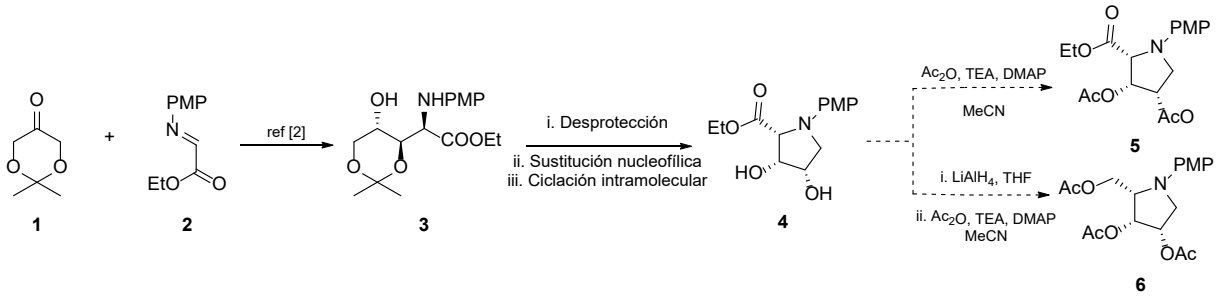
Laboratorio de Síntesis Orgánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

frodriguez@fq.edu.uy

Los glicomiméticos son análogos estructurales de los carbohidratos que presentan una modificación en su estructura. En el caso particular de los iminoazúcares, el oxígeno endocíclico es reemplazado por un átomo de nitrógeno. En la literatura se ha descrito su actividad frente a una amplia variedad de blancos farmacológicos.[1] La estereoquímica de estos compuestos es clave para lograr una respuesta biológica efectiva, por lo que la síntesis estereoselectiva adquiere un rol central. En este contexto, la organocatálisis se ha consolidado en las últimas décadas como una estrategia sintética de gran relevancia. El uso de aminoácidos como catalizadores representa una herramienta fundamental para alcanzar estereoselectividad, ofreciendo además ventajas ambientales y económicas.

En nuestro grupo de trabajo, se desarrolló y optimizó una ruta sintética para la obtención de iminoazúcares miméticos de L-pentofuranosas con configuraciones L-*lixo* y L-*xilo*. Se evaluó la actividad biológica de los compuestos sintetizados frente a *T. brucei brucei*, observándose actividad únicamente en el derivado con configuración L-*lixo* (**4**),[2] Este compuesto demostró tener una buena potencia, pero una baja selectividad.

En este trabajo se propone la síntesis de nuevos derivados reducidos y acetilados de la serie L-*lixo*, con el objetivo de identificar compuestos más potentes y selectivos, contra *T. brucei brucei*. Además, se introdujeron modificaciones en la ruta sintética con el fin de disminuir la formación de subproductos en las etapas finales de síntesis.



Esquema 1. Ruta sintética propuesta

Referencias:

[1] Ruhela, D.; Chatterjee, P.; Vishwakarma, R. A. *Org. Biomol. Chem*. **2005**, *6*, 1043- 048.
[2] Mesa, J. M.; Comini, M. A.; Dibello, E.; Gamenara, D. *Eur. J. Org. Chem.*, **2022**, *34*, e202200636.

Valorización de alperujo mediante extracción ultrasónica de polifenoles y síntesis de hidroxitirosol

Pilar Camaño[1]; Larissa Gioia[2,3]; Paula Rodríguez[3]; Cecilia Dauber[4]; Ignacio Vieitez[4]; Virginia Aldabalde[1]

[1]*Laboratorio de Síntesis Orgánica, DQO, FQ-UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Bioquímica, DEPBIO, FQ-UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[3]*Laboratorio de Biocatálisis y Biotransformaciones, DQO-DEPBIO, FQ-UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[4]*Área tecnológica de alimentos, CYTAL, FQ-UdelaR, Montevideo, Uruguay*

pilarcamano1810@gmail.com

El alperujo, residuo generado durante la producción de aceite de oliva, constituye una fuente rica en compuestos fenólicos con destacadas propiedades antioxidantes, entre los que se incluyen el hidroxitirosol (HT), el tirosol y la oleuropeína, entre otros (Figura 1). En particular, el hidroxitirosol se destaca por su capacidad antioxidante y su potencial aplicación en la industria alimentaria y cosmética.[1] El presente trabajo se enmarca en la síntesis de estos polifenoles, y su extracción a partir de alperujo, mediante la metodología de extracción asistida por ultrasonido.

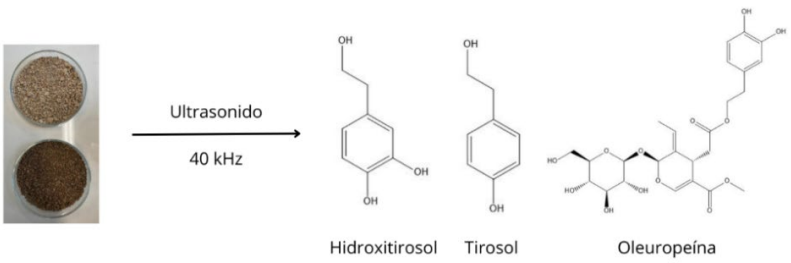


Figura 1: extracción de polifenoles presentes en el alperujo.

Hasta el momento, se optimizó la síntesis de hidroxitirosol a partir de eugenol, mediante dos pasos, obteniendo un rendimiento global de 48 % de producto aislado. Esta síntesis resulta de utilidad para obtener hidroxitirosol de forma pura y contar con un estándar para analizar el contenido de este polifenol en los extractos obtenidos.

Paralelamente, al alperujo suministrado por la empresa Los Tocayos SRL, se le realizaron ensayos preliminares de extracción utilizando mezclas H_2O:EtOH y H_2O:Acetona durante 20 minutos a 20ºC. Estos ensayos fueron realizados sobre alperujo previamente secado, para estudiar los porcentajes de extracción de polifenoles. Hasta el momento se han obtenido mejores porcentajes de extracción con alperujo previamente desgrasado en Soxhlet, utilizando la mezcla H_2O:EtOH, e identificando la presencia del HT mediante TLC. Actualmente, se continúan estudiando diferentes condiciones de extracción y su análisis mediante HPLC.

1. Martins VFR, Ribeiro TB, Lopes AI, Pintado ME, Morais RMSC, Morais AMMB. *Molecules*. 2024; 29.

Homobarrelenonas como andamiajes para la obtención de símiles de productos naturales: Evaluación de su reactividad ante nucleófilos nitrogenados

Gabriel Fernández; Valeria Lucero; Macarena Eugui; Guillermo Moyna

Laboratorio de Química Orgánica, Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay

gabielok20@gmail.com

Desde hace más de dos décadas, nuestro grupo de investigación ha empleado cicloadiciones [4 + 2] entre dienos tropolónicos y diferentes dienófilos como ruta de acceso a homobarrelenonas altamente funcionalizadas. Estos compuestos de estructura compacta pueden ser fácilmente derivatizados por métodos químicos o fotoquímicos en la preparación de símiles de productos naturales (SPNs). La estrategia, un claro ejemplo de síntesis orientada a la diversidad, nos ha permitido obtener bibliotecas de compuestos novedosos con actividad antiparasitaria y antitumoral.[1-3] Con el fin de expandir aún más la diversidad funcional y estructural de estas quimiotecas se evaluó la reactividad de distintas homobarrelenonas ante nucleófilos nitrogenados, utilizando para ello una serie de aminas alifáticas y aromáticas. Nuestros resultados indican que el primer paso de reacción involucra la adición del nucleófilo al sistema cetona α,β-insaturada presente en los sustratos policíclicos. En consonancia con su nucleofilicidad, las aminas aromáticas reaccionan mayoritariamente por adición 1,2, mientras que las alifáticas lo hacen por vía 1,4 (aza-Michael). En el caso de adiciones 1,2, sin embargo, pequeñas diferencias en la estructura de la homobarrelenona de partida tienen un profundo impacto en el producto final de reacción. Para sustratos con restos imida, la adición es seguida por un rearreglo aciloínico que lleva a un producto que corresponde a una sustitución nucleofílica en la posición α al carbonilo original. En presencia de un resto anhídrido, se observa una segunda adición intramolecular que resulta en una ciclación 6-*exo*-*trig* cuyo producto es un oxatriciclo[4.4.0.0^{3,9}]decano nitrogenado. Nuestra exploración del alcance de la metodología llevó a 12 nuevos compuestos, los cuales serán evaluados como antiparasitarios en diferentes bioensayos fenotípicos. Estos hallazgos no solo evidencian la rica reactividad de las homobarrelenonas, sino que destacan su versatilidad como andamiajes para el diseño de nuevas familias de SPNs.

1. Eugui, M.; Lucero, V.; do Carmo, H.; Cabrera, M.; Moyna, G. *Arch. Pharm.* **2023**, *356*, 2200305.

2. Lucero, V.; do Carmo, H.; Fernández, G.; Cabrera, M.; Eugui, M.; Moyna, G. *Eur. J. Org. Chem.* **2024**, *27*(47), e202400887.

3. Khrizman, A.; Slack, R. D.; Remsing, R. C.; Little, S.; Yardley, V.; Moyna, G.; *Arch. Pharm.* **2007**, *340*, 569-576.

Síntesis de Enol Ésteres Cíclicos Precursores de Tiocarbazúcares

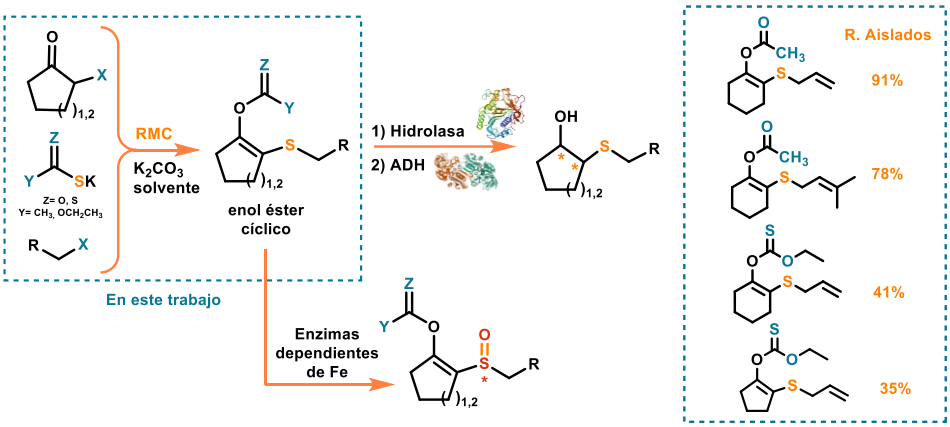
Lucía Victoria Urban; Juan Pablo Colomer; Fabricio Roman Bisogno

Instituto de Investigaciones en Fisicoquímica de Córdoba (INFIQC), Dpto. de Química Orgánica, Facultad de Cs. Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Córdoba, Argentina.

lucia.urban@unc.edu.ar

Los glicomiméticos son análogos estructurales de carbohidratos, diseñados para conferir mayor estabilidad química y enzimática, así como para incrementar la afinidad y selectividad hacia blancos proteicos en comparación con sus contrapartes naturales.[1] Específicamente, los carbazúcares son glicomiméticos donde el oxígeno endocíclico ha sido reemplazado por un grupo metileno. La ausencia de enlace glicosídico confiere una mayor estabilidad frente a la degradación enzimática, lo que ha despertado un creciente interés en el campo de la química medicinal por su potencial como principios activos farmacéuticos.[2] Entre los compuestos bioactivos que incorporan carbazúcares en su estructura se destacan la voglibosa, empleada en el tratamiento de la diabetes, y el oseltamivir con potente actividad antiviral.

En este trabajo se aborda la primera etapa en la síntesis quimioenzimática de tiocarbazúcares, que consiste en la obtención de enol ésteres cíclicos proquirales a través de una reacción multicomponente.[3] Mediante esta estrategia se obtuvieron una serie de enol ésteres cíclicos con rendimientos de buenos a excelentes, que contienen anillos de cinco y seis miembros, permitiéndonos introducir sustituyentes azufrados sin la utilización de tioles y acceder a precursores relevantes de tiocarbazúcares. Posteriormente estos precursores permitirán obtener los compuestos de interés mediante la definición selectiva de los estereocentros que se llevará a cabo con una cascada bienzimática, desencadenada por una hidrolasa[4] y seguida por una alcohol deshidrogenasa. De manera complementaria, se propone la sulfoxidación estereoselectiva mediante enzimas hierro-dependientes.[5]



[1] Med. Res. Rev., 2020, 40(2) 495-531. [2] RSC Adv., 2019, 9, 12928. [3] Org. Biomol. Chem., 2014, 12, 6516. [4] Beilstein J. Org. Chem., 2019, 15, 378–387. [5] Catal. Sci. Technol., 2022,12, 7293.

^{18}F y carboazúcares: explorando nuevas rutas para radiofármacos

Carolina Brindisi[1,2]; Javier Giglio[3]; Margarita Brovetto[1]; Mariella Terán[2]

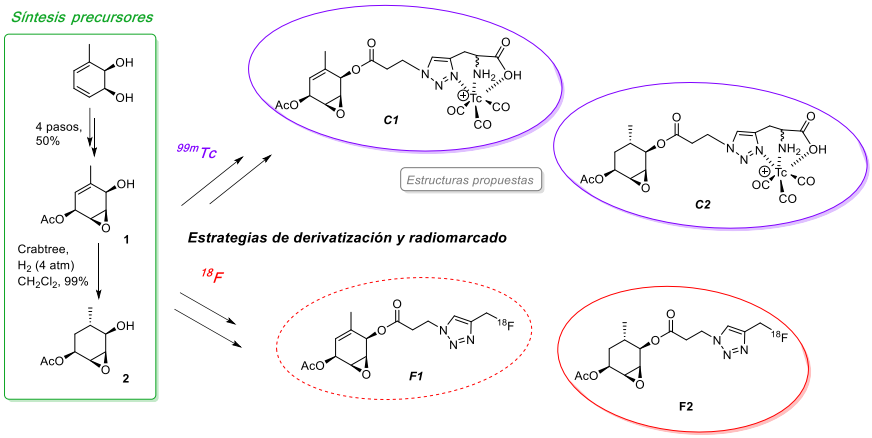
[1]*Área Química Orgánica (DQO), Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay*

[2]*Área Radioquímica (DEC), Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay*

[3] *Centro Uruguayo de Imagenología Molecular (CUDIM), Uruguay*

cbrindisi@fq.edu.uy

Las ampelominas representan un grupo de carboazúcares con una prometedora actividad biológica.(1) Nuestro grupo de investigación se dedica a la síntesis, funcionalización y radiomarcado de estos compuestos para su uso potencial como agentes de diagnóstico en la detección de infecciones ocultas mediante imagenología molecular. El radiomarcado se realiza con ^{99m}Tc y ^{18}F, radionucleidos de amplio uso en esta disciplina. Las ampelominas se sintetizan a partir de un precursor común **1**, obtenido del *cis*-ciclohexadienodiol derivado del tolueno, con un rendimiento global del 50% en 4 pasos.(2) Basándose en la adquisición y caracterización de dos complejos de ^{99m}Tc en etapas previas, este trabajo muestra los avances logrados en la derivatización y radiomarcado de **1** y su derivado hidrogenado **2** con ^{18}F. Aprovechando la estrategia de funcionalización desarrollada para los ligandos de ^{99m}Tc, la cual consiste en la incorporación de un espaciador conteniendo un grupo azida y posterior cicloadición de Huisgen, en este caso con un alcohol propargílico, se sintetizaron los compuestos análogos a **F1** y **F2** con ^{19}F. Partiendo del *cis*-ciclohexadienodiol, en 7 pasos de reacción, con un 10% de rendimiento se obtuvo el análogo de **F1** y en 8 pasos de reacción con un rendimiento de 4% se obtuvo el análogo de **F2**. En la etapa de radiomarcado, se logró obtener el compuesto **F2**, con una pureza radioquímica (PRQ) del 5%. Actualmente se están optimizando las condiciones de marcación, con el fin de mejorar la PRQ, así como estudiando la marcación de **F1**.



(1) Zhang, H.; Xue, J.; Wu, P.; Xu, L.; Xie, H.; Wei, X. *J. Nat. Prod*. **2009**, 72, 265-269.

(2) Brindisi, C.; Vázquez, S.; Suescun, L.; Seoane, G.; Martín, V. S.; Brovetto. *J. Org. Chem*. **2019**, 84, 15997–16002.

Agradecimientos: PEDECIBA, CAP, ANII (POS_NAC_2019_1_157182), FQ, CUDIM, CSIC (2325)

Evaluación de la actividad antiinflamatoria de psicodélicos utilizando una línea celular de colon reportera de NF-kB

María Belén Valdez[1]; Juan Manuel Mesa[2]; Karen Perelmuter[1]; Nicole Gebelin[1]; Grysette Daher[2]; Margarita Brovetto[2]; Gonzalo Carrau[2]; Estefanía Dibello[2]; Ignacio Carrera[2]; Mariela Bollati-Fogolin[1]

[1]Unidad de Biología Celular, Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay

[2]Laboratorio de Síntesis Orgánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

bvaldez@pasteur.edu.uy

En los últimos años, numerosos estudios han reportado el potencial antiinflamatorio de los psicodélicos clásicos, en particular del (*R*)-2,5-dimetoxi-4-iodoanfetamina ((*R*)-DOI) y de la psilocina. Se cree que estos efectos están mediados por la activación del receptor de serotonina (5-HT_{2A}), lo que sugiere un nuevo blanco farmacológico para el tratamiento de enfermedades inflamatorias. Dada la abundante expresión del receptor 5-HT_{2A} en el intestino, esta vía podría ser especialmente relevante para el tratamiento de las enfermedades inflamatorias intestinales (EII).

En este trabajo, se evaluó el potencial antiinflamatorio de una pequeña biblioteca de triptaminas y feniletilaminas, diseñadas racionalmente para explorar la relación estructura-actividad utilizando la línea celular reportera HT-29-NF-κB-hrGFP, derivada de la línea celular de colon HT-29, como modelo *in vitro* de inflamación intestinal [1]. Los parámetros clave evaluados fueron la modulación de la activación de la vía NF-kB y la inhibición de la producción de IL-8 (Figura 1).

Una de las feniletilaminas (2C-B-NBOMe) superó el potencial antiinflamatorio del DOI en este modelo, presentando valores de concentración inhibitoria del 50% (IC_{50}) de 60 µM para la modulación de la activación del NF-κB y 24 µM para la producción de IL-8. Ninguna de las triptaminas evaluadas mostró actividad.

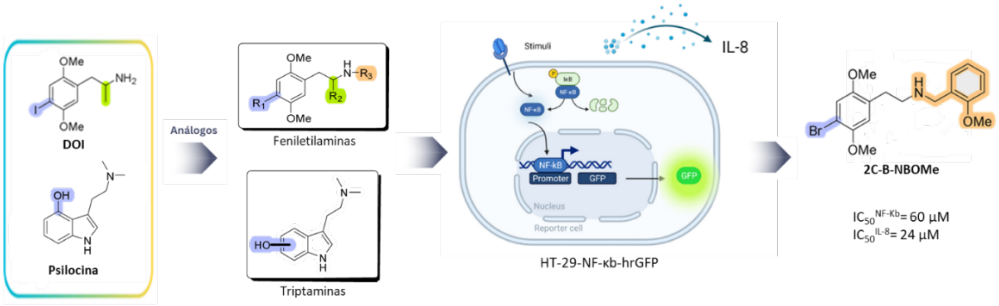


Figura 1. Diseño de análogos de DOI y psilocina para el estudio del potencial antiinflamatorio *in vitro* sobre la línea reportera HT-29-NF-κB-hrGFP.

[1] Mastropietro, G., Tiscornia, I., Perelmuter, K., Astrada, S., Bollati-Fogolín, M., (2015). *Mediators Inflamm.* 1–13

Síntesis, marcación y evaluación biológica de derivados MAG3 para aplicaciones en Medicina Nuclear

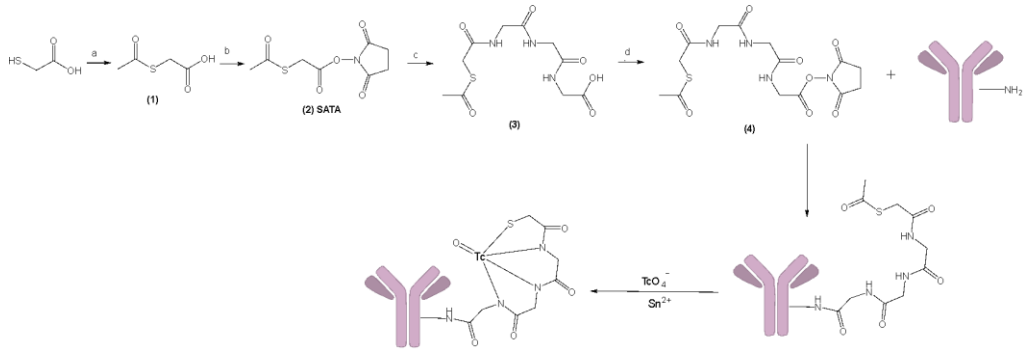
Martina Silvarrey[1]; María Fernanda García[2]; Marcos Couto[1]

[1]*Grupo de Química Orgánica Medicinal, Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

[2]*Área de Radiofarmacia, Centro de Investigaciones Nucleares, Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*

martinasilvarrey@fcien.edu.uy

La síntesis de agentes quelantes es de gran relevancia en la química medicinal. El MAG3 (mercaptoacetil-glicilglicilglicina), es un quelante utilizado para la marcación con el radionucleido tecnecio-99m (^{99m}Tc), especialmente en estudios renales. El NHS-MAG3 (N-hidroxisuccinimida-MAG3) es una forma activada del quelante MAG3, diseñada para facilitar su conjugación a biomoléculas, como péptidos y anticuerpos, que luego pueden ser marcados con ^{99m}Tc para aplicaciones en diagnóstico por imagen. Este trabajo se centra en la síntesis de NHS-MAG3, su conjugación a un anticuerpo monoclonal, marcación y evaluación biológica en una línea celular de cáncer de ovario SKOV-3 (ATCC).



Esquema 1. Síntesis conducente a la formación de NHS-MAG3 (4) y bioconjugación a anticuerpo anti-PDL1 para luego ser marcado con ^{99m}Tc. a) anhídrido acético, b) N-hidroxisuccinimida y DCC, c) triglicina y $NaHCO_3$, d) N-hidroxisuccinimida y DCC.

Se han llevado a cabo la síntesis (Esquema 1) y caracterización estructural del NHS-MAG3 mediante técnicas espectroscópicas (^{1}H-RMN, ^{13}C-RMN). Se estudiaron condiciones de bioconjugación a un anticuerpo monoclonal anti-PDL1 en base a metodologías descritas previamente [1]. Se logró obtener la biomolécula radiomarcada con una pureza radioquímica moderada. La evaluación *in vitro* de unión celular confirma el reconocimiento por su blanco molecular.

Referencias:

[1] Wang, Y., Liu, X., & Hnatowich, D. J. An improved synthesis of NHS-MAG3 for conjugation and radiolabeling of biomolecules with 99mTc at room temperature. Nature Protocols, 2007. 2(4), 972–978.

Impacto del método de secado y conservación de hongos psicodélicos en el contenido de triptaminas a lo largo de un año

Guillermo Morera[1]; Luisina Rodriguez[2]; Gonzalo Hernández [2]; Tobías Nicolás Rojas [3];

Danilo Davyt [2]; Sandra Lupo[1]; Ignacio Carrera [2]

[1]*Instituto de Biología, Sección Micología, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[3]*Department of Biology & Ecology Program, The Pennsylvania State University, USA*

mguillemorera@gmail.com

Los hongos psicodélicos, principalmente del género *Psilocybe,* han sido utilizados desde tiempos ancestrales con fines medicinales, religiosos y espirituales. Sus efectos psicoactivos se deben principalmente a la presencia de psilocibina (PSB) y psilocina (PS). Si bien la mayoría de las investigaciones actuales en fase II, han demostrado la seguridad y eficacia de la aplicación de PSB pura para el tratamiento de la depresión mayor, pocos estudios han incursionado en el efecto del uso de los hongos completos. Para avanzar en este campo, es clave entender cómo es la dinámica de degradación de triptaminas en hongos luego de cosechados y que factores determinan su vida útil. En este trabajo, nos propusimos evaluar el impacto del método de secado (liofilización vs. temperatura ambiente) y de las condiciones de almacenamiento (congelado a -20 °C vs. temperatura ambiente) sobre el contenido de PSB y PS en hongos a lo largo de un año. Para ello, aislamos un cultivo silvestre de *Psilocybe cubensis* y lo cultivamos sobre un sustrato compuesto por vermiculita, estiércol y avena en partes iguales. Las fructificaciones obtenidos se sometieron a distintas combinaciones de secado y almacenamiento. Luego fueron extraídas con metanol y analizados mediante RMN cuantitativo (RMNc) cada tres meses para monitorear los cambios en el contenido de triptaminas (PSB y PS). Los resultados muestran que el método de secado, inicialmente, no afecta el contenido total de triptaminas, pero sí impacta en la relación PSB:PS, siendo notoriamente mayor en el secado a temperatura ambiente (9,6:0,4) que en liofilizado (2,8:6,2). Al cabo de un año, cuando los hongos son secados a temperatura ambiente, pierden 70% de las triptaminas si se conservan a temperatura ambiente y 80% cuando se guardan en el freezer. En este caso la diferencia radica en que, en el freezer la pérdida es muy acelerada y ocurre en el primer trimestre. Por su parte, cuando los hongos son liofilizados, la pérdida de triptaminas es de 28% (Freezer) y 37% (Temperatura ambiente). Es por esto que la mejor combinación de métodos es: secar los hongos por liofilización y conservarlos en freezer.

Obtención de polisacárido a partir de corteza de *Erythrina crista-galli*

Luis Reina[1]; Carolina Fontana[2]

[1]*PDU Procesos Industriales de la Madera, Sede de Tacuarembó, CENUR Noreste, Udelar, Tacuarembó, Uruguay*

[2] *Laboratorio de Química Orgánica, Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, Udelar, Paysandú, Uruguay*

luis.reina@cut.edu.uy

Erythrina crista-galli (Fabaceae) es una especie nativa de Uruguay, Paraguay, Argentina y Brasil. Esta especie ha tenido múltiples usos tanto en relación a su madera como a su corteza y hojas. En el caso de la corteza y las hojas estas se han utilizado en la medicina tradicional, para el tratamiento de heridas, por poseer compuestos con propiedades analgésicas, antimicrobianas y antiinflamatorias. Las características y la actividad farmacológica de los compuestos de bajo peso molecular que la especie posee, se han estudiado en profundidad, existiendo una amplia bibliografía al respecto. Pero hay muy pocos datos relacionados con los polisacáridos que forman la corteza de la especie. Por esta razón el objetivo de este trabajo es la extracción y caracterización primaria de polisacáridos de corteza de *E. crista-galli*. Para esto a partir de la corteza molida, esta se extrajo con acetona, con agua y se trató luego con α-amilasa. Luego se efectuó la extracción del polisacárido con ácido cítrico. Las distintas etapas se pusieron a punto de modo de reducir la presencia de impurezas en las muestras a obtener. El rendimiento primario obtenido de polisacárido fue del entorno del 3 % y este fue analizado mediante TLC, GC-FID y espectroscopía de NMR. Los resultados preliminares obtenidos a partir de las metodologías anteriores permiten considerar que el polisacárido es un ramnano parcialmente *O*-acetilado. Se presentarán en el encuentro más resultados relacionados a la estructura del polisacárido aislado.

Desarrollo de un método para determinar ácidos grasos esenciales en suplementos nutricionales para abejas

Carolina Sosa Labadie[1]; Guillermo Bragunde[1]; Paula Bertoni[1]; Belén Branchiccela[2]; Carmen Rossini[1]

[1]*Laboratorio de Ecología Química, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Sección Apicultura, Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria, Uruguay*

carososa@fq.edu.uy

El ácido linoleico (18:2n-6) y el ácido linolénico (18:3n-3) son los dos ácidos grasos (AG) esenciales para las abejas melíferas, debiendo obtenerlos del polen recolectado. La deficiencia de 18:3n-3 o una relación elevada 18:2n-6/18:3n-3 afecta negativamente, en abejas nodrizas, el desarrollo de las glándulas hipofaríngeas, responsables, junto a las glándulas mandibulares, de la producción de la jalea real utilizada para alimentar a la cría, la reina y otras abejas. El polen es también la principal fuente de proteínas, vitaminas, micronutrientes y otros lípidos para las abejas; cuando su calidad es deficiente, se recomienda el suministro de suplementos nutricionales lipo-proteicos a las colmenas, ya sea a base de polen o formulaciones artificiales.

En este trabajo se desarrolló un método para cuantificar AG en polen y suplementos nutricionales, en el marco de un proyecto orientado a desarrollar un suplemento nutricional nacional de composición conocida, que mejore la fortaleza y el estado sanitario de las colonias de abejas melíferas.

La extracción de los lípidos se realizó siguiendo un método estandarizado[1]. Brevemente, se extrajeron 2 g de suplemento nutricional seco y pulverizado, adicionados con 35 mg de ácido heptadecanoico, durante 5 h con hexano en un dispositivo Soxhlet. Posteriormente, los AG libres y esterificados se derivatizaron con trifluoruro de boro en metanol para su cuantificación mediante curva de calibración con estándar interno en cromatógrafo gaseoso Shimadzu GC-2010 Plus, equipado con una columna MXT-WAX (30 m x 0.25 mm x 0.25 µm; Restek), y un detector de ionización de llama (FID). El programa de temperatura del horno inició en 160 °C (1 min), incrementándose a 1.25 °C/min hasta 200 °C, luego aumentó a 20 °C/min hasta 240 °C y se mantuvo durante 15 minutos; la temperatura del inyector y detector fue de 260 °C. El gas portador empleado fue Hidrógeno, con flujo de 1.12 mL/min. Para cada análisis se inyectó 1 µL en modo *split* (1:20).

Se determinaron el rango lineal, los límites de detección (LOD) y cuantificación (LOQ) del método cromatográfico; quedando disponible una herramienta analítica robusta para evaluar la calidad nutricional de polen y de suplementos nutricionales para abejas en términos de contenido de ácidos grasos esenciales.

1. Campos, M.G., et al., *Standard methods for pollen research.* Journal of Apicultural Research, 2021. **60**(4): p. 1-109.

Dispersión de compuestos microplástico-lípido en un flujo de Poiseuille

Nicasio Barrere; Mauricio Rodríguez

Departamento de Ciencias Físicas, Centro Universitario Regional del Este (CURE), Universidad de la República, Rocha, Uruguay

mrodriguez@cure.edu.uy

En este trabajo estudiamos la dispersión de moléculas compuestas en un flujo laminar tridimensional. Motivados por el reciente hallazgo de microplásticos en el torrente sanguíneo humano, analizamos el comportamiento de moléculas compuestas, formados por microplásticos y recubiertas por coronas lipídicas, inmersas en una fase líquida. Dicho sistema representa un modelo simplificado de agregados formados por interacciones con biomoléculas presentes en la sangre.

Realizamos un estudio numérico basado en dinámica molecular. Para ello, modelamos las interacciones entre microplásticos, lípidos y fase líquida mediante potenciales de Lennard-Jones. Al fluido, le impusimos un perfil de velocidades de Poiseuille, que representa un flujo completamente desarrollado, como aproximación al flujo arterial.

Analizamos los efectos de la intensidad del flujo y de los parámetros de interacción sobre la dinámica de transporte. Evaluamos posibles regímenes donde las moléculas se alinean con el flujo, así como configuraciones en las que se observa dispersión transversal y eventual retención en el dominio. Estos resultados constituyen una primera caracterización del comportamiento de complejos microplástico-lípido en flujos tipo sanguíneo, y ofrecen un marco conceptual para estudios más detallados sobre su transporte y posible acumulación en el organismo [1].

[1] Winiarska, E., Jutel, M., & Zemelka-Wiacek, M. (2024). The potential impact of nano-and microplastics on human health: Understanding human health risks. Environmental Research, 251, 118535.

Síntesis enantioselectiva de benzo-bisheterociclos utilizando monoaminooxidasas de *Aspergillus niger*

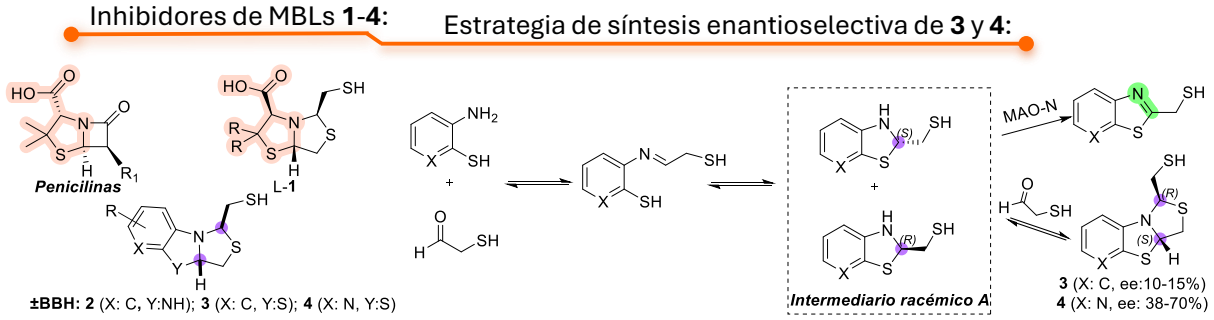
Magdalena Rodríguez[1]; Graciela Mahler[1]; César Iglesias[2]

[1]*Laboratorio de Química Farmacéutica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Microbiología Molecular, Área Microbiología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

mrod@fq.edu.uy

En el diseño racional de inhibidores de metalo-β-lactamasas(MBLs) por analogía estructural con sus sustratos, el grupo ha obtenido bistiazolidinas **1** con potente actividad en diferentes subclases. Nuevos análogos de tipo benzo-bisheterociclos (BBH), (±)-tiazolo-benzoimidazolinas (serie **2**) y (±)-bistiazolobenceno y (±)-bistiazolopiridina (series **3** y **4**), han sido sintetizados con modificaciones estructurales orientadas a favorecer interacciones hidrofóbicas en el sitio activo de las enzimas.[1] Estudios cristalográficos de MBLs y **2** (R:H) mostraron la unión preferencial del enantiómero (*R,R*), lo que motivó el desarrollo de estrategias para su obtención enantioméricamente pura.



En este trabajo se implementó una estrategia biocatalítica para la síntesis enantioselectiva de **3** y **4** basada en el uso de monoaminooxidasas (MAO-N) derivadas de *Aspergillus niger*, variantes D5, D9 y D11, que previamente demostraron capacidad enantioselectiva frente a aminas secundarias de derivados tiazolo-benzoimidazolina **2** al resolver mezclas racémicas.[2] Se evaluó la oxidación selectiva del intermediario racémico **A** bajo diversas condiciones: presencia de co-solventes, distintos tiempos de reacción, adición de agentes reductores y empleo de enzima purificada frente a células enteras.

El enfoque analítico incluyó SPE, RP-HPLC utilizando C18 y NP-HPLC utilizando columna quiral Lux-Celullose, para determinar rendimiento y exceso enantiomérico, y HPLC-MS y RMN para elucidar los productos de biotransformación.

Con las variantes D9 y D11 se obtuvieron excesos enantioméricos moderados para **3** (8-15%) y buenos para **4** (38-70%) aunque con rendimientos globales bajos (<10%). Por ello, se propone explorar la utilización de química en flujo superar problemas de solubilidad de BBH.

1. *Journal of Medicinal Chemistry* **2024** *67* (5), 3795-3812; 2. *ACS Omega* **2023** *8* (45), 42114–42125.

Posters

Sesión 4 (Jueves 23/10 – 16:30-18:00)

S4.P01_BQ Pilar Iturria - *Microorganismos como herramientas biotecnológicas para la detoxificación de metales y la síntesis de nanopartículas*

S4.P02_BQ Ileana Suarez - *Efecto del pretratamiento con ácido láctico en la sensibilidad de Listeria monocytogenes a la radiación UV-C*

S4.P03_BQ Juan Martin Larzabal - *Biorremedación de Efluentes Lácteos mediante Microalgas: Aplicación en Tambo y Quesería*

S4.P04_BQ Mathias Costa - *Especies oxidadas del ácido 3-indol-acético (3IAA) con efecto citotóxico antitumoral en células de mamífero*

S4.P05_BQ Yasmina Sanabria - *Aplicación de FTIR en la determinación de la composición química de Litiasis Renal: experiencias de 12 Años en el Hospital Maciel*

S4.P06_BQ Hugo do Carmo - *Determinación del poder antioxidante de tomates por medio de la capacidad de absorción de oxígeno singulete (SOAC)*

S4.P07_BQ Agustina Majó - *Optimización de un ensayo in vitro para el tamizaje de péptidos sintéticos con potencial actividad antinflamatoria*

S4.P08_BQ Dalila Martínez - *Estudio exploratorio de la actividad del sistema complemento en leche humana utilizando citometría de flujo*

S4.P09_BQ Cinthia Acosta Algalarrondo - *Caracterización molecular del hongo comestible Gymnopilus junonius*

S4.P10_BQ Fabián Mancioni - *Caracterización de β-manooligosacáridos generados enzimáticamente a partir de residuos de madera de pino*

S4.P11_BQ Emiliana Botto - *Caracterización estructural de Gonadotropina Coriónica equina: Comparación entre la hormona nativa y una variante recombinante en hospedero eucariota sencillo*

S4.P12_BQ Estefani Reyes - *Efecto del calcio sobre la generación de infecciones latentes y la colonización de Ralstonia solanacearum en genotipos de papa con resistencia diferencial a la marchitez bacteriana.*

S4.P13_BQ Luciana Ottonello - *Purificación y caracterización bioquímica de la lectina de ceibo blanco*

S4.P14_BQ Nora Fernández - *Inhibidores del veneno de Bothrops diporus aislados de Plantago tomentosa*

S4.P15_BQ Analía Castro - *Preparación y caracterización de inmuno-nanopartículas híbridas lípido/polímero con potencial utilidad para tratamientos oncológicos*

S4.P16_FQ Florencia Tourné - *Kombuchas uruguayas: análisis fisicoquímicos y microbiológicos de bebidas comerciales y su alineación con estándares internacionales*

S4.P17_FQ Agustina Asaravicius - *Recubrimientos con Propóleo, una alternativa natural en la conservación de quesos*

S4.P18_FQ Ernesto Quagliata - *Caracterización Cascarilla de café como ingrediente funcional*

S4.P19_FQ Mariana Pereira - *Reciclaje de plásticos: articulando entre emprendimiento La Fábrica y la Facultad de Química*

S4.P20_FQ Florencia Pólvora - *Explorando la valorización de residuo de yerba mate mediante métodos hidrotérmicos*

S4.P21_FQ Victoria Rodríguez; Enzo Giménez - *Valorización de residuos de cáñamo: producción de carbón activado y su performance como adsorbente de cafeína*

S4.P22_FQ Maytena Pereira - *Procesos de oxidación avanzada como estrategia para la eliminación de pesticidas obsoletos: imidacloprid como caso de estudio*

S4.P23_FQ Kiby Mora - *Influencia de Parámetros Operativos del Proceso Organosolv en la Recuperación de Lignina*

S4.P24_FQ Agustín Rubbo - *Pretratamiento de productos de hidrotratamiento catalítico mediante metilación y SPE para su análisis por GC-MS*

S4.P25_FQ Noela González - *Degustando el cambio: Inestabilidad del flavour de la cerveza artesanal uruguaya*

S4.P26_IA Melina Machado - *Estudios de bioaccesibilidad in vitro de hierro, manganeso y cromo en algas de consumo en la costa este de Uruguay*

S4.P27_IA Camila Horta - *Análisis metabólico de variedades criollas de maiz mediante LC-HRMS*

S4.P28_IA Bruno Silva - *Desarrollo preliminar de herramientas instrumentales y de librería de espectros para estudios metabolómicos en tomates*

S4.P29_IA Alejandro Schaffner - *Desarrollo de una metodología analítica verde para la determinación de nutrientes en frutos de Arazá (Psidium cattleianum) mediante espectrometría de fluorescencia de rayos X dispersiva en energía*

S4.P30_IA Sofía Rezende - *Validación de un bioensayo con Lactuca sativa para evaluar la toxicidad residual de biomezclas en camas biológicas*

S4.P31_IA Sofía Da Rocha - *Evaluación de Elementos Potencialmente Tóxicos en sedimentos de Arroyos Urbanos en Uruguay*

S4.P32_IA Karen Rindzinski - *Análisis de ortofosfato en aguas naturales mediante Flow-Batch-SIA*

S4.P33_IA Juan Gularte - *Optimización y validación de un método para la determinación de arsénico en pescado y camarón de la Laguna de Castillos*

S4.P34_IA Pilar Terra - *Síntesis, caracterización y evaluación biológica de nuevos derivados de paullonas*

S4.P35_IA Juan Barbagelata - *Establecimiento de una biblioteca de espectros NIR de Especialidades Farmacéuticas comercializadas en el mercado uruguayo*

S4.P36_IA Santiago Rostán - *Estudio in silico del mecanismo de acción de selenosemicarbazonas y derivados metálicos inhibidores de Mpro de SARS-CoV-2*

S4.P37_IA Rocío Lima - *Puntos cuánticos de grafeno funcionalizados: síntesis optimizada y evaluación de su rendimiento fotoluminiscente para aplicaciones analíticas*

S4.P38_IA Martina Viera - *Desarrollo de detectores de radiación basados en BiSI/Carbono: Optimización de composición y tratamiento térmico*

S4.P39_IA Maia Mombrú - *Transformación topotáctica de films de Bi_2S_3 por deposición química de vapor*

S4.P40_IA Juan Rodríguez - *Nuevos sensores portables para el monitoreo de fluoruro en agua*

S4.P41_QO Serena Silva Borghi - *Síntesis de derivados de etinilestradiol capaces de coordinar ^{99m}Tc, con aplicación en cáncer de mama RE^+*

S4.P42_QO Vanesa Quintana - *Ciclación de Prins promovida por TiF_4 para la producción de tetrahidropiranos fluorados.*

S4.P43_QO Juan Gabriel Garmendia - *Estudio del desempeño de diferentes excipientes para la obtención de pellets por extrusión-esferonización*

S4.P44_QO Paulina Barrios - *Caracterización de compuestos volátiles de genotipos nacionales de frutilla para el manejo de la arañuela roja (Tetranychus urticae)*

S4.P45_QO Maximiliano Bonti - *Desarrollo de una metodología multirresiduo para la determinación de pesticidas en leche cruda*

S4.P46_QO Veronika Hein - *Análisis botánico de drogas vegetales comercializadas en Uruguay entre 2023 y 2025*

S4.P47_QO Beatriz Munguía - *Evaluación de la actividad antihelmíntica in vitro contra el estadio adulto de Haemonchus contortus, citotoxicidad inespecífica y análisis proteómico de estructuras imidazoheterocíclicas.*

S4.P48_QO Macarena Eugui - *Lactonas sesquiterpénicas como plataformas para el diseño de derivados bioactivos: exploración química y evaluación antiparasitaria*

S4.P49_QO Gabriel Sagrera - *Sintesis de dímeros de dibenzoilmetano como potenciales filtros solares y estudios primarios de fotoestabilidad. Unidades enlazadas por un linker del tipo $-O-(CH_2)_n-O-$ o del tipo $-(CH_2)_n-$*

S4.P50_FQ Mauricio Musso - *Desarrollo y montaje de un sistema para caracterización de sólidos por reducción y desorción térmica programada de CO_2*

S4.P51_IA Gonzalo Scalese - *Efectos de compuestos de oxovanadio con derivados de 8-hidroxiquinolina sobre Trypanosoma brucei y Leishmania infantum*

S4.P52_QO Federico Rodrigo - *El tratamiento con ácido salicílico modifica el perfil de volátiles del tomate y afecta la respuesta de Tuta absoluta.*

S4.P53_FQ Nathalia Aceval - *Más allá del dulzor: la Stevia como fuente de inhibidores naturales para combatir la obesidad*

Microorganismos como herramientas biotecnológicas para la detoxificación de metales y la síntesis de nanopartículas

Pilar Iturria; Diego M. Roldán; Silvana Alborés

Laboratorio de Biotecnología, Área de Microbiología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

pili.iturria@gmail.com

Hongos y bacterias han desarrollado mecanismos de tolerancia a metales pesados, teniendo un potencial impacto para su uso en biorremediación. Uno de estos mecanismos de detoxificación es la biosíntesis de nanopartículas metálicas, mediante la cual los microorganismos transforman iones metálicos tóxicos en formas menos solubles y reactivas. Esta capacidad no solo contribuye a su supervivencia, sino que también tiene aplicaciones biotecnológicas relevantes: las nanopartículas producidas pueden emplearse en catálisis, biomedicina y procesos de biorremediación, gracias a su alta reactividad superficial y capacidad de adsorber metales.

En el presente trabajo se seleccionaron tres cepas previamente aisladas en Uruguay, seleccionadas en base a sus antecedentes de potencial aplicación en biorremediación: *Pseudomonas putida* ML2, *Phanerochaete chrysosporium* 12G y *Punctularia atropurpurascens* H2126. Se estudió la tolerancia a metales pesados ($AgNO_3$, $CdCl_2$, $CoCl_2$, $CuSO_4$, $NiCl_2$ y $ZnSO_4$) de los microorganismos mencionados mediante ensayos estandarizados de microdilución, determinando la concentración inhibitoria mínima (MIC) y concentración bactericida o fungicida mínima. Los resultados obtenidos mostraron que los tres microorganismos evaluados presentaron distintos grados de tolerancia frente a los metales analizados, mostrando *Pseudomonas putida* la mayor tolerancia con valores de MIC más altos. Además, se evaluó la síntesis biológica de nanopartículas de plata en contacto directo con la biomasa del hongo *Phanerochaete chrysosporium.* Para ello la reacción se llevó a cabo incubando la biomasa fúngica en una solución de $AgNO_3$. La síntesis extracelular (en sobrenadante) e intracelular (luego de lisar la biomasa) se monitoreó mediante espectroscopía UV-visible, evidenciando la banda correspondiente a la resonancia de plasmón superficial de las nanopartículas de plata (400-450 nm). Estos resultados son muy promisorios para continuar evaluando las cepas en su capacidad de bioadsorción de metales, así como de síntesis de nanopartículas metálicas y su caracterización.

Agradecimientos: PREXI-PEDECIBA, UDELAR

Efecto del pretratamiento con ácido láctico en la sensibilidad de *Listeria monocytogenes* a la radiación UV-C

Ileana Suarez; Giannina Brugnini; Caterina Rufo

Laboratorio de Alimentos y Nutrición, Instituto Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, UdelaR, Canelones, Uruguay

isuarez@fcien.edu.uy

Listeria monocytogenes es el agente causal de la listeriosis, una enfermedad transmitida por alimentos que presenta una alta tasa de mortalidad (~30 %).[1] Para reducir su presencia en la industria frigorífica, se emplea ácido láctico (AL) en concentraciones entre 1 y 5 % y la irradiación con luz ultravioleta de onda corta (UV-C). Ambas estrategias son consideradas seguras para el consumidor. Si bien han demostrado ser eficaces para reducir *L. monocytogenes* en alimentos, puede verse limitada, ya que depende de factores como la dosis, el modo de aplicación, la matriz alimentaria y la sensibilidad de cada cepa.[2] Además, se reporta que las intervenciones subletales sobre *L. monocytogenes* pueden inducir cambios tanto en la resistencia a otro estrés como en el potencial de virulencia.[3,4]

En este trabajo se evaluó, mediante ensayos en placa, si el pretratamiento con concentraciones subletales de AL modifica la sensibilidad de *L. monocytogenes* a la radiación UV-C. Se utilizaron seis cepas aisladas de carne porcina (L200 y L201), bovina (L100A1, L101B2) y aviar (P20 y P24). Como etapa preliminar, se definieron las condiciones experimentales. Por un lado, se estableció la concentración mínima inhibitoria (MIC) de AL mediante ensayos en microplaca, con el objetivo de identificar una concentración subletal adecuada para el pretratamiento. Las MICs obtenidas variaron entre 0,2 % y 0,3 % (pH 5,1–4,7), seleccionándose una concentración subletal de 0,02 % (pH 5,5) a un tiempo de contacto de 1 hora. Luego, se determinó la dosis de UV-C necesaria para lograr una reducción de 4 log en la población inicial, utilizando 15 mL de caldo tripticasa de soya suplementado con extracto de levadura, distribuidos en placas de Petri de 90 mm en agitación. Las cepas L200 y L201 requirieron 400 mJ/cm², mientras que las restantes alcanzaron la reducción esperada con 350 mJ/cm². Con estas condiciones, se evaluó el efecto del pretratamiento con AL sobre la sensibilidad a la radiación UV-C. Las diferencias entre cepas y tratamientos fueron analizadas mediante la prueba de diferencia mínima significativa (LSD) de Fisher. El pretratamiento con AL 0,02 % provocó un aumento leve en la sensibilidad a UV-C respecto al control no tratado, aunque la significancia del efecto varió entre cepas. Finalmente, se observaron modificaciones morfológicas posteriores a los tratamientos, como heterogeneidad en el tamaño de colonias y la aparición de bordes irregulares tras la exposición a AL o UV-C. Estos cambios podrían estar relacionados con alteraciones en la superficie celular inducidas por el estrés, y constituyen un hallazgo de interés que será abordado en estudios posteriores.

1. Rees CED, Doyle L, Taylor CM. ch. 12. Foodborne Diseases (Third Edition); 2017. p. 253-76.
2. Brugnini G, Rodríguez S, Rodríguez J, Rufo C. Foods. 2021;10(6):1217.
3. Gayán E, *et al*. Food Microbiol. 2015;46:246-53.
4. Werbrouck H, *et al.* Int J Food Microbiol. 2009;134(1-2):140-6.

Biorremedación de Efluentes Lácteos mediante Microalgas: Aplicación en Tambo y Quesería

Juan Martin Larzabal; Belén Mackinnon; Richard Rodríguez; Luis G. Ramirez M.

Laboratorio de Bioprocesos Microalgal, ingeniería en Agua y Desarrollo Sostenible, Universidad Tecnológica del Uruguay, Durazno, Uruguay

juan.larzabal@estudiantes.utec.edu.uy

La creciente preocupación por la contaminación ambiental ha impulsado la búsqueda de alternativas sostenibles y eficientes para el tratamiento de aguas residuales. *Spirulina platensis* emerge como un microorganismo prometedor debido a su capacidad ficorremediadora, que le permite eliminar o biotransformar contaminantes químicos presentes en diversos efluentes, los cuales utilizan para procesos metabólicos y generación de biomasa. El objetivo fue analizar el desempeño de *Spirulina platensis* en la biorremediación, utilizando dos tipos de efluentes de la agroindustria láctea (efluentes de pileta de recolección de un tambo y suero de leche) como fuentes de carbono orgánico. Los experimentos se realizaron en un biorreactor de columna de 2 L, concentración inicial de 200 mg/L, temperatura de 24 °C, aireación continua (2500 lux) e iluminación constante a 2,25 L/min para el efluente tambo y biorreactores de columna de 1,5 L con una concentración inicial de 100 mg/L, aireación continua a 2,25 L/min y ausencia de iluminación para el efluente de quesería. Las muestras se recogieron en intervalos regulares de 24 horas y se caracterizaron para la productividad celular, la demanda química de oxígeno (DQO), el nitrógeno total (NT) y el fósforo total (PO_4^{-3}), siguiendo los métodos estándar para el examen de agua y aguas residuales (APHA, 2005). Se confirmó el potencial de *S. platensis* para la eliminación de nutrientes y el tratamiento de efluentes. En particular, se encontraron altos porcentajes de eliminación promedio de DQO (67% y 77,89%), NT (99% y 21,14%) y PO_4^{-3} (88% y 21,58%) para efluentes del tambo y suero, respectivamente. Además, la productividad celular de *S. platensis* fue de 1,9 mg/L.h en un tiempo de generación de 210 h para el efluente de tambo y de 43,41 mg/L.h en 13 h para el efluente de suero. Los resultados indican la eficiencia de *S. platensis* en la reducción de DQO, NT y PO_4^{-3}, en cultivos heterotróficos para los efluentes evaluados, además de demostrar su alto rendimiento y productividad celular para ambos cultivos permitiendo la obtención de procesos más sostenibles con el medio ambiente. Además, se generaron compuestos de valor agregado (como biofertilizantes o pigmentos) a partir de la biomasa generada, favoreciendo así procesos enmarcados dentro de la economía circular. Este trabajo ofrece información relevante para avanzar en el cultivo de microalgas en aguas residuales, impulsando la eliminación de contaminantes con impacto químico-ambiental y la reducción de la huella ambiental de la agroindustria, en línea con los principios de la química verde y la economía circular.

Especies oxidadas del ácido 3-indol-acético (3IAA) con efecto citotóxico antitumoral en células de mamífero

Mathias Costa[1,2]; Ana Paula Mulet[1]; Valeria Grazú[3]; Lorena Betancor[1]

[1]Tecnología de Proteínas, Departamento de Biotecnología, Facultad de Ingeniería, Universidad ORT, Montevideo, Uruguay

[2]Posgrado en Química, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

[3]Bionanosurf, Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón, Zaragoza, España

mathias.costa12@gmail.com

La inmovilización de enzimas en plataformas nanométricas constituye una estrategia promisoria para el desarrollo de terapias enzimáticas dirigidas (*DEPT*) en las que se activan profármacos biológicamente activos en moléculas citotóxicas vía catálisis enzimática. En este trabajo se realizó la mejora de un nanohíbrido basado en nanopartículas magnéticas (MNPs) recubiertas con una matriz de sílica mesoporosa mediante condensación de TMOS en presencia de polietilenimina (PEI), conteniendo peroxidasa de rábano (HRP) como biocatalizador encapsulado. Se establecieron puntos críticos de control para la síntesis, incluyendo la cuantificación de aminas libres en PEI, determinación de grupos aldehído tras la oxidación de HRP, electroforesis en gel de poliacrilamida para evaluar la integridad enzimática, y cuantificación de hierro, tamaño y potencial superficial de MNPs para garantizar condiciones reproducibles. El sistema inmovilizado se caracterizó exhaustivamente mediante determinación de hierro total (~75%), DLS (258 nm), potencial zeta (+18 mV), SEM y TEM, así como porcentajes de inmovilización (~80%) y actividad expresada (~25%). Se investigó la oxidación del profármaco ácido 3-indolacético (3IAA) por la HRP inmovilizada. Mediante HPLC en fase reversa (C18), se confirmó la conversión completa de 10 mM de 3IAA en menos de 30 minutos a 37 °C, sin requerir activación externa. Esto añade a los estudios previos donde la activación se lograba mediante hipertermia magnética, destacando la versatilidad catalítica del sistema bajo condiciones fisiológicas. En ensayos celulares, la exposición de líneas tumorales humanas de diferente origen (MIA PaCa-2, MCF-7 y HT-29) a 10 mM de 3IAA y 250 µg/mL del nanohíbrido durante 24 horas resultó en una disminución significativa de la viabilidad celular (50-60%), atribuida a especies reactivas generadas durante la oxidación de 3IAA. En ausencia de sustrato, los nanohíbridos no mostraron citotoxicidad, validando la especificidad del efecto. Actualmente, se están ampliando los estudios a líneas adicionales como HepG2, PANC-1 y Caco-2 para evaluar su aplicabilidad transversal. Estos resultados consolidan a los nanohíbridos HRP-MNPs como plataformas eficientes, reproducibles y bioactivas para *DEPT*, combinando control sintético, estabilidad fisicoquímica y conversión enzimática eficiente en entornos biológicos.

1. Armenia, I. et al. Enzyme activation by alternating magnetic field: Importance of the bioconjugation methodology. J. Colloid Interface Sci. 537, 615–628 (2019).
2. Torres-Herrero, B. et al. Remote Activation of Enzyme Nanohybrids for Cancer Prodrug Therapy Controlled by Magnetic Heating. ACS Nano acsnano.3c01599 (2023).
3. Correa, S. et al. Design of stable magnetic hybrid nanoparticles of Si-entrapped HRP. PLOS ONE 14, e0214004 (2019)

Aplicación de FTIR en la determinación de la composición química de Litiasis Renal: experiencias de 12 Años en el Hospital Maciel

Yasmina Sanabria; Ximena Alvite; Estela Bidegain; Elizabeth Lopez; Romina Medeiros

Laboratorio Central - Hospital Maciel, Unidad de Bioquímica Clínica y Hematología, Dpto BIOCLIN, Facultad de Química - UdelaR, Montevideo, Uruguay.

Correo electrónico: ysanabria@fq.edu.uy

La Urolitiasis es una entidad de alta prevalencia y origen multifactorial, resultante de la sobresaturación de solutos en la orina, lo que favorece la nucleación, el crecimiento y la agregación de cristales en el tracto urinario. Debido a su alta recurrencia, el análisis químico de los cálculos es esencial para determinar su etiopatogenia y orientar estrategias terapéuticas y preventivas. En este contexto, la espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) se ha establecido como el método analítico de elección según las Guías de la Asociación europea de Urología [1] por sobre los métodos químicos convencionales y de la difracción de rayos X. En este trabajo se realizó un estudio descriptivo, transversal, observacional y retrospectivo de los resultados obtenidos tras el análisis de composición química de muestras de cálculos urinarios provenientes de pacientes atendidos en el Hospital Maciel en el período comprendido entre 2014 y julio 2025. Para cada muestra se registraron los datos demográficos correspondientes, incluyendo sexo, edad y localización del cálculo utilizando datos secundarios de laboratorio. El análisis de composición química se realizó de la siguiente manera: las muestras fueron lavadas, secadas al aire y pulverizadas hasta su homogeneización. Para el análisis mediante FTIR, se prepararon pastillas de KBr (20 mg de muestra y 200 mg de KBr) comprimidas en prensa hidráulica. Los espectros se registraron en un espectrómetro IRPrestige21 (Shimadzu, Kyoto, Japón) entre 200–4000 cm^{-1}, con 32 escaneos por muestra, y se procesaron con el Software IRsolution v1.4. La identificación composicional se realizó mediante comparación con la biblioteca espectral de Dao y Daudon (1997) [2]. Para el análisis de resultados se utilizó estadística descriptiva asociando datos demográficos y la frecuencia de composiciones químicas, así como se obtuvieron gráficos espectrales característicos. En el período fijado se analizaron 546 cálculos urinarios. Predominó el sexo femenino (58.6%) y la mayoría de los pacientes se concentró en el rango etario de 36 a 55 años (46%). La localización más frecuente fue renal (49%), seguida de ureteral (28%). Mediante espectroscopía FTIR, química se identificaron componentes como Oxalato de Calcio (monohidratado y dihidratado), Estruvita, Carbapatita, Brushita, Ácido úrico y combinaciones complejas entre ellos. Se identificó que el 69.6% de los cálculos eran de composición pura y el 30.4% mixtos. El componente más frecuente en cálculos puros fue el Oxalato de calcio monohidratado (Whewellita, 57.9%), seguido por Carbapatita (17.4%), Oxalato de calcio dihidratado (Weddellita, 10.3%), Ácido úrico y Estruvita (ambos 6.6%). En los cálculos mixtos (n=166), los minerales más comunes fueron Carbapatita (presentada en 139 combinaciones), Whewellita (82) y Weddellita (57). Las combinaciones más frecuentes incluyeron Carbapatita con Whewellita (53 casos), Carbapatita con Estruvita (36 casos) y Carbapatita con Weddellita (31 casos). Adicionalmente, se generó un repositorio interno de espectros característicos. En conclusión, el análisis mediante espectroscopía FTIR permitió identificar con alta precisión los componentes presentes en cálculos renales, diferenciando claramente entre cálculos puros y mixtos. Esta capacidad supera significativamente a las técnicas químicas tradicionales, al posibilitar la detección simultánea de múltiples componentes, incluso en proporciones mínimas. Estos resultados destacan la relevancia de FTIR para un diagnóstico composicional preciso, clave para la prevención y tratamiento individualizado de la urolitiasis.

Referencias:

[1]Skolarikos, A., et al. Urolithiasis. En EAU Guidelines. Edn. presented at the EAU Annual Congress Amsterdam. 2022.

[2]Dao, N. Q., & Daudon, M. (1997). *Infrared and Raman spectra of calculi*. Elsevier

Determinación del poder antioxidante de tomates por medio de la capacidad de absorción de oxígeno singulete (SOAC)

Hugo do Carmo[1]; Guillermo Moyna[1]; Inés Moltini[2]; Joana Lado[2]

[1]*Departamento de Química del Litoral, Cenur Litoral Norte, UDELAR, Paysandú, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Calidad de Frutas y Hortalizas, INIA Salto Grande, Salto, Uruguay*

hugojda@gmail.com

Los carotenoides, y en particular el licopeno, son potentes antioxidantes capaces de neutralizar el oxígeno singulete ($^1O_2$), una especie reactiva del oxígeno altamente dañina para los tejidos biológicos. En este trabajo se evaluó la capacidad antioxidante de extractos de tomate mediante el método SOAC (Singlet Oxygen Absorption Capacity), que mide la capacidad de neutralización de $^1O_2$. Se sintetizó el ácido 3-(1,4-epidioxi-4-metil-1-naftil)propanóico como endoperóxido liberador de $^1O_2$. A partir de metilnaftaleno se realizó una clorometilación, seguida de una adición malónica y posterior descarboxilación para obtener el ácido 3-(4-metilnaftil)propanoico según Fieser et al, 1940[1]. Finalmente, se realizó una cicloadición [4+2] con oxígeno singulete catalizada por molibdato de sodio. [2] Este compuesto se utilizó para generar $^1O_2$ en presencia de los extractos de tomate, evaluando la cinética de oxidación de la sonda 2,5-difenil-3,4-benzofurano (DPBF) mediante espectrometría UV-Vis.[3] Se analizaron extractos de cuatro líneas genéticas de tomate provistas por INIA, tanto *wild type* (WT) como editadas genéticamente, que acumulan más licopeno por interrupción del gen CYC-B, (LT16-WT, LT16-cycbΔ7, Frontera-WT y Frontera-cycbΔ7). Se analizaron diferentes estados de madurez (verde-maduro, pintón y maduro), tanto solo del tejido locular como del fruto completo. Las muestras editadas, presentaron en ciertos casos una mayor capacidad antioxidante. Los resultados indicaron que las líneas modificadas genéticamente presentaron un incremento significativo del valor SOAC en comparación a las líneas *wild type*, únicamente en condiciones específicas. En particular, Frontera-cycbΔ7 mostró un aumento significativo de la capacidad antioxidante en frutos completos maduros, mientras que LT16-cycbΔ7 presentó mayores valores en estado pintón del fruto completo. En líneas generales, los frutos más maduros mostraron mayores capacidades antioxidantes para LT16, en concordancia con la acumulación progresiva de carotenoides. En conclusión, el método SOAC resultó adecuado para detectar diferencias de actividad antioxidante de tomate, usando el ácido 3-(1,4-epidioxi-4-metil-1-naftil)propanoico como liberador de $^1O_2$.

1) Fieser, L. F., & Gates Jr, M. D. (1940). Synthetic experiments utilizing perinaphthanone-7. *Journal of the American Chemical Society*, *62*(9), 2335-2341.

2) Aubry, J. M., Cazin, B., & Duprat, F. (1989). Chemical sources of singlet oxygen. 3. Peroxidation of water-soluble singlet oxygen carriers with the hydrogen peroxide-molybdate system. *The Journal of Organic Chemistry*, *54*(3), 726-728

3) Lado, J., Rodrigo, M. J., Lopez-Climent, M., Gomez-Cadenas, A., & Zacarias, L. (2016). Implication of the antioxidant system in chilling injury tolerance in the red peel of grapefruit. *Postharvest Biology and Technology*, *111*, 214-223.

Optimización de un ensayo *in vitro* para el tamizaje de péptidos sintéticos con potencial actividad antinflamatoria

Agustina Majó; Ana Clara Muniz-Lagos; Claudio Rodríguez-Camejo; Gustavo Mourglia-Ettlin

Área Inmunología, DEPBIO. Facultad de Química, Universidad de la República. Montevideo, Uruguay

agusmajo@gmail.com

Los péptidos sintéticos se consideran agentes antinflamatorios prometedores debido a su alta versatilidad estructural, especificidad y biocompatibilidad, además de la posibilidad de su producción en gran escala de manera automatizada no-biológica y siguiendo normas GMP. Según su diseño, los péptidos sintéticos pueden imitar secuencias bioactivas presentes en proteínas naturales, modulando respuestas inmunes sin inducir efectos secundarios adversos comúnmente asociados a fármacos tradicionales. Además, algunos péptidos pueden interferir con rutas proinflamatorias clave, como la señalización de citoquinas, el reconocimiento de patrones moleculares asociados a patógenos o la activación de células inmunes. Para seleccionar péptidos candidatos prometedores es fundamental contar con ensayos sencillos que permitan realizar un tamizaje eficiente *in vitro* a partir de grandes bancos de péptidos sintéticos. Dichos ensayos deben permitir la evaluación rápida de la actividad biológica buscada, teniendo en cuenta la estabilidad y toxicidad de los péptidos bajo condiciones controladas y reproducibles, reduciendo así costos y tiempo en las etapas tempranas del desarrollo preclínico. Por ello, en el presente trabajo se optimizaron diversos parámetros experimentales para el desarrollo de un ensayo de producción de óxido nítrico (NO, mediador proinflamatorio) mediante el uso de la línea celular derivada de macrófagos murinos RAW264.7 estimulada con lipopolisacáridos bacterianos (LPS, agente proinflamatorio modelo). Así, se evaluaron diversos parámetros (número de células, requerimientos del medio de cultivo, tiempo de incubación y concentración de LPS) para alcanzar la combinación óptima en la producción de NO medida como concentración de NO_2^- (mediante reacción de Griess) en el sobrenadante de cultivo. Luego de optimizar las condiciones del ensayo, se evaluó el potencial antinflamatorio de 16 péptidos sintéticos presentes en un banco disponible en el laboratorio de Inmunología (Facultad de Química, UdelaR), compuesto por 132 péptidos sintéticos diseñados originalmente con diversos objetivos. Los resultados obtenidos mostraron que 8 péptidos presentaron actividad antinflamatoria, 7 no modificaron la respuesta al LPS y 1 péptido mostró actividad dual (pro/antinflamatoria) dependiendo de la concentración ensayada. Además, en todos los casos se determinó la posible citotoxicidad de los péptidos (biocompatibilidad) utilizando la técnica de reducción de resazurina sobre las células luego de la incubación; sin observarse grandes alteraciones de la viabilidad celular. Actualmente se está realizando el tamizaje del total de péptidos sintéticos disponibles en el banco mencionado, utilizando el ensayo aquí optimizado para la búsqueda de candidatos antinflamatorios prometedores con buenos perfiles de biocompatibilidad.

Estudio exploratorio de la actividad del sistema complemento en leche humana utilizando citometría de flujo.

Dalila Martínez[1]; Rodrigo Andrades-Molina[1]; Arturo Puyol[2]; Manuela de María[2]; Gustavo Mourglia-Ettlin[1]; Claudio Rodríguez-Camejo[1]

[1]Área Inmunología, DEPBIO. Facultad de Química, Universidad de la República. Montevideo, Uruguay
[2]Banco de Leche Humana "Ruben Panizza", Centro Hospitalario Pereira Rossell, ASSE. Montevideo, Uruguay

dalilamartinezfq@gmail.com

La leche humana (LH) es el mejor elemento nutricional para el recién nacido, además de ser una fuente de componentes bioactivos clave que aseguran su correcto desarrollo. La composición de la LH es dinámica con el tiempo de lactancia, clasificándola según los días postparto (dpp) en calostro (0-7 dpp), leche de transición (8-14 dpp) y leche madura (>14 dpp). El calostro suele presentar mayor concentración de componentes bioactivos, los cuales disminuyen paulatinamente con el tiempo de lactancia. Por otro lado, cuando un neonato prematuro no accede a la leche de su propia madre, se recomienda el uso de LH donada en Bancos de Leche Humana, donde la misma sufre pasteurización térmica por método de Holder para garantizar su seguridad microbiológica. Sin embargo, esto puede afectar la composición de sus componentes bioactivos, entre los cuales se encuentran componentes del Sistema Complemento (SC). Este es un sistema compuesto por más de 20 proteínas que al activarse participan principalmente en la lisis y opsonización de microorganismos patógenos y/o de células propias alteradas/dañadas. La activación del SC puede ocurrir por tres rutas diferentes, siendo la proteólisis del componente C3 en C3a (soluble) y C3b (depositado en superficie activadora) común a todas ellas. Aunque en LH se han identificado gran parte de los componentes del SC, la funcionalidad del mismo no ha sido completamente dilucidada aún. Por ello, en el presente trabajo se optimizó un protocolo sencillo mediante citometría de flujo (CF) para evaluar la activación del SC presente en LH. La estandarización del protocolo se realizó con suero humano (SH) como fuente de SC y zymosán (suspensión de paredes de *Saccharomyces cerevisiae*) como superficie activadora. Luego de la incubación del SH con zymosán, en condiciones que permiten la activación del SC por todas sus vías posibles, se evaluó el depósito de C3b sobre zymosán mediante CF empleando anticuerpos marcados fluorescentemente; estandarizándose así la dilución de trabajo para estos últimos. Luego de optimizar el protocolo, se analizaron 6 muestras de LH (3 calostros y 3 muestras de leche madura), tanto crudas como pasteurizadas. Inicialmente, se comparó el uso de muestras de LH entera vs. fase acuosa (fracción conteniendo los componentes hidrosolubles), sin observarse grandes diferencias. Los resultados preliminares obtenidos mostraron: *(i)* una mayor activación del SC en calostro (en línea con el enriquecimiento de componentes bioactivos en etapas tempranas de la lactancia), y *(ii)* un efecto deletéreo drástico de la pasteurización de Holder sobre la funcionalidad del SC (reflejando la termolabilidad de sus componentes). Actualmente, se está ampliando el número de muestras analizadas, evaluándose además marcadores que sugieran la/s vía/s de activación del SC presentes en LH.

Caracterización molecular del hongo comestible *Gymnopilus junonius*

Cinthia Acosta Algalarrondo[1]; Pía Grignola[2]

[1]Licenciatura en Análisis Alimentario, ITR Suroeste, UTEC, Paysandú, Uruguay

[2]Laboratorio de Microbiología Molecular, Departamento de Biotecnología, UTEC, Paysandú, Uruguay

cinthia.acosta@utec.edu.uy

Gymnopilus junonius es un hongo considerado comestible en Uruguay, aunque en otras regiones se lo clasifica como potencialmente tóxico. Esta discrepancia destaca la necesidad de su caracterización molecular para evaluar riesgos a la inocuidad alimentaria y la salud pública.

Se recolectaron 58 muestras en los departamentos de Paysandú y Río Negro, de las cuales 32 fueron analizadas por presentar condiciones adecuadas de desarrollo micelial. Se evaluaron diversos métodos de cultivo y extracción de ADN, obteniendo mejores resultados con el protocolo de lavado múltiple y medio azucarado.

La calidad del ADN varió según el estado del árbol y la localidad. La secuencia obtenida de la amplificación por PCR con el cebador ITS identificó específicamente a *G. junonius* (98–100 % de similitud), mientras que EF1 y RPB2 detectaron también *G. spectabilis, H. fasciculare* y otras especies.

Los resultados evidencian una alta diversidad genética, sobre todo en muestras de árboles muertos, lo que refuerza la utilidad de herramientas moleculares para una identificación precisa, clave en estudios de biodiversidad y manejo seguro de hongos comestibles.

Referencias bibliográficas

Guarro, J., Gené, J., & Stchigel, A. M. (1999).Atlas of Soil Ascomycetes. Centraalbureau voor Schimmelcultures.

Lücking, R., Aime, M. C., Robbertse, B., Miller, A. N., Ariyawansa, H. A., Aoki, T., ... & Schoch, C. L. (2021). Fungal taxonomy and sequence-based nomenclature. Nature Microbiology, 6(5), 540-548. DOI: 10.1038/s41564-021-00888-x.



Caracterización de β-manooligosacáridos generados enzimáticamente a partir de residuos de madera de pino.

Fabián Mancioni[1]; Cecilia Porciúncula[1]; Yamira Quintero[1]; Fernando Bonfiglio[2]; Antonia Montilla[3]; Paula López Revenga[3]; Carolina Fontana[4]; Cecilia Giacomini[1].

[1]Laboratorio de Bioquímica, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

[2]LATU-Latitud, Fundación LATU, Montevideo, Uruguay.

[3]PREBIOIN, CSIC-CIAL, Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, España.

[4]Laboratorio de Espectroscopía y Fisicoquímica Orgánica, Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte (S.R.A. Facultad de Química), UdelaR, Paysandú, Uruguay.

fmancioni@fq.edu.uy

Los oligosacáridos prebióticos, entre ellos los beta-manooligosacáridos (β-MOS), potencian el funcionamiento del sistema inmune pudiendo utilizarse en alimentos funcionales. Los β-MOS pueden obtenerse por hidrólisis enzimática de mananos de plantas utilizando endo β-mananasas. Los mananos, luego de los xilanos, son las hemicelulosas más abundantes, encontrándose en las maderas blandas como la de pino. El objetivo de este trabajo es caracterizar los β-MOS obtenidos por hidrólisis enzimática. Se partió de un hidrolizado de madera de pino obtenido por explosión de vapor a una temperatura de 180°C y un tiempo de residencia de 7,5 minutos, al cual se le realizó un protocolo de detoxificación que consistió en la remoción de monosacáridos y ácidos orgánicos por medio de una columna de Carbón grafitizado, y remoción de fenoles con una Columna de Extracción en Fase Sólida. Una vez detoxificados los mananos se les realizó hidrólisis enzimática para producir β-MOS, usando una endo β-mananasa comercial de *Aspergillus niger* y por medio de una precipitación con etanol 90% se separaron los productos de hidrólisis de alto y bajo peso molecular. Se evaluó el perfil de los hidrolizados de bajo peso molecular por medio de TLC, HPLC-UV, GC-FID y HPLC-SEC-ELSD. Dentro de la fracción de bajo peso molecular se obtuvieron un 61% de disacáridos, 29% de trisacáridos, 5.3% de tetrasacáridos y 3.8% de monosacáridos. Por otra parte, se determinó la composición monomérica de los β-MOS identificando la presencia de manosa, glucosa y galactosa característica de los galactoglucomananos de la madera de conífera. Se realizó un gel filtración de la fracción de β-MOS en equipo Akta purifier utilizando una columna de sephadex G10 (26/100) y las fracciones obtenidas están siendo elucidadas por RMN.

Caracterización estructural de Gonadotropina Coriónica equina: Comparación entre la hormona nativa y una variante recombinante en hospedero eucariota sencillo

Emiliana Botto[1]; Santiago Bustamante[1]; Cecilia Porciúncula[2]; Cecilia Maldonado[3]; Carolina Fontana[4]; Sonia Rodríguez Giordano[5]

[1]Área Tecnología Farmacéutica y Control de Calidad de Medicamentos - CIENFAR - Facultad de Química, Universidad de la República

[2]Área de Bioquímica - DEPBIO - Facultad de Química, Universidad de la República

[3]Área de Biofarmacia y Terapéutica - CIENFAR - Facultad de Química, Universidad de la República

[4]Departamento de Química del Litoral - Centro Universitario Regional Litoral Norte - sede Paysandú - Universidad de la República

[5]Área de Microbiología - DEPBIO - Facultad de Química, Universidad de la República

Correo electrónico autor presentador: emilianabotto@fq.edu.uy

La gonadotropina coriónica equina (GCe) es una glicoproteína ampliamente utilizada en reproducción animal por su actividad luteotrópica y foliculotrópica. Su estructura está fuertemente influenciada por la glicosilación [1], la cual afecta propiedades bioquímicas clave como estabilidad, actividad biológica e inmunogenicidad. Tradicionalmente, la GCe se obtiene de suero de yeguas gestantes, lo que plantea limitaciones éticas y de abastecimiento [2]. Por ello, la producción recombinante de GCe en sistemas de expresión alternativos, como *Saccharomyces cerevisiae*, representa una estrategia prometedora para generar formas recombinantes con perfiles controlados y sostenibles.

En este trabajo se presenta un estudio comparativo del perfil bioquímico y de glicosilación de GCe nativa y una primera forma recombinante expresada en *S. cerevisiae*. Se analizaron patrones de glicanos mediante marcaje con 2-aminobenzamida (2-AB) y cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) con detección UV. Además, se evaluaron parámetros bioquímicos como peso molecular aparente (SDS-PAGE) y punto isoeléctrico. Se expondrán los avances experimentales obtenidos hasta el momento, incluyendo datos preliminares sobre la caracterización de glicanos y resultados parciales de los análisis bioquímicos, los resultados obtenidos sentarán las bases para una glicoingeniería posterior de la cepa, en aras de obtener un perfil de glicosilación similar al equino. Este estudio busca aportar información relevante para optimizar sistemas de producción de glicoproteínas recombinantes de aplicación veterinaria, bajo criterios de eficiencia y sostenibilidad y sentar las bases analíticas para el posterior estudio de modificaciones en los patrones de glicosilación de esta proteína.

1. Matsui, T. et. al. Structural analysis of N-linked oligosaccharides of equine chorionic gonadotropin and lutropin beta-subunits. *Biochemistry*. 33(47) (1994)
2. Lunenfeld. The Development of Gonadotropins for Clinical Use in the Treatment of Infertility. Frontiers in Endocrinology, 10, 429 (2019)

Efecto del calcio sobre la generación de infecciones latentes y la colonización de *Ralstonia solanacearum* en genotipos de papa con resistencia diferencial a la marchitez bacteriana.

Virginia Ferreira[1]; Estefani Reyes[1]; Agostina Galliazzi[1]; Mariana Arias[2]; Guillermo Galván[3]; Paola Gaiero[3]; Giovanni Larama[4]; María Inés Siri[1].

[1]*Laboratorio de Microbiología Molecular, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria, Canelones, Uruguay.*

Facultad de Agronomía, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

[4]*Laboratorio de Investigación en Biocontrol, Universidad de la Frontera, Temuco, Chile.*

estefanireyescosta@gmail.com

Ralstonia solanacearum es el agente causal de la marchitez bacteriana considerada una de las enfermedades de plantas de mayor impacto económico a nivel mundial. En Uruguay, *R. solanacearum* afecta principalmente al cultivo de papa. Este patógeno se caracteriza por producir infecciones latentes asintomáticas que facilitan su diseminación y dificultan el control de la enfermedad. Nuestro grupo de investigación está enfocado en el desarrollo de germoplasma de papa con resistencia a *R. solanacearum.* Evaluaciones realizadas permitieron identificar genotipos con una respuesta diferencial frente a la infección por *R.solanacearum*. En trabajos previos de nuestro grupo se evaluaron los minerales que se encuentran en la savia xilemática y los tejidos de las plantas, encontrando niveles más altos de calcio en genotipos resistentes. Además, el efecto del calcio se evaluó en el crecimiento y la virulencia de *R. solanacearum,* donde se encontró que el calcio disminuyó ambos. Por otro lado, para evaluar el efecto del calcio sobre el desarrollo de la marchitez bacteriana, plantas fueron tratadas con calcio mediante regado, y luego fueron inoculadas con la bacteria. Se observó una disminución notoria de los síntomas o incluso plantas se mantuvieron asintomáticas. En base a estos antecedentes, en este trabajo se propuso determinar el efecto del calcio sobre la generación de infecciones latentes asintomáticas y la colonización del patógeno en genotipos de papa con diferentes niveles de resistencia a la marchitez bacteriana. Como resultado, se encontró que el calcio no afectó la generación de infecciones latentes y colonización del patógeno *in planta*, lo cual fue evaluado mediante recuento en placa y microscopía confocal. Aunque no se observó un efecto significativo del calcio en los parámetros analizados, estos hallazgos abren nuevas interrogantes sobre los mecanismos mediante los cuales el calcio podría estar modulando la interacción planta-patógeno. Este estudio aporta a la comprensión de los procesos de adaptación y virulencia de este patógeno y contribuye a la evaluación de posibles herramientas para el control integrado de la marchitez bacteriana.

Purificación y caracterización bioquímica de la lectina de ceibo blanco

Luciana Ottonello; Laura Franco Fraguas; Cecilia Porciuncula González

Área Bioquímica, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

luottonellor@gmail.com

Las lectinas son proteínas que poseen al menos un sitio de unión a carbohidratos, a través del cual pueden interaccionar específica y reversiblemente con glicanos presentes en distintas glicoproteínas y glicoconjugados. Estas características, las hacen herramientas fundamentales en glicobiología. Existen diversas fuentes de lectinas, siendo la mayoría de origen vegetal.

En nuestro país existe una biodiversidad muy importante de leguminosas, uno de las familias más reportadas como fuente de lectinas. Una de las lectinas vegetales más ampliamente utilizada en glicobiología es la lectina de *Erythrina cristagalli Agglutinin* (ECA) variedad *hasskarlii* Baker (ceibo rojo). Esta lectina presenta una elevada especificidad por Galβ1-3/β1-4 terminales.

En ese contexto, nuestro grupo de investigación se ha enfocado en la obtención de lectinas a partir de flora nativa de nuestro país. En este trabajo se propuso la búsqueda, purificación, caracterización e inmovilización de lectinas en una variedad de ceibo blanco (*Erythrina cristagalli* var. *leucochlora* Lombardo) Esta variedad de ceibo se encuentra únicamente en nuestro país y su distribución natural está restringida a los bosques fluviales de la desembocadura del río Cebollatí, razón por la cual ha sido escasamente estudiado.

Estudios preliminares de nuestro grupo demostraron que los extractos realizados a partir de semillas de este ceibo presentaban actividad lectina. Tomando como punto de referencia dichos estudios, en este trabajo, realizamos la purificación de dicha proteína a partir del extracto salino (previamente deslipidizado) de las semillas extraídas de las vainas. La colecta de estas se realizó durante los meses de marzo, abril y mayo. Se realizó fraccionamiento salino al 60% con sulfato de amonio. El precipitado resultante se disolvió en buffer PBS y se realizó una cromatografía de afinidad en soporte galactosil-agarosa, realizando la elución con PBS 0.2M Gal. El proceso de purificación fue evaluado por ensayo de hemaglutinación para determinar actividad lectina.

Tanto el extracto, como las fracciones correspondientes a los eluidos, presentaron actividad lectina. Mediante SDS-PAGE de la fracción pura, se pudo observar que la proteína presenta al menos una subunidad de tamaño 28 kDa aproximadamente. Se determinó también la concentración de proteínas en dicha fracción, obteniéndose 5.8 mg lectina/100 g de semillas aproximadamente. Para determinar la especificidad por sustrato, se realizaron ensayos de inhibición de HAG y ELISA (previa biotinilación) se determinó su especificidad.

Actualmente se está determinando el peso molecular y estructura cuaternaria mediante cromatografía de exclusión molecular. A su vez, se inmovilizará mediante estrategias covalentes en soportes de agarosa con el objetivo de contar con un soporte para la purificación de glicoproteínas.

En suma, hemos logrado aislar y caracterizar parcialmente la lectina de ceibo blanco, determinando que la misma presenta especificidad por galactosa.

Inhibidores del veneno de *Bothrops diporus* aislados de *Plantago tomentosa*

Nora Fernández[1]; Gonzalo Ojeda[1]; Ana Torres[1]; Romina Curbelo[2]; Eduardo Dellacasa[2]; Gabriela Ricciardi[1]

[1]*Laboratorio de Productos Naturales, IQUIBA-NEA, CONICET- UNNE, Corrientes, Argentina*

[2]*Facultad de Química - Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

noralis.fer@gmail.com

Plantago tomentosa Lam. subesp. *napiformis* (Rahn) Rahn (llantén), es una hierba perenne, nativa, utilizada en la etnomedicina regional por las propiedades antiinflamatorias, cicatrizantes, antibacterianas y antioxidantes que se le atribuyen. Se han identificado compuestos pertenecientes a diferentes grupos químicos como marcadores taxonómicos responsables de estas propiedades y también se ha propuesto que alguno de ellos podría tener potencial efecto inhibitorio sobre la actividad fosfolipásica, proteolítica y hemorrágica producida por los venenos de serpientes. A partir de resultados previos en que se ha demostrado la efectividad de los extractos etanólicos de hojas de *P. tomentosa* como antiofídico frente a *Bothrops diporus* (yarará chica), en este trabajo se propone identificar los compuestos presentes en las fracciones más activas como antiveneno y capaces de inhibir los componentes procoagulantes (thrombin like) del mismo. Para ello, se realizó un fraccionamiento bioguiado de los extractos por cromatografía líquida usando silica gel flash y una mezcla elutrópica de solventes. Se obtuvieron seis fracciones que fueron evaluadas por TLC y agrupadas según su perfil químico. Sus actividades *in vitro* sobre el veneno de *B. diporus* se evaluaron mediante la inhibición de las actividades coagulante (coagulómetro coL1) y hemolítica indirecta (difusión en agar sangre – fosfatidilcolina). Las fracciones 4 y 5 presentaron el mayor porcentaje de inhibición de la actividad hemolítica indirecta y, en particular, la fracción 4 resultó 100% activa como inhibidora de la actividad coagulante del veneno de *B. diporus*. El estudio por HPLC-DAD y HPLC-MS permitió identificar verbascósido (fenilpropanoide fenólico glicosidado) y aucubina (iridoide glucosilado) como constituyentes de ambas fracciones lo cual lleva a relacionar su presencia con la actividad demostrada.

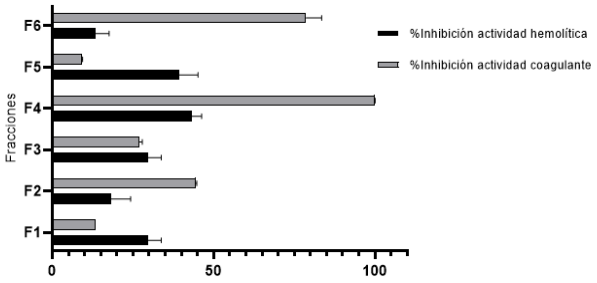


Gráfico 1. Evaluación de actividad alexitérica *in vitro* de fracciones obtenidas por cromatografía flash.

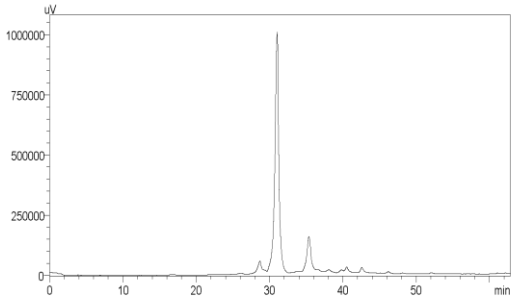


Gráfico 2. HPLC DAD de extracto etanólico de hojas, correspondiente a la estación de primavera (H2 II) a 330 nm.

Preparación y caracterización de inmuno-nanopartículas híbridas lípido/polímero con potencial utilidad para tratamientos oncológicos

Analía Castro[1]; Ricardo Faccio[1,2]; Patricia Zimet[1]; Pablo Miranda[1]; Iris Miraballes[3,4]; Álvaro Pittini[5]; Nora Berois[5]; Eduardo Osinaga[5]; Álvaro W. Mombrú[1,2]; Helena Pardo[1,2]

[1] Laboratorio de Nanotecnología, Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, Universidad de la República, Canelones, Uruguay; [2] Área Física - DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay; [3] Laboratorio de Biotecnología, Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, Universidad de la República, Canelones, Uruguay; [4] Área de Inmunología Clínica y Biotecnología, BIOCLIN, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay; [5] Laboratorio de Glicobiología e Inmunología Tumoral, Instituto Pasteur, Montevideo, Uruguay

acastro@fq.edu.uy

El cáncer es una de las principales causas de mortalidad a nivel mundial, y su tratamiento clínico más común continúa siendo la quimioterapia. No obstante, muchos agentes quimioterapéuticos presentan una baja solubilidad en agua, provocan efectos secundarios significativos, muestran una biodistribución inespecífica y poseen una eficacia terapéutica limitada. La encapsulación de estos fármacos hidrofóbicos en nanosistemas de liberación controlada surge como una estrategia prometedora para superar estas limitaciones. Además, la vectorización activa mediante la conjugación con ligandos específicos, como anticuerpos, permite dirigir el fármaco exclusivamente hacia las células o tejidos afectados, aumentando la eficacia del tratamiento y reduciendo los efectos adversos [1]. En este contexto, las nanopartículas híbridas lípido-polímero (NpHLP) representan una alternativa altamente promisoria. Estos nanosistemas de nueva generación combinan las propiedades beneficiosas de los liposomas y de las nanopartículas poliméricas [2], y están constituidos por un núcleo polimérico que encapsula el principio activo, rodeado por una cubierta lipídica que aporta estabilidad y biocompatibilidad. El objetivo de este trabajo fue preparar y caracterizar desde el punto de vista fisicoquímico y biológico NpHLP cargadas con docetaxel (DCX) y funcionalizadas con el anticuerpo Chi-Tn. Este anticuerpo quimérico ratón/humano es específico para el antígeno Tn, un biomarcador diagnóstico de distintos tipos de cáncer. La formulación se obtuvo mediante un proceso combinado de autoensamblado y nanoprecipitación [3, 4], logrando una eficiencia de encapsulación cercana al 100%, con una carga de 4 mg de DCX/mL. Las NpHLP presentaron morfología esférica, un tamaño promedio menor a los 250 nm y un potencial Z superior a +30 mV. Las nanopartículas funcionalizadas demostraron capacidad para ingresar al citoplasma celular y reducir significativamente la viabilidad de células de la línea A549 de cáncer de pulmón humano. Asimismo, los ensayos *in vivo* evidenciaron una actividad antitumoral superior a la de la formulación comercial Taxotere (DCX libre), con un aumento en la tasa de supervivencia de los animales tratados. En conjunto, estos resultados apoyan la hipótesis de que las inmuno-nanopartículas obtenidas pueden tener potencial utilidad en el tratamiento de cáncer de pulmón.

[1] Babu A. et al. Sci Rep. 2017, Vol. 7, 14674-90. [2] Mohanty et al. Molecules. 2020. Vol. 19, 4377 [3] Bose R. et al. Journal of Industrial and Engineering Chemistry. 2016, Vol. 36, 284-292. [4] Zhang et al. ACS Nano. 2008, Vol. 2, 1696-1702.

Kombuchas uruguayas: análisis fisicoquímicos y microbiológicos de bebidas comerciales y su alineación con estándares internacionales

Florencia Tourné; Karina Medina; Valentina Martín

Área de Enología y Biotecnología de las Fermentaciones, Departamento de Ciencia y Tecnología de los Alimentos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

ftourne@fq.edu.uy

La kombucha es una bebida fermentada a base de té, producida mediante una comunidad simbiótica de bacterias y levaduras (SCOBY) [1]. Aunque su consumo ha aumentado en Uruguay, no existen normativas nacionales específicas que regulen su producción, y los estudios analíticos locales de caracterización son escasos.

Este trabajo tuvo como objetivo analizar parámetros fisicoquímicos y microbiológicos de kombuchas comerciales uruguayas y compararlas con una marca internacional. Se evaluaron variables como contenido de etanol, glicerol, azúcares residuales, pH, acidez total y volátil, polifenoles totales y capacidad antioxidante. La caracterización microbiológica incluyó aislamientos en medios selectivos y análisis morfológico de las colonias obtenidas.

Las muestras presentaron un promedio de 30 g/L de azúcares y un contenido alcohólico entre 0,5 y 2,5 % v/v. El pH osciló entre 2,5 y 4,2, mientras que la acidez total fue superior a 30 mEq/L en el 75 % de los casos, lo que favorece su estabilidad microbiológica. La capacidad antioxidante se ubicó dentro de los rangos reportados en la bibliografía (~ 0,5 – 4153 µmol TEAC/mL), al igual que el contenido de polifenoles totales [2,3]. Asimismo, se observó una notable diversidad microbiana, reflejo de la complejidad de esta fermentación.

Este constituye el primer estudio sobre kombuchas comerciales en Uruguay. Los resultados obtenidos, perfilan a las kombuchas nacionales como una alternativa viable para reducir el consumo de azúcar y alcohol, con un perfil antioxidante destacado. La única marca internacional analizada fue la que se ajustó más rigurosamente a las regulaciones internacionales vigentes.

1. Greenwalt, C. J., Steinkraus, K. H., & Ledford, R. A. (2000). Kombucha, the fermented tea: Microbiology, composition, and claimed health effects. *Journal of Food Protection, 63*(7), 976–981. https://doi.org/10.4315/0362-028X-63.7.976

2. Xiong, R.-G., Wu, S.-X., Cheng, J., Saimaiti, A., Liu, Q., Shang, A., Zhou, D.-D., Huang, S.-Y., Gan, R.-Y., & Li, H.-B. (2023). Antioxidant Activities, Phenolic Compounds, and Sensory Acceptability of Kombucha-Fermented Beverages from Bamboo Leaf and Mulberry Leaf. *Antioxidants*, *12*(8), 1573. https://doi.org/10.3390/antiox12081573

3. Değirmencioğlu, N., Yıldız, E., Sahan, Y., Güldas, M., & Gürbüz, O. (2021). Impact of tea leaves types on antioxidant properties and bioaccessibility of kombucha. *Journal of food science and technology*, *58*(6), 2304–2312. https://doi.org/10.1007/s13197-020-04741-7

Recubrimientos con Propóleo, una alternativa natural en la conservación de quesos

Agustina Asaravicius[1]; Brisa Moreira[1]; Federica Pomar[1]; Maria del Pilar Garcia[1]; Micaela Robaina[1]; Mariana Viera[2]; Marcela González[2]

[1]Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, UDELAR, Montevideo, Uruguay

[2]Unidad de Tecnología de Alimentos, Facultad de Agronomía, UDELAR, Montevideo, Uruguay

aguchyasa@gmail.com

El material principal en el cual basamos nuestra investigación es el propóleo. Este material, producido por las abejas, presenta propiedades antibacterianas, antifúngicas y antioxidantes tales que, al utilizar su extracto en recubrimientos, puede ser eficaz en la reducción del crecimiento microbiológico así como en la oxidación de los alimentos, siendo el primero uno de los grandes desafíos de la industria quesera. Dada la gran producción de queso en Uruguay, tanto de forma industrial como artesanal, evitar su pérdida de calidad durante su almacenamiento así como lograr prolongar su vida útil tiene una gran importancia. Un método para lograr este fin, con la utilización de materiales naturales y respetuosos con el medio ambiente, es la incorporación de recubrimientos comestibles.

Para desarrollar el recubrimiento comestible, se elaboraron películas en base de proteína de suero de leche al 10%(m/m) y glicerol al 10%(m/m). Posteriormente, se compararon distintas concentraciones de extractos de propóleo de diferentes zonas de Uruguay: Los Cerrillos, Juanicó y Valle del Lunarejo.

Se realizaron ensayos mecánicos de elongación en el Laboratorio de Tecnología de Alimentos de la Facultad de Ingeniería según la norma ASTM D882 y microbiológicos en la Unidad de Tecnología de Alimentos en la Facultad de Agronomía, estudiado la inhibición contra los tres tipos de hongos, dos especies de estafilococo y dos levaduras que más comúnmente crecen en los quesos. En base a los resultados obtenidos se optó por el propóleo de los Cerrillos ya que es el que mejor inhibe todos los microorganismos probados. También, se definió que la menor concentración para obtener los resultados deseados es de 0,48% (v/v).

Con la película elegida, se realizó una cobertura en queso tipo dambo de elaboración propia utilizando leche del tambo de la estación experimental Centro Regional Sur de Facultad de Agronomía y se controlaron sus propiedades de pérdida de masa y presencia de hongos en un periodo de tiempo.
En conclusión, se logró crear un recubrimiento comestible que es efectivo contra el crecimiento de los microorganismos estudiados y que funciona como barrera contra la permeabilidad del vapor de agua.
El trabajo fue realizado en el marco de la convocatoria del PAIE 2024 y fue supervisado por Daniel Molinari[1] y Giovanni Galietta[2]

Caracterización Cascarilla de café como ingrediente funcional

Ernesto Quagliata[1]; Silvina Gazzara[1]; Cecilia Dauber[1]; Bruno Irigaray[2]; Adriana Gámbaro[3]; Ignacio Vieitez[1]

[1]Área Tecnología de Alimentos, Departamento de Ciencia y Tecnología de Alimentos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

[2]Área Grasas y Aceites, Departamento de Ciencia y Tecnología de Alimentos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

[3]Área de Evaluación Sensorial, Departamento de Ciencia y Tecnología de Alimentos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

equagliata@fq.edu.uy

La cascarilla de café es un subproducto generado exclusivamente durante el proceso de tostado del grano. A pesar de su disponibilidad global —dado que el tostado se realiza tanto en países productores como no productores— actualmente se descarta o se destina a alimentación animal. Asimismo, si no se gestionan adecuadamente, los subproductos pueden contribuir a la contaminación ambiental debido a su alto contenido de materia orgánica.

Este trabajo tuvo como objetivo caracterizar dos tipos de cascarilla de café (proporcionadas por Nestlé Uruguay): una proveniente del proceso de obtención de café glaseado (CG, mezcla de Arábica y Robusta) y otra del proceso de tostado natural (CN, solo Arábica). Para CG se evaluaron tres métodos de secado (estufa, liofilización y secado solar) y además se estudió la evolución de la composición de CN a lo largo del tiempo.

Se determinó la composición centesimal (proteínas, cenizas, fibra, lípidos y humedad), el contenido de polifenoles (usando la técnica de Folin-Ciocalteau), la actividad antioxidante (mediante el ensayo del radical ABTS), y los niveles de cafeína y ácido clorogénico. En todos los casos, la fibra dietética fue el componente predominante (~65% en base seca), lo que destaca el potencial uso de la cascarilla como ingrediente funcional rico en fibra.

CG (liofilizado y estufa) presentaron niveles significativamente mayores ($p < 0.05$) de cafeína (7198 y 8097 ppm), ácido clorogénico (3327 y 3016 ppm) y proteínas (15.65 y 14.45 %), atribuibles a la presencia de Robusta en comparación con CN (5657 ppm, 616 ppm y 13.15 % respectivamente). El estudio durante 6 meses de CN reveló variaciones en los contenidos de lípidos, cenizas, cafeína y polifenoles totales ($p < 0.05$).

En conclusión, tanto CG y CN son potencialmente opciones para ser utilizadas como ingredientes en alimentos funcionales ya que presentan un elevado contenido de fibra y buena capacidad antioxidante. De los diferentes tipos de secados estudiados, el secado por estufa resultó el más prometedor debido a su escalabilidad y su capacidad para preservar los compuestos bioactivos de la cascarilla.

Reciclaje de plásticos: articulando entre *emprendimiento La Fábrica* y la Facultad de Química

Mariana Pereira; Micaela Laguarda; Patrice Portugau

Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

marianapereiraalvez@gmail.com

El presente trabajo se enmarca en una actividad de extensión universitaria en colaboración con el emprendimiento sostenible *La Fábrica*, dedicado al reciclaje de tapas plásticas para la elaboración de nuevos productos. El trabajo surge de una problemática concreta del emprendimiento, al emplear tapas plásticas clasificadas por color para sus procesos, en algunos casos observaban que los productos obtenidos presentaban defectos (puntos débiles en las placas y trozos que se desprendían). Ellos atribuían esos defectos a que las tapas empleadas si bien tenían el mismo color y lucían igual, no lo eran. A su vez, como las tapas tienen diferente origen no todas presentan el sello distintivo que permite conocer de que material se componen.

En primer lugar se trabajó con el emprendimiento de forma de clasificar basados en su experiencia empírica con las diferentes tapas, aquellas que presentaban problemas para su uso y aquellos que no lo tenían. Se recabaron muestras de ambos grupos y a través de la aplicaron técnicas instrumentales como la espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR) y análisis térmico diferencial (DTA) se lograron observar diferencias entre los dos grupos mencionados. Asimismo, para lograr identificar químicamente los tipos de polímeros, se trabajó por comparación de espectros FTIR y temperaturas de fusión empleando materias primas de composición conocida (polietileno de alta y baja densidad y polipropileno). A su vez, para buscar una solución práctica para el emprendimiento, se elaboró un método de clasificación por flotación en una solución hidroalcohólica de densidad conocida que les permitiera distinguir los plásticos con los que trabajan empleando materiales accesibles y a su vez validado contra los resultados de FTIR y DTA.

El trabajo culminó con una presentación al equipo de La Fábrica, donde se explicaron los principales resultados y se contrastaron con las hipótesis que ellos manejaban, donde se constató que la causa de la problemática eran tapas de polipropileno que pasaban inadvertidas en la clasificación por color. Por último, se realizó una instancia de laboratorio donde se les invitó a preparar la solución hidroalcohólica de trabajo intercambiando también acerca de los cuidados a tener en cuenta para que se mantenga la validez del método.

[1] Rodríguez Chialanza, M., Sierra, I., Pérez Parada, A., & Fornaro, L. (2018). Identification and quantitation of semi-crystalline microplastics using image analysis and differential scanning calorimetry. *Environmental Science and Pollution Research, 25*(17), 16273–16281. https://doi.org/10.1007/s11356-018-1749-0

Explorando la valorización de residuo de yerba mate mediante métodos hidrotérmicos

Florencia Pólvora[1]; Ana Claudia Pina[1,2]; Mirian E. Casco[2]; Yanaína Castro[2]; Jorge de Vivo[1]; Lautaro Hernández[1]; Patrice Portugau[1]; Martín Torres[1]

[1]Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay

[2]Grupo de Materiales Ingeniería y Medioambiente, Departamento de Ingeniería, Universidad Católica del Uruguay.

florenciapolvoralopez96@gmail.com

Uruguay presenta uno de los mayores consumos per cápita de yerba mate (YM) (~10 kg/(hab.año)), generando unas 170.000 ton/año de residuos (RYM). Actualmente, solo una fracción se emplea en vermicompost, mientras que los estudios sobre su aprovechamiento han sido escasos. La acumulación de RYM en vertederos constituye un problema ambiental por emisiones de gases de efecto invernadero, lixiviados y presión sobre la gestión urbana de residuos. Explorar estrategias de valorización alineadas con la economía circular es clave para los objetivos del Plan Nacional de Gestión de Residuos. Los procesos hidrotermales permiten tratar biomasas húmedas sin secado previo, transformándose en fracciones sólidas, líquidas y gaseosas, y representan una alternativa adecuada para residuos como el RYM. Este trabajo presenta resultados preliminares de procesos hidrotermales de RYM a tres temperaturas (220, 240 y 260 °C, por duplicado). El RYM y sus fracciones de productos fueron caracterizados mediante análisis elemental y próximo, cromatografía de gases, así como poder calorífico, a fin de evaluar su potencial. Los resultados presentados en la Tabla 1 indican que la temperatura de operación tiene una influencia significativa en la distribución y composición de las fracciones obtenidas. Temperaturas de 220 °C favorecen la formación de biocarbón, mientras que, a temperaturas más altas se obtienen mayoritariamente fracciones líquidas y gaseosas.

Tabla 1- Resultados preliminares de análisis próximo y rendimiento de fracciones

Análisis próximo de materiales de partida					**Resultados Proc. Hidrotermal RYM**				
	%hum	% Vol	% Cen	%C.Fijo	T (°C)	% Liq	% Gas	% Sol	%Perd
YM	6	88	5	7	220	75	2	15	8
RYM	76	88	4	8	240	80	3	11	6
porcentajes expresados en base seca					260	82	3	6	9

Valorización de residuos de cáñamo: producción de carbón activado y su performance como adsorbente de cafeína

Enzo Giménez; Victoria Rodríguez; Alejandro Amaya; Ana Claudia Pina

Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay

victoria.3007.rodriguez@gmail.com; enzomus11@gmail.com

El carbón activado es uno de los materiales de mayor versatilidad en cuanto a sus aplicaciones debido a su alta superficie específica, estructura porosa y afinidad química por numerosos compuestos [1]. Sus aplicaciones abarcan la purificación, catálisis, remediación ambiental, usos en medicina y cosmética, entre otras. Su producción se puede llevar a cabo a partir de biomasa de diversa índole, los residuos lignocelulósicos son particularmente adecuados por presentar bajo costo y alto contenido de carbono. En este trabajo se evaluó el uso de fieltro de cáñamo (material fibroso derivado del tallo de la planta de *Cannabis sativa*) como precursor para la obtención de carbón activado. En Uruguay, el desarrollo de este sector productivo ha generado nuevos subproductos como el cáñamo industrial, cuya valorización puede integrarse en una lógica de economía circular. Se buscó estudiar su potencial como precursor sostenible de carbón activado, analizando el rendimiento del proceso, las propiedades texturales del material obtenido y su capacidad adsorbente frente a contaminantes emergentes como la cafeína.

El proceso de activación se realizó en una única etapa de carbonización-activación simultánea con CO_2, a 800 °C durante 40 minutos. La caracterización del fieltro y del producto final incluyó espectroscopía infrarroja (FTIR), análisis termogravimétrico (TGA), y estudio de la porosidad mediante isoterma de adsorción-desorción de nitrógeno a 77 K. Se obtuvo un carbón con área superficial S_{BET} = 324 m^2g^{-1} y volumen de poro total de 0,382 cm^3g^{-1}, con predominancia de mesoporos. El rendimiento del proceso fue de 6,4%, consistente con la degradación térmica de materiales lignocelulósicos bajo estas condiciones.

La capacidad de adsorción se evaluó utilizando soluciones acuosas de cafeína (12 ppm), contaminante común en aguas residuales. Se observaron curvas de adsorción rápidas, alcanzando niveles de saturación en menos de 1h y remociones superiores al 80%. Los resultados obtenidos validan la viabilidad del fieltro de cáñamo como fuente renovable para la producción de carbón activado con propiedades mesoporosas. Asimismo, demuestran su eficacia como adsorbente en tratamientos de aguas contaminadas con compuestos orgánicos, abriendo camino a futuras optimizaciones en condiciones de activación y evaluación frente a otros contaminantes.

1 -Salih Paşa, et al., 2025. “Effective adsorption performance of hemp root-derived activated carbon for tamoxifen-contaminated wastewater”, Journal of Molecular Liquids, (425), 127219, https://doi.org/10.1016/j.molliq.2025.127219.

Procesos de oxidación avanzada como estrategia para la eliminación de pesticidas obsoletos: imidacloprid como caso de estudio

Maytena Pereira[1]; Lucas Archondo[1]; Juan Rodríguez[2]; Verónica Cesio[3]; Horacio Heinzen[3]; Andrea De León[4]; Natalia Besil[1]

[1]Grupo de Análisis de Compuestos Traza (GACT), Departamento de Química del Litoral, CenUR Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay.

[2]Laboratorio de Energía Solar, Departamento de Física del Litoral, CenUR Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay

[3]GACT, Farmacognosia y Productos Naturales, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

[4]Laboratorio de Fisicoquímica de Superficies, Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

maytenapereira38@gmail.com

El imidacloprid es un insecticida neonicotinoide de uso extendido en cultivos agrícolas, altamente eficaz contra insectos plaga. Debido a su impacto ambiental, particularmente sobre poblaciones de polinizadores como las abejas, su uso ha sido restringido y es uno de los activos de mayor acúmulo en Uruguay. Su incineración tiene como desventaja que, al ser un compuesto organohalogenado, se pueden formar dioxinas y furanos halogenados tóxicos y persistentes. Para abordar esta problemática, se evaluó el uso de Procesos de Oxidación Avanzada, específicamente fotólisis y fotocatálisis heterogénea con TiO_2 como fotocatalizador, para estudiar la degradación de imidacloprid a escala de laboratorio y piloto.

A escala de laboratorio, se utilizó un fotorreactor compuesto por un tubo de vidrio de borosilicato, irradiado con cuatro lámparas que emiten radiación UVA en el rango de 340 a 420 nm. El medio de reacción se mantuvo en suspensión en un reservorio termostatizado y fue recirculado a través del tubo mediante una bomba peristáltica. En estos ensayos se empleó estándar puro de imidacloprid.

A escala piloto, se utilizó una plataforma solar experimental equipada con un concentrador cilindro parabólico (CCP) con capacidad operativa de 11 L. Este sistema incluye radiómetro, piranómetro, bomba y medidor de caudal, permitiendo un control de las condiciones experimentales. Durante las experiencias se monitoreo la irradiancia solar y la componente UV, y se trabajó con un formulado comercial de imidacloprid.

La degradación de imidacloprid se evaluó mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas en tándem. En la plataforma solar se monitoreo también irradiancia solar y componente UV.

Se constató un mayor nivel de degradación al emplear fotocatálisis heterogénea. Los porcentajes de degradación mediante fotólisis a escala de laboratorio y piloto fueron del 58% y 27%, respectivamente; mientras que con fotocatálisis heterogénea se alcanzaron valores de 96% y 86%. Estos resultados confirman la fotocatálisis heterogénea como una herramienta eficaz para la disposición final de formulados de imidacloprid.

Influencia de Parámetros Operativos del Proceso Organosolv en la Recuperación de Lignina

Kiby Mora[1]; Carmina Reyes Plascencia[1]; Nestor Tancredi[1,2]

[1]Energías Renovables, IPTP, Facultad de Química, UdelaR, Pando, Uruguay.

[2] Área de Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.

kiby@fq.edu.uy

En Uruguay, la producción de madera aserrada genera grandes cantidades de residuos de pino, de los cuales una fracción significativa sigue desaprovechada. Con la apertura de la tercera planta de celulosa, se estima que estos residuos alcanzarán unas 227.653 toneladas anuales, lo que requiere soluciones tecnológicas para su valorización [1].

El Pretratamiento Organosolv (POS) es una alternativa integral porque separa lignina de alta pureza y preserva la celulosa, permitiendo su uso en compuestos químicos y bioproductos [2]. Este proceso hidrotérmico utiliza mezclas de etanol/agua, a 150-250 °C por un tiempo de 30 a 170 min y bajas concentraciones de NaOH para mejorar la extracción de lignina [3].

En este trabajo, se evaluó el POS de madera de pino utilizando un diseño factorial 2^3 como screening preliminar para maximizar la extracción de lignina en un reactor Parr de 500 mL. El tiempo de reacción y la relación biomasa/líquido se mantuvieron constantes en 120 min y 1:8 (p/v), respectivamente. La Tabla 1 muestra las condiciones experimentales y los porcentajes de deslignificación obtenidos.

Tabla 1. Condiciones evaluadas y % de deslignificación en el diseño factorial 2^3

Nro. Ensayo	T (°C)	EtOH (% v/v)	NaOH (% p/v)	Deslignificación (%)[a]
1	150	10	1	12,75
2	150	10	3	31,34
3	150	50	1	13,33
4	150	50	3	30,54
5	180	10	1	11,37
6	180	10	3	68,08
7	180	50	1	19,15
8	180	50	3	46,35

[a] Considerando que la biomasa sin pretratar tiene un 34% de lignina determinado según [4].

Los resultados de la Tabla 1 muestran que la mayor deslignificación (68%) se logró a 180 °C, 10% de EtOH y 3% de NaOH siendo la temperatura y la concentración de NaOH los factores más influyentes. En general, temperaturas más altas y mayor alcalinidad favorecen la deslignificación, mientras que un exceso de EtOH disminuye el rendimiento.

[1] Böthig, S. et al. Proyecto de valorización de subproductos de la Industria de Transformación Mecánica de la Madera. Informe final (2021)

[2] Mutturi S. et al. Developments in bioethanol fuel-focused biorefineries. Advances in Biorefineries: Biomass and Waste Supply Chain Exploitation 259-302 (Elsevier Ltd., 2014).

[3] Bernal-Lugo I. et al. Highly efficient single-step pretreatment to remove lignin and hemicellulose from softwood. BioResources 14 (2), 3567-3577 (2019)

[4] Sluiter A. et al. Determination of Structural Carbohydrates and Lignin in Biomass. Golden, Colorado: National Renewable Energy Laboratory, 2012. Technical Report NREL/TP-510-42618.

Pretratamiento de productos de hidrotratamiento catalítico mediante metilación y SPE para su análisis por GC-MS

Agustín Rubbo; Elisa Volonterio; Iván Jachmanián

Área Grasas y Aceites, Departamento de Ciencia y Tecnología de los Alimentos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

arubbo@fq.edu.uy

El hidrotratamiento catalítico de aceites vegetales es una tecnología prometedora para la producción de biocombustibles. Mediante la misma, los materiales grasos son sometidos a altas temperaturas y presión de hidrógeno, convirtiéndolos a hidrocarburos (HC).

Para caracterizar los productos obtenidos en este tipo de proceso se suele utilizar cromatografía gaseosa acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) con columnas no polares, como aquellas con fase estacionaria 5%-fenil-metilpolisiloxano. Este enfoque permite determinar y caracterizar convenientemente HC alifáticos y aromáticos. Sin embargo, compuestos característicos de una reacción incompleta como triglicéridos (TAG), diglicéridos (DAG), monoglicéridos (MAG) o ácidos grasos libres (FFA) no son detectados, ya que quedan retenidos irreversiblemente en la columna cromatográfica.

En este trabajo se diseñó una estrategia analítica para la separación previa de dichas fracciones, facilitando el análisis posterior por GC-MS de la fracción de HC.

Para ello, el producto de reacción fue sometido a una etapa de metilación en dos etapas (saponificación con KOH/MeOH seguido de esterificación con BF_3/MeOH a 100 °C) a los efectos de transformar los glicéridos y los FFA presentes en la muestra en sus correspondientes ésteres metílicos (FAMEs), sin afectar los HC. A continuación, se procedió a la separación por extracción en fase sólida (SPE) de las fracciones de HC y FAMEs, utilizando columnas cargadas con sílica/alúmina (90:10) y eluyendo cada fracción con hexano y hexano:diclorometano (50:50), respectivamente.

Análisis adicionales realizados por GC-FID permitieron verificar la conversión completa de TAG, DAG, MAG y FFA en las condiciones de reacción utilizadas. Asimismo, el análisis de las dos fracciones obtenidas demostró que el método SPE fue eficiente en la separación de HCs y FAMEs. TAG, DAG, MAG,y FFA en las condiciones de reacción utilizadas.

Esta metodología no solo elimina de los productos de hidrotratamiento compuestos capaces de comprometer la integridad de columnas genéricas no polares, sino que además aporta información adicional, ya que permite caracterizar las fracciones no convertidas a partir de la determinación del perfil de la fracción de FAMEs obtenida.

Degustando el cambio:

Inestabilidad del *flavour* de la cerveza artesanal uruguaya

Noela González[1]; Laura Fariña[1]; Eduardo Dellacassa[2]; Cecilia Schinca[1]; Karina Medina[1]

[1]*Área de Enología y Biotecnología de Fermentaciones, Departamento de Ciencia y Tecnología de los Alimentos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Biotecnología de Aromas, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

ngonzalez@fq.edu.uy

En Uruguay, las ventas de cerveza artesanal experimentaron un aumento del 43 % entre 2005 y 2020, y en la actualidad han alcanzado una participación del 2,5 % en el mercado cervecero. A medida que continúa la expansión y la difusión del rubro, los consumidores se vuelven cada vez más expertos y exigentes en cuanto a los perfiles de flavour. Uno de los desafíos más relevantes para la calidad de la cerveza artesanal es la inestabilidad de sus propiedades sensoriales debido a cambios en su composición química durante el almacenamiento. Este estudio tiene el fin de contribuir al conocimiento sobre la estabilidad sensorial y aromática de la cerveza artesanal uruguaya, al proporcionar información valiosa para cerveceros y profesionales del sector interesados en mantener y mejorar la calidad de sus productos a lo largo del tiempo.

Se estudió la inestabilidad sensorial y del perfil volátil de los tres estilos de cerveza artesanal más consumidos en Uruguay: Indian Pale Ale, Blonde Ale y Stout. Las muestras se obtuvieron de cinco cervecerías de gran capacidad (más de 10 000 litros mensuales) y se analizaron a los 0, 3, 6 y 12 meses desde el envasado. Se llevaron a cabo análisis sensoriales por un panel de jueces, entre ellos jueces certificados por el programa internacional Beer Judge Certification Program (BJCP) y expertos del sector. Se evaluaron 16 descriptores, de los cuales nueve (floral, frutal, solvente, papel/cartón, sulfhídrico, acetaldehído, diacetilo, ácido y amargo) mostraron cambios significativos en el transcurso de un año. Paralelamente, se realizó una caracterización aromática de las muestras mediante HS-SPME-GC-MS, permitiendo observar la evolución de compuestos aromáticos clave.

A través de la correlación de los datos sensoriales y de los compuestos volátiles, se identificaron tendencias en los cambios de los perfiles sensoriales y de compuestos aromáticos. Estos resultados revelan patrones de formación y degradación de compuestos y posibles influencias de los estilos y del tiempo de almacenamiento en la percepción de calidad.

Estudios de bioaccesibilidad *in vitro* de hierro, manganeso y cromo en algas de consumo en la costa este de Uruguay

Melina Machado Arriola; Nataly Rodríguez; Fiorella Iaquinta

Área Química Analítica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

melimachado26@gmail.com

El consumo de macroalgas ha aumentado a nivel mundial, ya que son consideradas un potencial superalimento, por representar una fuente alimentaria de alto valor nutricional. Presentan alto contenido de compuestos bioactivos y minerales esenciales, entre los que se destacan el hierro (Fe), el manganeso (Mn) y el cromo (Cr). Considerando que el contenido total de un mineral en un alimento no necesariamente refleja la cantidad que puede ser absorbida por el organismo, este estudio tuvo como objetivo evaluar la bioaccesibilidad *in vitro* de Fe, Mn y Cr en lechuga de mar (*Ulva spp.*), como una mejor aproximación a la absorción de los metales durante la digestión gastrointestinal.Se recolectaron seis muestras de Lechuga de mar (*Ulva spp.)* en la costa de La Paloma, Rocha, Uruguay y se aplicó un método basado en el protocolo INFOGEST. Brevemente, 1 g de muestra se agitó durante 2 minutos con 2,0 mL de solución salival simulada (α-amilasa en agua milliQ, pH neutro) a 37°C. Luego se agregó 5,0 mL de solución estomacal simulada (pepsina en agua milliQ y HCl, pH 1,2) y se agitó durante 2 h a 37ºC. Pasado este tiempo, se añadió 5,0 mL de solución intestinal simulada (pancreatina y sales biliares en agua milliQ y NaOH, pH 6,8) manteniendo las mismas condiciones durante 2 h. Finalmente, se centrifugó y se separó la fracción bioaccesible (sobrenadante) de la residual. Tanto las fracciónes residuales, como las muestras se procesaron por digestión ácida asistida por microondas, utilizando HNO_3 2,9 mol L^{-1}. Las determinaciones analíticas se realizaron por espectrometría de emisión atómica con plasma inducido por microondas (MP AES) con métodos previamente validados. Para verificar la veracidad del ensayo *in vitro* se realizaron balances de masa, donde: Recuperación (%) = [(Conc. fracción residual + Conc. fracción bioaccesible)/ Conc. total] × 100.
Las recuperaciones se encuentran entre 81,4 ± 3,4 % (Cr) y 101,6 ± 5,6 % (Mn), por lo que se consideraron adecuadas para la aplicación. Las concentraciones totales, los porcentajes de bioaccesibilidad y los aportes a la ingesta diaria recomendada para cada metal se presentan en la tabla adjunta. Se destacan los aportes de Fe y Cr que corresponden hasta al 15% de la Ingesta diaria recomendada (RDA) por porción para esos metales, confirmando el potencial nutricional de nuestras algas.

Metal	Conc. total ($mg\ kg^{-1}$) (base húmeda) *	Bioaccesiblilidad (%) *	RDA ($mg\ día^{-1}$)	Aporte en 50 g (%)
Fe	115 ± 13	20,5 ± 2,3	M: 18	M: 7
			V: 8	V: 15
Mn	2,15 ± 0,17	58,7 ± 6,5	M: 1,8	M: 4
			V: 2,3	V: 3
Cr	0,266 ± 0,034	27,3 ± 2,5	M: 0,025	M: 15
			V: 0,035	V: 10

*Prom ± s; M: mujer; V: varón

Agradecimientos Los autores agradecen a PEDECIBA – Química, ANII y CSIC

Análisis metabólico de variedades criollas de maiz mediante LC-HRMS

Camila Horta[1], Bruno Silva[1], Zoe Rivas[1], Marcos colazzo[1], Magdalena Irazoqui[1], Natalia De almeida[2], Maria Laura Umpierrez[2], Rafael Vidal[3]

[1]UTEC, ITRSO, Licenciatura en Análisis Alimentario (LAA), Paysandú, Uruguay.

[2]UTEC, ITRCS, Grupo de Agroecología, Sustentabilidad y Medio Ambiente (GASMA), Durazno, Uruguay.

[3]Facultad de Agronomía, UdelaR, Montevideo, Uruguay.

camila.horta@utec.edu.uy

El maíz (***Zea mays L. subsp. mays***) es un cereal de amplia distribución mundial, reconocido por su amplia diversidad genética, la cual ha sido preservada tradicionalmente por agricultores familiares a lo largo del tiempo. Desde el punto de vista nutricional, se destaca por su contenido en carbohidratos, proteínas y grasas, además de presentar compuestos antioxidantes que no solo le confieren una coloración característica, sino que también aportan beneficios para la salud humana. Muchos de estos compuestos funcionales son metabolitos secundarios que la planta produce en respuesta a condiciones de estrés abiótico. En Uruguay, se han identificado aproximadamente 70 variedades criollas de maíz, distribuidas en 10 razas y relevadas en los departamentos de Canelones, Rocha, Treinta y Tres, Tacuarembó y Rivera.

Con el propósito de profundizar en el conocimiento del germoplasma nacional, se planteó realizar el análisis del perfil nutricional y metabólico de semillas de variedades criollas de maíz uruguayas aportadas por el banco de germoplasma de FAgro. Para ello, se determinaron sus componentes principales —humedad, cenizas, grasas y proteínas— siguiendo los métodos oficiales establecidos por la AOAC. Asimismo, se evaluó el contenido de antioxidantes y fenoles totales mediante los ensayos de ABTS y Folin-Ciocalteu, respectivamente. El contenido de carbohidratos fue estimado por diferencia de los componentes previamente determinados.

Los resultados revelaron diferencias significativas entre algunas de las variedades analizadas. En particular, la variedad 9073 (Pisingallo) se destacó por su elevado contenido de proteínas (16,80 ± 0,12)%, fenoles totales (3111 ± 206) µg Gálico mg^{-1} muestra seca y capacidad antioxidante (24,47 ± 0,72) µmol Trolox mg^{-1} muestra seca, además de presentar una notable pigmentación en sus granos. Adicionalmente, se optimizó una metodología para el análisis espectroscópico del perfil metabólico mediante espectrometría de masas de alta resolución (HRMS), estableciendo las condiciones cromatográficas óptimas en HPLC. Se llevó a cabo el análisis untarget en polaridad positiva de la muestra 9073, identificándose un total de 99 compuestos con coincidencias con fórmulas molecular. De ellos, 53 presentaron coincidencia con bases de datos de rutas metabolicas del maiz, y 41 de ellas fueron identificadas a su vez por el espectro MS/MS y en base a bibliotecas del software utilizado.

A partir de un análisis estadístico de componentes principales, se seleccionaron las variedades de maíz mas diferenciadas nutricionalmente para su análisis metabolómico por HRMS.

Desarrollo preliminar de herramientas instrumentales y de librería de espectros para estudios metabolómicos en tomates

Bruno Silva[1,2]; Andrés Perez[3]; Lucia Pareja[4]

[1]UTEC, ITRSO, Licenciatura en Análisis Alimentario, Paysandú, Uruguay.

[2]Programa de Posgrados de la Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.

[4]Centro Universitario Regional del Este (CURE), Universidad de la República, Rocha, Uruguay.

[3]Departamento de Química del Litoral, Cenur Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú Uruguay.

bruno.silva@utec.edu.uy

El tomate (*Solanum lycopersicum L.*) es una de las hortalizas de mayor consumo a nivel mundial y constituye una importante fuente de metabolitos bioactivos, tales como carotenoides, flavonoides, ácidos fenólicos y compuestos volátiles. Estos compuestos no solo inciden en la calidad organoléptica y nutricional del fruto, sino que también son objeto de creciente interés en el ámbito científico por sus potenciales beneficios para la salud humana (Rafińska et al., 2017; Campa-Pérez et al., 2023). En este contexto, la metabolómica dirigida y no dirigida representa una herramienta clave para la caracterización integral de matrices vegetales, especialmente a través del uso de espectrometría de masas de alta resolución (HRMS) acoplada a cromatografía líquida (Bessaire et al., 2021). El objetivo general de este trabajo es desarrollar y optimizar un método analítico para la detección y caracterización de metabolitos de interés en frutos de tomate mediante LC-HRMS. En esta etapa inicial del proyecto, se ha trabajado a partir de los estándares disponibles en la optimización preliminar de las condiciones instrumentales para mejorar la calidad espectral. Para ello, se empleó un espectrómetro de masas de alta resolución Sciex X500R acoplado a un sistema de UHPLC. Se utilizaron soluciones estándar de referencia de metabolitos seleccionados (ácidos fenólicos, flavonoides y carotenoides), con el fin de ajustar parámetros como el modo de ionización, energía de colisión, voltajes del orificio de entrada y condiciones de desolvatación. Se trabajó en diferentes modos de adquisición optimizando las condiciones para maximizar la intensidad de señal y la fragmentación característica de cada analito (Wu et al., 2024). Como resultado de esta etapa de puesta a punto, se obtuvieron espectros de masas de alta resolución para varios compuestos, los cuales servirán como referencia para futuras búsquedas dirigidas y no dirigidas en extractos de tomate. En esta fase se generó, además, una biblioteca de espectros de masas optimizada y adaptada a las condiciones instrumentales locales, que facilitará la identificación de compuestos en las siguientes etapas experimentales. En conclusión, se logró establecer un método de masas optimizado para los analitos disponibles, que será aplicado próximamente en muestras reales.

Palabras clave: tomate, metabolómica, HRMS, compuestos fenólicos, LC-MS/MS

Desarrollo de una metodología analítica verde para la determinación de nutrientes en frutos de Arazá (*Psidium cattleianum)* mediante espectrometría de fluorescencia de rayos X dispersiva en energía.

Alejandro Schaffner; Javier Silva; Mariela Pistón

Grupo de Análisis de Elementos Traza y Desarrollo de Estrategias Simples para Preparación de Muestras (GATPREM), Química Analítica (DEC), Facultad de Química, UdelaR

schaff_11@hotmail.com

La caracterización de frutos nativos desde el punto de vista de su valor nutricional es relevante en nuestro país. En el caso de frutas, la determinación de elementos esenciales y tóxicos tradicionalmente requiere preparación química intensiva, prolongada y basada en digestiones ácidas, lo que aumenta el costo analítico, la generación de desechos peligrosos y la exposición a reactivos corrosivos.

Con el propósito de responder a esta necesidad, se desarrolló y evaluó una metodología basada en la Espectrometría de Fluorescencia de Rayos X Dispersiva en Energía (EDXRF) para la determinación de micronutrientes en frutos de Arazá del Uruguay. A diferencia de los métodos clásicos, esta técnica permite el análisis multielemental directo en la muestra sólida, eliminando la necesidad de digestiones químicas, reduciendo los costos, el tiempo de análisis y la generación de desechos peligrosos, en línea con los principios de la Química Analítica Verde.

Se optimizaron y validaron métodos para la determinación de Mn, Zn, Fe, K y Cu en muestras de frutos de arazá (*Psidium cattleianum*) proporcionadas por INIA Las Brujas y obtenidas en el mercado local. El protocolo de preparación consistió en secado, molienda y prensado a 30 bar para obtener pellets de 13mm de diámetro seguido de análisis mediante EDXRF. Se empleó un diseño factorial en la optimización de las variables de superficie de irradiación, tiempo de análisis y elección de la línea espectral para cada elemento. En el caso de Zn y Fe, se empleó un enfoque de corrección mediante estándar interno utilizando la intensidad de la fuente de rodio como referencia. Se evaluó la precisión mediante análisis de una muestra compuesta de cuatro submuestras (n=8) y veracidad mediante análisis de un Material de Referencia Certificado (CRM) de origen vegetal y comparando los resultados obtenidos mediante emisión atómica con plasma de nitrógeno (MIP AES) utilizando digestión total como pretratamiento de la muestra.

La precisión (RSD) fue menor al 7 % para Mn, Cu y K, y menor al 22 % para Fe y Zn. Las recuperaciones promedio estuvieron en el rango 80 % y 120 %, para todos los elementos lo que es adecuado para criterios de AOAC. La comparación entre los valores medios obtenidos por EDXRF y mediante digestión con microondas y MIP AES, utilizando el test *t* de Student ($p = 0{,}05$), indicó que no existen diferencias estadísticamente significativas entre ambos enfoques analíticos.

Los niveles determinados en muestras de arazá fueron: Cu: 1,4–1,6 mg kg^{-1}, Zn: 1,1–1,5 mg kg^{-1}, Mn: 3,4–5,0 mg kg^{-1}, Fe: 5,9–7,1 mg kg^{-1} y K: 3110–3610 mg kg^{-1}, los cuales permiten destacar su potencial como fuente de micronutrientes esenciales. El método desarrollado demostró ser simple, rápido y exacto permitiendo la caracterización mineral de muestras de arazá utilizando herramientas analíticas acordes con los principios de la Química Analítica Verde.

Validación de un bioensayo con *Lactuca sativa* para evaluar la toxicidad residual de biomezclas en camas biológicas.

Sofía Rezende[1]; Natalia Besil[1]; Horacio Heinzen[2], María Verónica Cesio[2].

[1]*Grupo de Análisis de Compuestos Traza (GACT), Departamento de Química del Litoral, Cenur Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay*

[2]*GACT, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

srezende@fq.edu.uy

La contaminación puntual por pesticidas se genera en sitios críticos vinculados al manejo de agroquímicos antes y después de su aplicación: preparación de formulaciones, llenado de equipos (como aviones, pulverizadoras, aspersores y fertirriego), y el posterior lavado de estos. Estas actividades producen aguas de lavado con altas concentraciones de pesticidas (mg/L), que en muchos casos no tienen una solución amigable con el ambiente para su deposición. Como medida de mitigación, las BPA recomiendan el uso de camas biológicas para tratar las aguas residuales generadas en estos procesos. Esta tecnología, desarrollada por investigadores suecos, se basa en el uso de una biomezcla compuesta por paja, turba y suelo. Esta biomezcla aportaun consorcio microbiano responsable de degradar los pesticidas, transformándolos en compuestos menos tóxicos o incluso inocuos. Diversos estudios han demostrado la eficacia de esta biotecnología en la degradación de pesticidas de distintas familias químicas.

Las técnicas cromatográficas acopladas a espectrometría de masas, permiten monitorear la degradación de dichos compuestos. Sin embargo, no basta con evaluar la degradación del compuesto original, ya que pueden formarse metabolitos o productos de transformación más tóxicos (M&PT). A esto se suma la limitación instrumental respecto a los límites de cuantificación, la no disponibilidad de estándares analíticos de los M&PT y el costo asociado a los análisis químicos, lo que hace necesario la búsqueda de alternativas para evaluar toxicidad de la biomezcla. Por ello, se propone complementar el análisis con una evaluación de toxicidad que permita verificar la inocuidad de la biomezcla antes de su disposición final en el suelo.

Con este objetivo, se ajustó y validó un ensayo utilizando semillas de *Lactuca sativa* (var. mantecosa), siguiendo las directrices de la OECD. La validación se realizó mediante una carta control con semillas comerciales certificadas, utilizando $ZnSO_4$ como positivo de referencia. Se emplearon diluciones logarítmicas (1000–0.01 mg/L) más un control negativo, en quintuplicado según lo establecido por la EPA. La CE_{50} frente al tóxico se calculó mediante curvas dosis-respuesta usando el software RStudio, estableciendo los límites de confianza (promedio ± 2σ).

Una vez validada la metodología, se evaluó la toxicidad de los elutriados obtenidos de tres biomezclas de distinta composición luego de un año de operación de las camas biológicas. Se incluyeron controles positivos y negativos. Se evaluó la germinación y el crecimiento radicular de las semillas, calculándose el Índice de Germinación Normalizado y el Porcentaje Relativo de Germinación de Semillas, y se realizó un test de comparaciones multiples para evaluar diferencias entre las muestras evaluadas y los controles. Este ensayo representa una herramienta complementaria al análisis químico, económica y de sencilla implementación, que puede ser utilizada por los productores para evaluar el funcionamiento de sus camas biológicas, para tomar la decisión de cambio y disposición de la biomezcla con seguridad.

Evaluación de Elementos Potencialmente Tóxicos en sedimentos de Arroyos Urbanos en Uruguay.

Sofía Da Rocha[1,2]; Eliana Daleve[2], Andrés Saracho[2], Diego Llona[3]; Pablo Gamazo[2], Valery Bühl[4]; Elena Alvareda[2]

[1]Programa de Posgrado, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

[2]Departamento del Agua, CENUR Litoral Norte, UdelaR, Salto, Uruguay

[3]Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, UdelaR, Paysandú, Uruguay

[4]Química Analítica, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

sdarochacarballo@gmail.com

El estudio de sedimentos de arroyos urbanos es fundamental para comprender el impacto temporal y dinámicas de contaminantes provenientes de actividades antropogénicas. Parámetros como pH, fósforo total (FT), carbono orgánico (CO) y granulometría, permiten interpretar procesos de adsorción, movilidad y biodisponibilidad de ciertos Elementos Potencialmente Tóxicos (EPT).[1] Antecedentes publicados revelan presencia en agua de FT (20,0–178,5 ug L^{-1}), nitrógeno total (0,2–1,8 mg L^{-1}), zinc (15,4–396,0 ug L^{-1}) y cromo (3,1 ug L^{-1}) en sitios de la cuenca del Arroyo San Antonio (SA).[2] En cuanto a sedimentos, se monitorean sitios en cinco ciudades de Uruguay, en el marco de una Tesis de Maestría de FQ. Este trabajo presenta avances de Tesis, donde se estudiaron 24 sitios. Se determinaron y cuantificaron niveles de Zn, Ni y Pb, obteniéndose los siguientes resultados: 3,39–262,7 mg Zn kg^{-1}, 3,78–71,5 mg Pb kg^{-1}, 0,59–24,0 mg Ni kg^{-1}. Éstos se compararon con la normativa de referencia que establece *Lowest Effect Level* (LEL) y *Severe Effect Level* (SEL).[3] En algunas muestras, se excedió el LEL (120 mg kg^{-1}, 16 mg kg^{-1} y 31 mg kg^{-1} para Zn, Ni y Pb, respectivamente). También se analizó pH, FT, CO, obteniendo los siguientes resultados: pH (6,08–7,87), CO (3,35–4,52 %) y FT (1,9–67 mg g^{-1}). Este estudio constituye un aporte inicial al monitoreo de sedimentos en arroyos urbanos de Uruguay.

Referencias

[1] Alvareda, E., Gimenez, M., Ramos, J., Borrero, A., Texo, A., Bessone, L., ... & Gamazo, P. (2025). Hydrochemical analysis and evaluation of water quality in the Salto-Arapey aquifer and San Antonio Creek, Salto, Uruguay, as a diagnosis for water resources management. Environmental Monitoring and Assessment, 197(6), 674.

[2] Alvareda, E., Lucas, C., Paradiso, M., Piperno, A., Gamazo, P., Erasun, V., ... & de Mello, F. T. (2020). Water quality evaluation of two urban streams in Northwest Uruguay: are national regulations for urban stream quality sufficient?. Environmental monitoring and assessment, 192(10), 661.

[3] Guidelines for Identifying, Assessing and Managing Contaminated Sediments in Ontario. Canada (2008).

Análisis de ortofosfato en aguas naturales mediante Flow-Batch-SIA

Karen Rindzinski; Juan Rodriguez

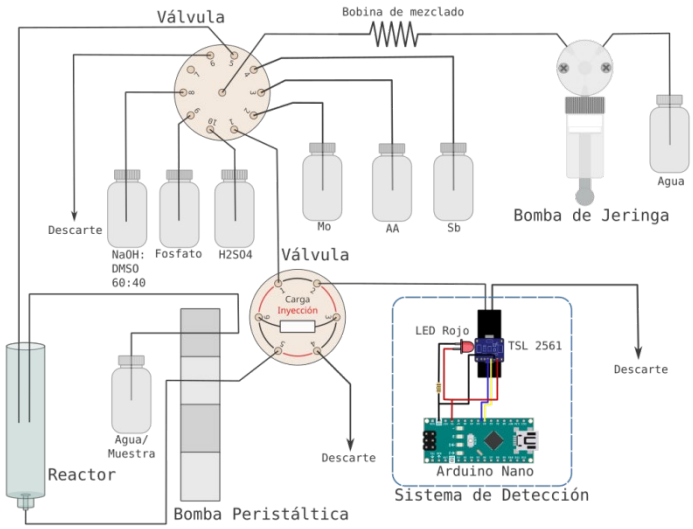
Química Analítica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.

karenrindzinskifalero@gmail.com

El ortofosfato en concentraciones traza (μgL^{-1}) en aguas superficiales es un indicador clave en el monitoreo ambiental, ya que su presencia en niveles elevados puede acelerar la eutrofización, afectando negativamente la calidad del agua y los ecosistemas acuáticos. En nuestro país, la eutrofización es una problemática creciente, especialmente en cursos de agua como los ríos Santa Lucía y Uruguay.[1] Frente a este escenario, se requieren métodos analíticos sensibles, confiables y automatizables para el monitoreo eficiente del ortofosfato en aguas naturales.

En este trabajo se optimizó y validó una metodología flow-batch con preconcentración en línea, basada en análisis por inyección secuencial (SIA), para la determinación automatizada de ortofosfato en aguas superficiales. El sistema utiliza como reactor una jeringa de 50 mL modificada, donde se desarrolla la reacción de formación del azul de molibdeno. El complejo formado se retiene mediante una extracción en fase sólida (SPME) sobre una minicolumna de resina HLB conectada como loop en una válvula inyectora. La elución hacia el detector espectrofotométrico se realiza con una mezcla de DMSO:NaOH (0,15 M) 6:4 (v/v).

Se optimizaron variables operativas clave como el volumen de muestra para desarrollo de color, el volumen y el flujo de carga hacia la columna, la composición del eluyente, y el volumen y flujo de elución. El método mostró un comportamiento lineal en el rango hasta 180 μgL^{-1}, límites de detección y cuantificación de 10 y 33 μgL^{-1} respectivamente, recuperaciones en muestras reales de agua superficial de 105% y repetibilidad (RSD) de 9%, lo que lo posiciona como una alternativa viable para el monitoreo ambiental automatizado del ortofosfato. En la figura se presenta el esquema del sistema.



[1] Gorgoglione, A., Gregorio, J., Rios, A., Alonso, J., Chreties, C., & Fossati, M. (2020). Influence of land use/land cover on surface-water quality of Santa Lucìa river, Uruguay. Sustainability, 12(11), 4692. [2] Ma, J., Yuan, D., & Liang, Y. (2008). Sequential injection analysis of nanomolar soluble reactive phosphorus in seawater with HLB solid phase extraction. Marine Chemistry, 111(3-4), 151-159.

Optimización y validación de un método para la determinación de arsénico en pescado y camarón de la Laguna de Castillos

Juan Gularte; Nataly Rodríguez; Fiorella Iaquinta

Área Química Analítica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

juangularte6@gmail.com

El arsénico (As) se distribuye ampliamente en la corteza terrestre, tanto en su forma elemental como en forma de iones inorgánicos, siendo las especies predominantes el arsenito (As en estado de oxidación +3) y el arseniato (en estado de oxidación +5).

Múltiples efectos adversos a la salud han sido atribuidos a la ingesta crónica de formas inorgánicas de arsénico, cuya principal vía de exposición a la población es a través de la dieta1. Resulta entonces indispensable contar con métodos validados, confiables y accesibles para su determinación en organismos destinados al consumo.

En el presente trabajo, se presenta la optimización y validación de una metodología analítica para la determinación de As en pescado y camarón proveniente de la Laguna de Castillos (Rocha, Uruguay). Para ello, se trabajó con material de referencia certificado (CRM) de hígado de pescado y de camarón, realizando una digestión ácida asistida con microondas con HNO3 (4,8 mol L-1). Durante la optimización, las concentraciones de NaBH4, NaOH y HNO3 se identificaron como factores críticos para el desempeño del método y fueron objeto de estudio. Finalmente, la concentración adecuada de HNO3 para el análisis fue de 0,7 mol L-1 y la reducción óptima del analito, realizada en dos etapas, consistió en una prerreducción con HCl 12 mol L-1 y KI 20% (m v-1) durante una hora a temperatura ambiente seguida de una reducción en línea con NaBH4 3,5% (m v-1) en NaOH 0,5 % (m v-1). La determinación analítica se realizó mediante la técnica de espectrometría óptica de emisión atómica con plasma de nitrógeno inducido por microondas acoplado a generación de hidruros a 193,695 nm (HG-MP AES).

Para la validación se evaluó linealidad, veracidad, precisión, límite de detección y de cuantificación. La linealidad estudiada mediante inspección visual y coeficiente de determinación (R2) se verificó desde 2,40 µg L-1 hasta 20,00 µg L-1, los patrones se realizaron en la misma acidez que las muestras. La veracidad se estudió utilizando el CRM, siendo la cifra de mérito calculada el porcentaje de recuperación (%R) del valor certificado, y la precisión, estudiada con muestras, fue expresada como RSD (%). Las cifras de mérito obtenidas fueron: para linealidad R2 mayor a 0,99 (I = 31,538*C + 37,142), precisión 5% (RSD) en pescado (n=6) y 10% (RSD) en camarón (n=4) y recuperación entre 78-103% (pescado) y 71-88% (camarón) (n=6). Los límites de detección y cuantificación obtenidos fueron 0,086 mg kg-1 y 0,29 mg kg-1, respectivamente. Las características de desempeño de la metodología se consideran adecuadas para el fin propuesto.

Referencias: 1 Cubadda, F., Jackson, B. P., Cottingham, K. L., Van Horne, Y. O., & Kurzius-Spencer, M. (2017). Human exposure to dietary inorganic arsenic and other arsenic species: State of knowledge, gaps and uncertainties. En: Science of the Total Environment, 579, pp.1228–1239.

Síntesis, caracterización y evaluación biológica de nuevos derivados de *paullonas*

Pilar Terra[1,2]; Rodrigo Moreira[2], Diego Benítez[1]; Oliver Orban[3], Irina Ihnatenko[3], Conrad Kunick[3], Matthias Schiedel[3], Dinorah Gambino[2]; Marcelo Comini[1]; Gonzalo Scalese[1,2]

[1]*Laboratorio de Biología Redox de Tripanosomas, Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay*

[2]*Área Química Inorgánica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[3] *Institut für Medizinische und Pharmazeutische Chemie, and Zentrum für Pharmaverfahrenstechnik (PVZ), Technische Universität Braunschweig, Alemania*

pterra@pasteur.edu.uy

Parásitos unicelulares del género *Trypanosoma* y *Leishmania* producen enfermedades incapacitantes y letales en el ser humano y ganado. Años de investigación en el área nos llevaron a identificar a las *paullonas* (Figura 1A) como un andamio estructural privilegiado contra tripanosomátidos, particularmente por su capacidad de inhibir la biosíntesis de tripanotión. La relación estructura-actividad sugiere que la sustitución en el N^5 es clave para la actividad inhibitoria. En este trabajo, se sintetizó y caracterizó una nueva hidrazida derivada de la 3-clorokenpaullona, diseñada como precursora de ligandos tridentados capaces de formar complejos metálicos (P_1, Figura 1B). Esta hidrazida fue funcionalizada con un fragmento de 5-bromosalicilaldehído para coordinar un centro de dioxovanadio(V) (P_2, Figura 1C). Las condiciones de síntesis fueron optimizadas para lograr pureza y rendimiento adecuados, y la caracterización estructural se llevó adelante utilizando análisis elemental y espectroscopías de infrarrojo y de resonancia magnética nuclear. Los derivados obtenidos fueron evaluados frente a la forma infectiva de *T. brucei* (tripomastigotas sanguíneos) y la forma intracelular de *Leishmania infantum* (amastigotas) utilizando un ensayo de bioluminiscencia. Se analizó la toxicidad inespecífica de los compuestos sobre macrófagos murinos (J774). Se detectaron compuestos más activos y selectivos que las estructuras de partida frente a los distintos patógenos. La integración de los resultados biológicos, fisicoquímicos y enzimáticos permitirá profundizar en la relación estructura-actividad y retroalimentar el diseño racional de nuevos compuestos dirigidos a blancos moleculares específicos en tripanosomátidos.

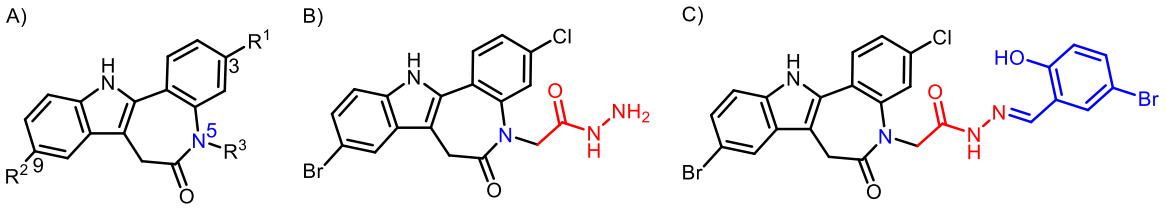


Figura 1. A) Estructura base de las *paullonas*; B) 3-clorokenpaullona N^5-hidrazida (P_1); C) ligando tridentado obtenido por condensación de P_1 con 5-bromosalicilaldehído (P_2)

Establecimiento de una biblioteca de espectros NIR de Especialidades Farmacéuticas comercializadas en el mercado uruguayo

Juan Barbagelata

Area de Tecnología Farmacéutica y Control de Calidad de Medicamentos, CIENFAR, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

jbarbagelata@fq.edu.uy

La espectroscopía en el infrarrojo cercano (NIR) es una técnica rápida y no destructiva, con múltiples aplicaciones en la industria farmacéutica, destacándose su uso para ensayos de identificación de materias primas. También puede emplearse para la identificación de especialidades farmacéuticas. Este uso, si bien no presenta gran aplicación en los controles de la industria, podría ser una herramienta eficaz en el caso de autoridades sanitarias para la identificación de productos falsificados, problemática que afecta gravemente a varios países de la región, aunque, afortunadamente, Uruguay se encuentra libre de esta situación.
Se plantea como objetivo desarrollar una biblioteca espectral basada en espectroscopía NIR, y métodos quimiométricos rápidos, que permitan la identificación de productos farmacéuticos mediante la comparación con los espectros registrados en dicha biblioteca.
Empleando un analizador Thermo Scientific Antaris II DR, se recolectaron los espectros en el infrarrojo cercano a partir de comprimidos y cápsulas intactas, registrando un mínimo de 10 espectros por producto. A partir de estos espectros se desarrolló un modelo de Análisis de Componentes Principales (PCA) utilizando el software TQ Analyst 9.12, para identificar las muestras mediante clasificación por similitud espectral. El desempeño del modelo fue evaluado a partir de su capacidad de clasificar correctamente los espectros incluidos en la biblioteca.
Hasta el momento se ha construido una biblioteca con espectros NIR de 57 formulaciones farmacéuticas diferentes. El sistema mostró una alta capacidad de identificación, presentando solo 20 fallos de clasificación en los más de 600 espectros almacenados. Estos errores se observaron principalmente en el caso de comprimidos cuyas distintas dosis se obtienen por compresión de diferentes masas de la misma mezcla de polvo o identificación cruzada entre distintos comprimidos placebos presentes en productos anticonceptivos.
El método desarrollado constituye una herramienta rápida y eficaz para la identificación de especialidades farmacéuticas. Si bien se encontraron limitaciones en su uso, estas pueden superarse complementando el análisis espectral con una inspección visual del aspecto de la muestra frente a un registro preestablecido. Se planea continuar ampliando la biblioteca de espectros a un mayor número de productos. La generación de este repositorio espectral aporta una base de datos estructurada y confiable, que puede ser utilizada para futuros estudios, incluyendo el desarrollo de métodos orientados a la detección de productos falsificados ante una eventual aparición en el mercado.

El autor del trabajo agradece a PEDECIBA-Química y al CeFI, Facultad de Química, Universidad de la República.

Estudio *in silico* del mecanismo de acción de selenosemicarbazonas y derivados metálicos inhibidores de Mpro de SARS-CoV-2

Santiago Rostán[1]; Alexia Clavijo[2], Jonathan Bastidas[3], Santiago Ruatta[3], Martín Fló[4], Andrea Medeiros[3], Marcelo Comini[3], Lucía Otero[1], Graciela Mahler[2], Nicolás Veiga[1]

[1]*Área Química Inorgánica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Química Farmacéutica Inorgánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[3]*Laboratorio de Biología Redox de tripanosomátidos, Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay*

[4]*Laboratorio de Inmunovirología, Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay*

srostan@fq.edu.uy

Desde el comienzo de la pandemia COVID-19 ocasionada por el virus SARS-CoV-2 en marzo de 2020, la proteasa principal (MPro), proteína que tiene un rol fundamental en la replicación y transcripción del virus, se ha posicionado como un blanco validado para el desarrollo de potenciales moléculas activas. Nuestro grupo de investigación ha trabajado en el desarrollo de numerosos compuestos como candidatos para la inhibición de esta enzima. En particular, se ha preparado una serie de selenosemicarbazonas (SeSC), muchas de las cuales presentaron una destacada actividad inhibitoria de la MPro recombinante (resultados no publicados). Por otro lado, como estrategia para mejorar su capacidad inhibitoria contra esta enzima, se ensayaron complejos de SeSC con Pd(II) como metal central. La mayoría de los compuestos de coordinación presentaron actividades inhibitorias significativamente inferiores que la de los ligandos libres. Por ejemplo, el complejo de fórmula [Pd(CP224)PPh3] tuvo una potencia (IC50 > 25 µM) al menos 50-veces inferior a la SeSC libre (CP224 IC50 0,38 µM). Con el fin de explicar los resultados obtenidos y elucidar los posibles mecanismos de inhibición de esta enzima por las SeSC, empleamos metodologías de DFT y anclaje molecular. En particular, para la SeSC más activa, CP224, y en base a estudios bioquímicos que sugieren unión covalente, hemos propuesto dos posibles mecanismos de inhibición de Mpro (Figura 1A y 1B). Hasta el momento, los estudios computacionales indicarían que el ataque nucleofílico del tiol al selenocarbonilo (1A) es el aducto más probable. Actualmente el sistema está siendo sometido a análisis para determinar los potenciales estados de transición. Respecto a los estudios de anclaje molecular realizados para el complejo [Pd(SeSC)PPh3] (Figura 1C), los resultados muestran que el grupo PPh3 se haya orientado hacia el residuo de cisteína catalítico (CYS145) de MPro, impidiendo estéricamente la interacción covalente con la SeSC o con el metal Pd. Esto explicaría la baja actividad inhibitoria de este complejo sobre ésta enzima del virus.

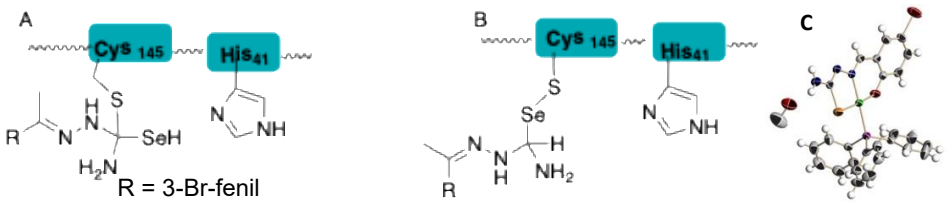


Figura 1. A y B: posibles esquemas de unión covalente de CP224 a la CYS145 de Mpro. C: estructura cristalina de un complejo [Pd(CP224)PPh3] estudiado.

Puntos cuánticos de grafeno funcionalizados: síntesis optimizada y evaluación de su rendimiento fotoluminiscente para aplicaciones analíticas

Rocío Lima[1]; Victoria Panzl[1]; David Menchaca[1]; Alejandra Rodríguez-Haralambides[1]

[1]Laboratorio de Química Bioanalítica, Instituto Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, Universidad de la República, Pando, Uruguay

rociodelmarlima@fq.edu.uy

Los puntos cuánticos de grafeno (GQDs, por sus siglas en inglés) constituyen una clase de nanomateriales derivados del grafeno que presentan propiedades ópticas sobresalientes, en particular una intensa fotoluminiscencia, atribuida a su reducido tamaño y al grado de funcionalización superficial. Estas características los convierten en herramientas analíticas prometedoras para el desarrollo de métodos alternativos basados en la extinción (quenching) de la señal fluorescente por interacción con analitos específicos [1,2]. Los GQDs se evaluaron como sondas fluorescentes para la detección de ácidos clorogénicos en matrices complejas, como infusiones de yerba mate y café. En este trabajo se abordó la síntesis de GQDs mediante distintas metodologías, incluyendo pirólisis/exfoliación, tratamiento hidrotermal en baño de aceite, tratamiento hidrotermal en reactor cerrado y reacción en autoclave.

Se emplearon como precursores ácido cítrico (fuente de carbono), urea (fuente de nitrógeno) y glutationa (agente de funcionalización con nitrógeno y azufre), con el objetivo de obtener GQDs dopados con N y S (N,S-GQDs). Se estudió el efecto de variables como la temperatura, el tiempo de reacción, las relaciones molares entre los precursores y el tipo de síntesis sobre las propiedades ópticas de los nanomateriales obtenidos.

La caracterización de los GQDs se realizó mediante espectroscopía de fluorescencia (fluorímetro Shimadzu RF-3001 PC), dispersión dinámica de luz (DLS, Zetasizer Malvern Panalytical) y microscopía electrónica, con el fin de evaluar su comportamiento fotoluminiscente, tamaño hidrodinámico, microestructura y morfología. El rendimiento cuántico (QY) se determinó empleando sulfato de quinina como estándar fluorescente, y se construyeron curvas de calibración utilizando ácido clorogénico (CGA) como analito modelo.

Las formulaciones obtenidas mostraron variaciones significativas en su rendimiento cuántico, destacándose aquellas sintetizadas en autoclave a 180 °C con glutationa, que alcanzaron QY de hasta 82,3 %. Los GQDs desarrollados demostraron adecuada estabilidad y sensibilidad para la cuantificación de ácidos clorogénicos en infusiones de yerba mate.

Referencias

[1] Zhu Han, Li He, Shuang Pan, Hui Liu, Xiaoli Hu. (2020). Hydrothermal synthesis of carbon dots and their application for detection of chlorogenic acid. Luminescence, 9-1. https://doi.org/10.1002/bio.3803

[2] Liu, Q., Dong, Z., Hao, A., Guo, X., & Dong, W. (2021). Synthesis of highly fluorescent carbon dots as a dual-excitation rationmetric fluorescent probe for the fast detection of chlorogenic acid. Talanta, 221, 121372. https://doi.org/10.1016/j.talanta.2020.121372

Desarrollo de detectores de radiación basados en BiSI/Carbono: Optimización de composición y tratamiento térmico

Martina Viera[1]; Maia Mombrú Frutos[1]; Javier Pereyra[2]; Ivana Aguiar[1]

[1]*Área Radioquímica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Instituto de Física, Facultad de Ingeniería, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

mviera@fq.edu.uy

Los detectores de semiconductores ofrecen ventajas frente a las tecnologías tradicionales como mayor sensibilidad, resolución energética y portabilidad. Además, los de semiconductores compuestos pueden operar eficientemente a temperatura ambiente. Esta investigación se centra en la fabricación de pellets de un nanocompósito de BiSI y carbono amorfo y el estudio de detectores fabricados con estos pellets. Se fabricaron pellets de nanocompósito con dos relaciones de BiSi:C, 90:10 y 75:25 sometidos a tratamiento térmico in situ (durante el prensado) y ex situ (posterior). Los materiales de partida y los pellets se caracterizaron por difracción de rayos X de polvo (DRX). Se confirmó la formación de una única fase de BiSI, estable después de ambos tratamientos térmicos. La microscopía electrónica de barrido (SEM) reveló que el polvo inicial consiste en nanovarillas de 300 nm de ancho y partículas de carbono amorfas de 5,7 µm de diámetro en promedio. Mediante SEM se observó la coalescencia de las partículas de carbono en los pellets con tratamiento térmico in situ, en la superficie y en el interior; no así para los pellets tratados ex situ. A partir de los pellets obtenidos se fabricaron prototipos de detectores. Se caracterizaron mediante curvas de corriente-voltaje (I-V), en oscuro y en exposición a fuentes de luz visible. Se obtuvieron valores de corriente oscura menores cuando la proporción de carbono es mayor, y valores de resistividad del orden de 10^9-10^{11} Ω·cm. La siguiente etapa consistirá en evaluar la respuesta de los dispositivos a rayos X de baja energía, con el objetivo de avanzar hacia futuras aplicaciones.

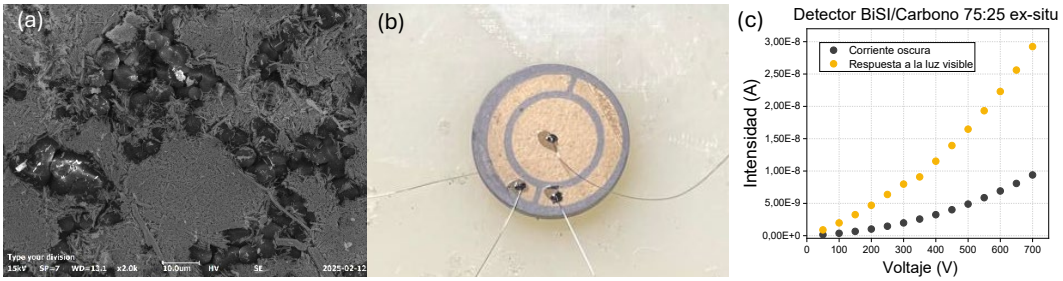


Figura 1. **(a)** Imagen SEM de la superficie de un pellet BiSI:C (90:10, ex situ). **(b)** Prototipo del dispositivo detector fabricado de BiSI:C (75:25, ex situ). **(c)** Curva I-V del detector de BiSI:C (75:25, *ex situ*) comparando la respuesta en oscuridad y bajo iluminación.

Referencias:

Shrestha, S., Fischer, R., Matt, G. et al. Nature Photon 11, 436–440 (2017).

Maia Mombrú Frutos et al. Nanotechnology 31, 225710 (2020).

Transformación topotáctica de films de Bi_2S_3 por deposición química de vapor

Maia Mombrú Frutos[1]; Heinkel Bentos Pereira[2]; Laura Fornaro[2]; Ivana Aguiar[1]

[1]Área Radioquímica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

[2]Departamento de Desarrollo Tecnológico, Centro Universitario Regional del Este, Universidad de la República, Rocha, Uruguay

maiam@fq.edu.uy

Los films basados en semiconductores de bismuto están siendo estudiados para varias aplicaciones tecnológicas, como por ejemplo en celdas solares[1], fotodetectores[2], y detectores de radiación ionizante[3], debido a sus prometedoras propiedades optoelectrónicas[4]. Además, estos compuestos tienden a tener morfologías uniaxiales o laminares debido a sus estructuras cristalinas, lo que hace interesante diseñar estrategias de crecimiento de films que permitan obtener orientaciones de los cristales sobre el sustrato que favorezcan el transporte de cargas.

En este trabajo, se propone la estrategia de depositar nanovarillas de Bi_2S_3 perpendiculares al sustrato, mediante pirólisis en spray. El film fue caracterizado por microscopía electrónica de barrido (SEM) y difracción de rayos X (XRD). Luego se transforman las nanovarillas del sulfuro por reacción con I_2 o BiI_3 sublimados, donde por la deposición química de vapor se obtienen films de compuestos de bismuto yodados. De esta forma, el Bi_2S_3 proporciona una plantilla auto sacrificable a partir de la cual se mantiene la orientación original.

Utilizando I_2 siempre se da la transformación completa de Bi_2S_3 a BiI_3, determinado por XRD, en los rangos de temperatura entre 100 y 150 ^oC. Por otro lado, cuando se utiliza BiI_3, se da la reacción a BiSI, y como ambos compuestos tienen estructura uniaxial, la orientación perpendicular al sustrato se mantiene, determinado por XRD y SEM. En este caso, la cantidad de BiI_3 influye en el producto obtenido, siendo que existe una cantidad óptima que permite que reaccione todo el Bi_2S_3 a BiSI, y a la vez que no se deposite BiI_3 excedente sobre el BiSI formado.

Es así que se puede diseñar un método de dos pasos, que permite obtener nanovarillas orientadas de BiSI a partir de la transformación topotáctica de Bi_2S_3 mediante su reacción con BiI_3.

Referencias:

[1] Y. Wu, B. Zhou, C. Yang, X. Zhou, W.-H. Zhang, Chem. Commun. Chem. Commun 53 (2017) 5445–5448.

[2] S. Farooq, T. Feeney, J.O. Mendes, V. Krishnamurthi, S. Walia, E. Della Gaspera, J. van Embden, Adv Funct Mater 31 (2021) 2104788.

[3] S. Nambiar, E.K. Osei, J.T.W. Yeow, Sci Rep 5 (2015) 9440.

[4] R.E. Brandt, V. Stevanović, D.S. Ginley, T. Buonassisi, MRS Commun 5 (2015) 265–275.

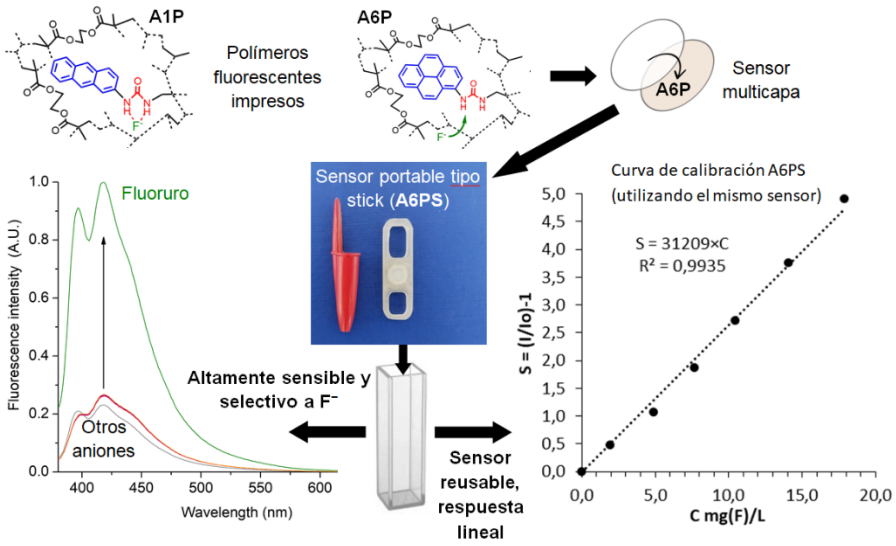
Nuevos sensores portables para el monitoreo de fluoruro en agua

Juan Rodriguez[1,2]; Delfina Quiñone[2,3]; Margarita Brovetto[4]; Moisés Knochen[1]; Julia Torres[3]; Nicolás Veiga[3]

[1]*Química Analítica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*
[2]*Programa de Posgrado en Química, Facultad de Química, UdelaR, Uruguay.*
[3]*Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*
[4]*Laboratorio de Síntesis Orgánica, DQO, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*

jcrodriguez@fq.edu.uy

El fluoruro en aguas naturales es un problema sanitario global: aunque es esencial para la salud dental, en altas concentraciones resulta tóxico.[1] Esta dualidad subraya la necesidad de sensores portátiles, selectivos y económicos para su monitoreo *in situ*. En nuestro grupo desarrollamos dos polímeros fluorescentes, **A1P** y **A6P**, impresos molecularmente, cuya emisión cambia al agregar fluoruro en agua. **A1P** destacó por su buena sensibilidad, selectividad, reutilización y valores de recuperación en muestras reales.[2] **A6P**, sin embargo, resultó menos selectivo a fluoruro. Para mejorar el desempeño de ambos polímeros y generar con ellos sensores portátiles, se inmovilizaron en dispositivos multicapa, los que se montaron en soportes tipo *stick* (**A1PS** y **A6PS**). Estos *sticks* se disponen de forma diagonal en la celda de medida, y mostraron alta sensibilidad (K_{SV} = 3156 y 5242 M^{-1}, respectivamente) y excelente reusabilidad. **A6PS** se destacó como el de mejor desempeño, combinando una selectividad muy alta para el fluoruro, respuesta rápida, excelente recuperación (102 ± 6 %) y un rango de trabajo (164–942 µM) alineado con las directrices internacionales, lo que lo convierte en una herramienta prometedora para el monitoreo de fluoruro en agua.



[1] S. Srivastava and S. J. S. Flora, *Current Environmental Health Reports*, **2020**, 7, 140.
[2] D. Quiñone, G. M. Romano, R. Faccio, M. Savastano, A. Bianchi, A. Bencini, M. Brovetto, J. Torres and N. Veiga, *Small*, **2024**, 20, 2402696.

Agradecimientos: PEDECIBA, ANII, CSIC y CAP (BDMX_2022_1)

Síntesis de derivados de etinilestradiol capaces de coordinar ^{99m}Tc, con aplicación en cáncer de mama RE^{+}

Serena Silva Borghi[1]; Daniela Gamenara[1]; Ana Rey[2]; Ma. Emilia Tejería[2]; Gonzalo Carrau[1]

[1]*Laboratorio de Síntesis Orgánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, UdelaR*

[2]*Área Radioquímica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, UdelaR.*

serusbf@gmail.com

El cáncer de mama es un problema de salud pública mundial que afecta principalmente a mujeres. Cerca del 70 % de los tumores sobreexpresan el receptor de estrógeno (RE), lo que permite aplicar terapias hormonales específicas. La Medicina Nuclear ofrece herramientas diagnósticas valiosas mediante la administración de radiofármacos que permiten el seguimiento de la terapia hormonal a través de imágenes visualizando toda la masa tumoral, superando las limitaciones de métodos tradicionales. Actualmente, el radiofármaco [^{18}F]FES aprobado por la FDA cumple esta función, pero presenta limitaciones técnicas y económicas que dificultan su acceso.

Este trabajo se enmarca en un proyecto que busca desarrollar radiofármacos derivados de estradiol de ^{99m}Tc, un radionucleido económico y disponible localmente, para facilitar el acceso a diagnósticos precisos y al seguimiento terapéutico accesible, mejorando la atención en cáncer de mama. En este sentido, y basados en antecedentes del grupo de investigación, nos propusimos sintetizar una nueva serie de ligandos partiendo de etinilestradiol comercial, derivatizándolo a nivel del triple enlace terminal, para introducir un grupo funcional ditiocarbamato capaz de coordinar al radiometal (Figura 1). Con esta quimioteca buscamos obtener ligandos variando la longitud de la cadena espaciadora entre la biomolécula y la unidad quelante (n=4 o 6, Figura 1). Asimismo, pretendemos comparar la estabilidad del grupo ditiocarbamato obtenido a partir de aminas primarias y secundarias.

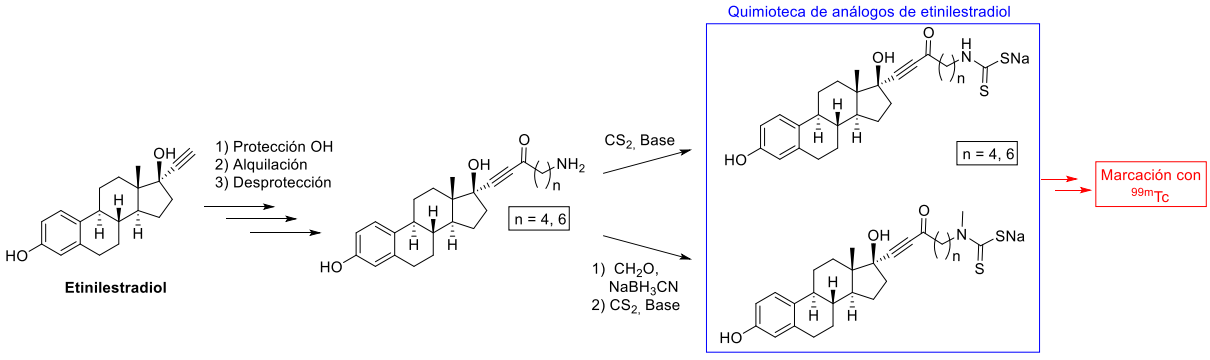


Figura 1: Síntesis de análogos de etinilestradiol

Agradecimientos: ANII (FMV_3_2024_1_180485) y PEDECIBA.

Referencia Bibliográfica:

(1) O'Brien, S. R.; Edmonds, C. E.; Lanzo, S. M.; Weeks, J. K.; Mankoff, D. A.; Pantel, A. R. ^{18}F-Fluoroestradiol: Current Applications and Future Directions. RadioGraphics 2023, *43* (3), e220143. https://doi.org/10.1148/rg.220143.

Ciclación de Prins promovida por TiF_4 para la producción de tetrahidropiranos fluorados

Vanesa Quintana; Natalia Díaz; Guillermo Valdomir

Laboratorio de Química Farmacéutica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo

vquintana@fq.edu.uy

Los tetrahidropiranos (THP), son un tipo de anillo que se encuentra frecuentemente en estructuras de fármacos oncológicos de uso clínico como por ejemplo eribulina (cáncer de mama), gilteritinib (leucemia) y venetoclax (leucemia). A su vez, nuestro grupo tiene experiencia en la preparación de THP y derivados que, en ensayos contra células de cáncer humanas, han presentado resultados promisorios, especialmente en el caso de compuestos híbridos. [1]

Para la síntesis de estos anillos hemos utilizado la ciclación de Prins con ácidos de Brønsted o de Lewis como promotores, y si bien se han ensayado muchos sustituyentes distintos, hasta el momento no habíamos tenido en cuenta al flúor. El flúor es un átomo pequeño, electronegativo y con capacidad de modificar la lipofilia y la estabilidad metabólica. En los últimos años está cobrando un peso cada vez más importante en el diseño racional de fármacos y se encuentra en varios fármacos oncológicos de uso clínico como capecitabina, crizotinib, sorafenib y sunitinib. [2]

Investigando la reacción de Prins para sintetizar THP halogenados encontramos que la versión fluorada de esta transformación ha sido escasamente explorada, y que no existen antecedentes del uso de enol éteres como precursores, estrategia que ha sido central en nuestros trabajos anteriores. Por esto nos propusimos desarrollar una metodología adecuada para la síntesis de nuevos THP con un átomo de flúor en la posición 4, a partir de enol éteres previamente sintetizados por nuestro grupo, y de TiF_4 como agente promotor de la ciclación y dador de F^-, para evaluar luego la efectividad y eficiencia de esta nueva estrategia sintética (Figura 1).

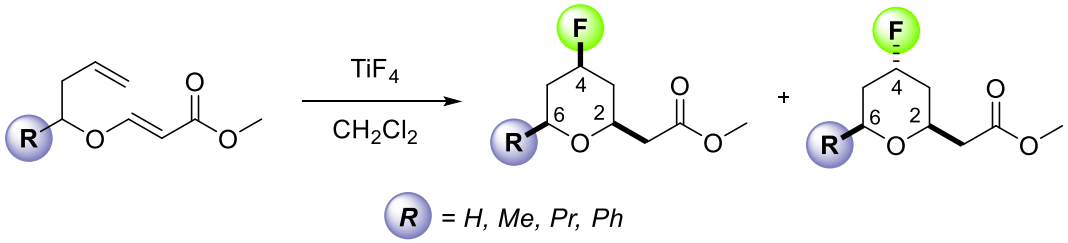


Figura 1. Ciclación de Prins de enol éteres promovida por TiF_4.

[1] Quintana, V. et al. *Arch. Pharm*. **2024**, *357*, 11, e2400431
[2] Gillis, E. P. et al. *J. Med. Chem*. **2015**, *58*, 8315-8359

Estudio del desempeño de diferentes excipientes para la obtención de pellets por extrusión-esferonización

Gastón Arboleya[1]; Josefina Menéndez[1]; Solange Montero[1]; Alejandra Schölderle[1]; Juan Gabriel Garmendia[1]; Federico Rosano[1]; Emiliana Botto[2]; María Luisa Rodríguez[1,2]

[1]Laboratorio de Biofarmacia y Tecnología Farmacéutica, Instituto Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, Universidad de la República, Pando, Uruguay

[2]Laboratorio de Farmacotecnia, Departamento de Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

jgabrielgr.87@gmail.com

Los pellets obtenidos por extrusión-esferonización (EE) son sistemas multiparticulados que ofrecen numerosas ventajas respecto de otras formas farmacéuticas (FF). Sus características físicas los convierten en una opción atractiva para el desarrollo de formulaciones de liberación modificada. La liberación de los fármacos desde este tipo de FF está influenciada, entre otros factores, por los excipientes utilizados para su elaboración. En el escenario actual, la celulosa microcristalina (MCC) es un excipiente ampliamente empleado para la fabricación de pellets de calidad apropiada ya que favorece la esfericidad y resistencia mecánica. Sin embargo, presenta ciertas limitaciones, entre ellas: fuerte adsorción de fármacos, retraso en la liberación de principios activos poco solubles y nula capacidad de controlar la liberación de los ingredientes activos [1]. El presente trabajo propone el desarrollo de pellets elaborados por EE, evaluando la incorporación de diferentes excipientes con el objetivo de obtener una liberación controlada de fármacos. Se aplicó un enfoque de Calidad por Diseño (QbD) según las directrices de la ICHQ8 para el Desarrollo Farmacéutico [2]. En una primera instancia, se definió el Perfil de Calidad del Producto Objetivo (QTPP), lo que permitió identificar los atributos críticos de calidad (CQAs). Se realizó un análisis de riesgos mediante un diagrama de Ishikawa y un cuadro de valoración de riesgos, identificándose los factores de formulación y proceso con mayor impacto en los CQAs. Para los estudios de formulación, se realizó un cribado inicial (estudio unifactorial) que permitió seleccionar los excipientes y parámetros de proceso necesarios para obtener pellets con buenas características fisicoquímicas. Posteriormente, se diseñó un estudio factorial fraccionado 2^(5-1) para evaluar los factores: tipo y cantidad de formador de matriz no hinchable, tipo de diluyente soluble e insoluble, y cantidad de agente granulante. Se elaboraron 17 corridas, incluyendo una repetición. Como respuestas del DoE se estudiaron el rendimiento del proceso (70-95%), la cantidad de líquido para la humectación (entre 13 y 19 mL), la esfericidad (entre 0,75 y 1,00), distribución de tamaño de partícula (entre 625 y 2240 µm) y la densidad aparente de los pellets. Los resultados obtenidos permitieron identificar combinaciones de excipientes y condiciones del proceso que posibilitan la obtención de pellets con alto rendimiento y buenas características físicas. Los pellets desarrollados sientan la base para una etapa posterior de optimización orientada a lograr un perfil de liberación controlado del principio activo. Además, el uso del enfoque QbD se confirmó como una herramienta valiosa que permitió tomar decisiones basadas en evidencia, profundizar el conocimiento del producto y proceso, identificar interacciones entre factores y seleccionar las mejores condiciones dentro del espacio de diseño según los CQAs.

[1] Otero-Espinar FJ, Luzardo-Alvarez A, Blanco-Méndez J. Non-MCC materials as extrusion-spheronization aids in pellets production. J Drug Deliv Sci Technol. 2010;20(4):303-8.

[2] ICH. Guideline Q8: Pharmaceutical Development. Available at: https://www.ich.org/page/quality-guidelines.

Caracterización de compuestos volátiles de genotipos nacionales de frutilla para el manejo de la arañuela roja (*Tetranychus urticae*)

Paulina Barrios[1]; Esteban Vicente[2]; M. Eugenia Lorenzo[3]; Carmen Rossini[4]; Andres González[1]; Florencia Parpal[1]

[1]*Departamento de Química del Litoral, Cenur Litoral Norte, UdelaR, Uruguay.*

[2]*INIA Salto Grande, Uruguay.*

[3]*Departamento de Ciencias Biológicas, Cenur Litoral Norte, UdelaR, Uruguay.*

[4]*Laboratorio de Ecología Química, Facultad de Química, UdelaR, Uruguay.*

pbarrios@fq.edul.uy

La frutilla (Fragaria x ananassa Duch.) es un cultivo estratégico en el noroeste de Uruguay, representando entre el 50 y 60% de la producción nacional. Su cultivo enfrenta importantes desafíos sanitarios, entre ellos el control de la arañuela roja (*Tetranychus urticae*), una plaga clave en cultivos protegidos a nivel local. Actualmente, la principal herramienta de manejo es la aplicación de acaricidas, generando resistencia en *T. urticae*, así como implicando riesgos para la salud y el ambiente. Ante esta problemática, se plantean estrategias sustentables como la selección de variedades resistentes, una herramienta muy valiosa en programas de Manejo Integrado de Plagas (MIP).[1]

El objetivo general de este proyecto es desarrollar métodos para la selección de variedades resistentes de frutilla a *T. urticae* por medio del estudio de los compuestos orgánicos volátiles (VOCs). En el presente trabajo se estudia el perfil de VOCs de las principales variedades que actualmente se cultivan en la región, desarrolladas en INIA SG (Ágata e Yrupé). Para ello se realizaron colectas de volátiles en plantas sanas y dañadas por *T. urticae* seguidas de análisis mediante GC-MS.

El daño causado por *T. urticae* provocó variaciones en los perfiles químicos de los volátiles emitidos por las plantas. Entre los compuestos identificados, se destaca la emisión de monoterpenos y sesquiterpenos, potencialmente involucrados en mecanismos de defensa vegetal.[2] Asimismo, se identificó acetato de (*Z*)-3-hexenilo, un volátil de hojas verdes (GLV) que, según estudios previos, puede estimular la producción de metabolitos de defensa incluso antes del daño visible en el tejido.[3]

Actualmente, se están realizando ensayos de preferencia con *T. urticae* para evaluar la relación entre los perfiles de VOCs y la atracción de la plaga hacia las diferentes variedades.

1. Stout, M.; Davis, J., Keys to the Increased Use of Host Plant Resistance in Integrated Pest Management. In Integrated Pest Management, Rajinder Peshin, A. K. D., Ed. Springer Dordrecht: Book, 2009; Vol. Volume 1: Innovation-Development Process, pp 163-181.2. Li, C.; Zha,W.; Li, W.; Wang, J.; You, A. Advances in the Biosynthesis of Terpenoids and Their Ecological Functions in Plant Resistance. Int. J. Mol. Sci. 2023, 24, 11561.3. Frost, C.J.; Mescher, M.C.; Dervinis, C.; Davis, J.M.; Carlson, J.E.; De Moraes, C.M. Priming Defense Genes and Metabolites in Hybrid Poplar by the Green Leaf Volatile Cis-3-Hexenyl Acetate. New Phytol. 2008, 180, 722–734.

Desarrollo de una metodología multirresiduo para la determinación de pesticidas en leche cruda

Maximiliano Bonti; Camila Ferreiro

Residuos Biológicos, DILAVE, Ministerio de Ganadería Agricultura y Pesca, Montevideo, Uruguay
mbonti@mgap.guy.uy

La Dirección General de Servicios Ganaderos (DGSG) del Ministerio de Ganadería, Agricultura y Pesca (MGAP) desarrolla el Programa Nacional de Residuos Biológicos (PNRB) para alimentos de origen animal. Los objetivos del PNRB consisten en asegurar al consumidor la inocuidad de los alimentos de origen animal, así como asegurar que los resultados del PNRB se encuentren dentro de las especificaciones de los mercados compradores, de instituciones internacionales de protección de alimentos y de las legislaciones vigentes en el país.

La División de Laboratorio Veterinario (DILAVE) M.C. Rubino actúa como el laboratorio de análisis del PNRB, donde se lleva a cabo el monitoreo sistemático de residuos y contaminantes que puedan afectar a las diferentes matrices que conforman los alimentos de origen animal. Es en este contexto que se analiza los pesticidas clorados, piretroides y fosforados en leche de origen bovina proveniente de tanques de almacenamiento a baja temperatura de los establecimientos lecheros.
En este trabajo se desarrolló una técnica analítica multirresiduo para la determinación de pesticidas en leche cruda. La aplicación de la técnica permitió determinar 18 compuestos organoclorados, 25 organofosforados y 6 piretroides con sus respectivos isómeros. Se evaluaron diferentes métodos extractivos utilizando acetonitrilo (0,1% AcOH), QuEChERS de tipo dispersivo con RC-P18 (separa la mayor parte de la fracción lipídica) y PSA para eliminar ácidos orgánicos y pigmentos polares de la muestra. Por otra parte, por el elevado contenido acuoso de la matriz (leche), se empleó sulfato de magnesio con cloruro de sodio para facilitar la precipitación de las proteínas por precipitación salina (salting out). La determinación de los contaminantes estudiados se realizó por GC-MS/MS. El procedimiento se validó cumpliendo con las exigencias de la norma SANTE (SANTE, 2021)[1] y la norma 657(657,2002)[2] obteniendo recuperaciones entre 70%-120%, evaluando la desviación estándar (<20%) y la desviación estándar intermedia entre 3 días de validación.

[1] *SANTE 11312/2021 v2*
[2] *Commission Decision 2002/657/EC*

Análisis botánico de drogas vegetales comercializadas en Uruguay entre 2023 y 2025

Veronika Hein; Pilar Perna; Gastón Martínez

Laboratorio de Botánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

vhein@fq.edu.uy

En drogas vegetales es de gran importancia realizar la identificación y asesoramiento de la calidad de las muestras, para asegurar estándares de calidad y seguridad al consumidor[1]. Se debe tener en cuenta que la droga vegetal, en muchos casos no compone a la planta medicinal entera, sino que solo una parte de la misma. Por esta razón, podemos encontrar muestras adulteradas con otras partes de la misma planta[1,2]. Asimismo, son frecuentes las adulteraciones con otras especies vegetales, insectos, hongos y materiales inorgánicos como tierra, plásticos y piedras. El porcentaje de elementos extraños no debe ser superior al 2% m/m[2]. Para este trabajo se analizó la calidad botánica de 94 muestras, siguiendo la metodología sugerida en el Decreto 289/018 del MSP. Los asesoramientos fueron solicitados por empresas y laboratorios de Uruguay entre 2023 y 2025. Se realizó la caracterización botánica utilizando lupa estereoscópica binocular (Bausch & Lomb, 10× a 30×) y microscopio óptico (Nikon, modelo Eclipse Si RS trinocular, aumentos x4, 10, 40 y 60) acoplado a un kit de polarización simple y a una cámara digital en color para microscopía (amscope, modelo mu-853b). Se determinó que el 64% de las muestras fueron de calidad aceptable, mientras que el 36% se encontraban adulteradas. Dentro de las adulteraciones detectadas, el 14.9% correspondió a otras especies vegetales, el 6.4% a partes de la planta que no corresponden a la droga vegetal, el 5.3% a material inorgánico, hongos, gramíneas, insectos, y 9.6% a más de un tipo de adulterante. Los resultados evidencian la importancia de evaluar la calidad de las drogas vegetales comercializadas en el país.

Referencias:

[1]Alfonso, G. M., Perna, P., Figliolo, R., Rodríguez, P., & Rossini, C. (2025). Caracterización botánica de drogas vegetales comercializadas en Uruguay. INNOTEC, (29 ene-jun), e680-e680.

[2]Decreto N°289/018 [Ministerio de Salud Pública]. 19 de septiembre de 2018. Recuperado de https://www.impo.com.uy/bases/decretos/289-2018

Evaluación de la actividad antihelmíntica *in vitro* contra el estadio adulto de *Haemonchus contortus*, citotoxicidad inespecífica y análisis proteómico de estructuras imidazoheterocíclicas

Ramiro Teixeira[1]; Magdalena Nieves[1]; Analía Lima[2]; Alicia Costabile[3]; Gerardo Duarte[1]; Elisa Melian[1]; Mariana Ingold[4]; Williams Porcal[4,5]; Virginia López[4,5]; Victoria de la Sovera[4,5]; Beatriz Munguía[1]

[1]Área de Farmacología, CIENFAR, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay
[2]Unidad de Bioquímica y Proteómica Analíticas, Institut Pasteur de Montevideo e Instituto de Investigaciones Biológicas Clemente Estable, Montevideo, Uruguay
[3]Sección Bioquímica - Biología Molecular, Facultad de Ciencias, Udelar, Montevideo, Uruguay
[4]Laboratorio de Síntesis Orgánica y Desarrollo de Fármacos, Institut Pasteur de Montevideo, Montevideo, Uruguay
[5]Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay.

munguia@fq.edu.uy

Haemonchus contortus es un nematodo patógeno que afecta a pequeños rumiantes causando graves pérdidas económicas en el sector productivo. La quimioterapia es el tratamiento principal, pero la creciente resistencia a los fármacos exige el desarrollo de nuevos antihelmínticos. En este trabajo, se empleó la reacción multicomponente de Groebke-Blackburn-Bienaymé (GBB) bajo condiciones de *química verde* para generar una biblioteca de compuestos imidazoheterocíclicos, considerados estructuras privilegiadas en química medicinal. Más de 30 compuestos GBB fueron evaluados *in vitro* contra especímenes adultos de *H. contortus* mediante un ensayo de motilidad, y por su citotoxicidad inespecífica en células humanas tipo macrófago (células THP-1 diferenciadas con éster de forbol). En el ensayo de actividad antihelmíntica, seis compuestos afectaron la motilidad de los gusanos a las 72 h de incubación, y dos mostraron una actividad significativa desde las 24 h, superando al albendazol, control positivo del ensayo, a 25 µM. Los compuestos activos no mostraron citotoxicidad significativa. En los análisis proteómicos de gusanos adultos tratados con el compuesto más potente, el compuesto 8, aplicando análisis LC−MS/MS tipo *shotgun*, se identificaron un total de 1378 proteínas, y dentro de las proteínas diferencialmente expresadas (DEPs), 67 estuvieron significativamente sobreexpresadas y 78 subexpresadas, en comparación con gusanos adultos no tratados. El análisis bioinformático de las DEPs, mediante enriquecimiento por Gene Ontology (GO) y Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes (KEGG), indicó que las proteínas subreguladas estaban principalmente involucradas en el ciclo del ácido tricarboxílico (TCA), el metabolismo del malato, la actividad oxidorreductasa y el metabolismo de nucleótidos, lo que sugiere disfunción mitocondrial e interferencia con la síntesis de ADN. Las proteínas sobreexpresadas estaban relacionadas con la traducción, la síntesis de proteínas y el metabolismo de la fructosa, lo que posiblemente refleja una respuesta al estrés, mal plegamiento proteico y desequilibrio energético producido por la alteración del ciclo TCA, respectivamente. Estos hallazgos respaldan a los imidazoheterociclos como estructuras prometedoras para el desarrollo de antihelmínticos, destacando al compuesto 8 como un fuerte candidato para continuar evaluando en estudios preclínicos que avalen su pasaje a estudios *in vivo*, contribuyendo así al desarrollo de nuevos antihelmínticos.

Lactonas sesquiterpénicas como plataformas para el diseño de derivados bioactivos: exploración química y evaluación antiparasitaria

Macarena Eugui[1,2]; Alejando I. Recio-Balsells[2]; Elena Aguilera[3]; Marcos Couto[3]; Manuela García[2]

[1]*Laboratorio de Química Orgánica, Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay.*

[2]*Grupo de Productos Orgánicos Bioactivos, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Nacional de Córdoba, Ciudad Universitaria, Córdoba, Argentina.*

[3]*Grupo de Química Orgánica Medicinal, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

macarenaeugui@gmail.com

Los productos naturales (PN) y sus derivados constituyen una fuente fundamental para el descubrimiento de nuevos agentes terapéuticos.[1] Estas moléculas, sintetizadas por organismos vivos con fines biológicamente relevantes, presentan una arquitectura química diversa y estereoquímicamente compleja, con alta fracción de carbonos sp^3 y múltiples centros estereogénicos, lo que las convierte en estructuras privilegiadas en el diseño racional de fármacos.[1] Entre los PN de origen vegetal, las lactonas sesquiterpénicas se destacan por su amplia distribución en la familia Asteraceae, su diversidad estructural y reconocida bioactividad.[2] Con el objetivo de ampliar la diversidad estructural y explorar el potencial bioactivo de lactonas sesquiterpénicas (LS), en una primera etapa se evaluó la actividad biológica de extractos y fracciones enriquecidas obtenidas a partir de especies vegetales seleccionadas sobre *T. cruzi* y *L. infantum.* A partir de estos resultados, y con el fin de proyectar estrategias de derivatización sobre los compuestos mayoritarios de los extractos activos, se diseñaron reacciones modelo empleando LS comercialmente disponibles, como la helenina (mezcla física de alantolactona y isolantolactona). Estas transformaciones químicas incluyeron condiciones de oxidación selectiva y distorsión anular mediada por ácidos y otros reactivos electrofílicos, orientadas a generar nuevas arquitecturas moleculares. Esta aproximación permitió estudiar en profundidad la reactividad de este tipo de esqueletos naturales y sentar las bases para su aplicación en lactonas estructuralmente relacionadas presentes en extractos bioactivos como componentes mayoritarios. Como resultado, se obtuvieron más de ocho derivados, los cuales fueron purificados, caracterizados mediante técnicas espectroscópicas, y evaluados fenotípicamente frente a los *T. cruzi* y *L. infantum.* Esta estrategia permitió no solo acceder a nuevas estructuras con actividad antiparasitaria, sino también avanzar en la comprensión de la reactividad de estas lactonas complejas, aportando conocimientos útiles para el diseño de agentes terapéuticos.

1. a) DeCorte, B. L. *J. Med. Chem.,* **2016**, *59*, 9295-9304.4 b) Lovering, F.; Bikker, J.; Humblet, C. *J. Med. Chem.,* **2009**, *52*, 6752–6756.
2. Aliarab, A., Abroon, S., Rasmi, Y., & Aziz, S. G. *Biomed. Pharmacother.*, **2018**, *106*, 239-246.

Sintesis de dimeros de dibenzoilmetano como potenciales filtros solares y estudios primarios de fotoestabilidad. Unidades enlazadas por un linker del tipo -O-$(CH_2)_n$-O- o del tipo -$(CH_2)_n$-

Gabriel Jorge Sagrera[1,2]

[1]*Departamento de Quimica Organica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Instituto de Quimica Biologica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

gjsagrera@gmail.com

La exposición excesiva a los rayos UV ocasiona diversos daños al organismo, entre ellos, quemaduras, fotoenvejecimiento y cáncer de piel. En el año 2010 existían 55 filtros UV aprobados en alguna región del mundo, pero sólo 10 estaban aprobados en forma global. Algunos de los filtros solares utilizados actualmente poseen diversos efectos tóxicos sobre la piel o por absorción percutánea. Otro problema importante es el relacionado con la contaminación ambiental. Los dibenzoilmetanos absorben intensamente en el rango de 320 - 400 nm y por tanto se utilizan como filtros UVA. Actualmente, uno de los pocos filtros UVA aprobados es la avobenzona, λmax = 357 nm. Sin embargo, estudios recientes muestran que la irradiación de la avobenzona puede formar arilglioxales y bencilos o bien reaccionar con otros filtros solares. Debido a la creciente demanda de filtros solares, es de gran importancia el descubrimiento de nuevos compuestos más seguros y efectivos.

Como continuación de una línea de investigación relacionada con la síntesis de filtros solares, en este trabajo se describe la preparación de una serie de dímeros de dibenzoilmetano unidos por un “linker” del tipo -$(CH_2)_n$-, o del tipo -O-$(CH_2)_n$-O-

Linker del tipo -O-$(CH_2)_n$-O- : Los compuestos se prepararon en 4 etapas: a) síntesis de 4-hidroxibenzoato de metilo, b) reacción con un dihaluro del tipo X-$(CH_2)_n$-X, c) reacción con 2’-hidroxiacetofenona, d) rearreglo de Baker-Venkataraman.

Linker del tipo -$(CH_2)_n$-: Se ejemplifica para n=3. Los compuestos se prepararon en 4 etapas: a) síntesis de 1,3-di-(4-carboxifenil)propano b) formacion de cloruro de acido c) reaccion con 2’-hidroxiacetofenona, d) rearreglo de Baker-Venkataraman.

La purificación se realizó por recristalización o cromatografía en columna. Los compuestos fueron obtenidos con buenos rendimientos y caracterizados espectroscópicamente por resonancia magnética nuclear (RMN).

Se realizaron estudios primarios de fotoestabilidad. Se expusieron soluciones de los compuestos en metanol a la luz solar por 2 horas y a radiación de λ = 457 nm (leds azules) por 4 horas. El análisis por RMN muestra que los compuestos sufren una mínima descomposición (en todos los casos menor al 2 %). Esto sugiere que son compuestos prometedores para ser utilizados como filtros solares

Desarrollo y montaje de un sistema para caracterización de sólidos por reducción y desorción térmica programada de CO_2

Mauricio Musso; Santiago Veiga; Agustina Moreira; Juan Bussi

Laboratorio de Fisicoquímica de Superficies, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

mmusso@fq.edu.uy

La caracterización fisicoquímica de materiales sólidos, especialmente aquellos utilizados en catálisis, es fundamental para entender su comportamiento y optimizar su desempeño. Las técnicas de reducción térmica programada (RTP) y desorción térmica programada de CO_2 (DTP-CO_2) se destacan por su capacidad para proporcionar información detallada sobre propiedades clave como la reducibilidad de especies metálicas y la basicidad superficial de los sólidos.

El análisis por RTP consiste en calentar la muestra en atmósfera reductora (H_2/Ar) y registrar el consumo de hidrógeno en función de la temperatura. Esto permite identificar especies reducibles, sus temperaturas de reducción e interacciones metal-soporte. Por su parte, la técnica de DTP-CO_2 se basa en la adsorción de CO_2 a temperatura ambiente, seguida de una desorción controlada al aumentar la temperatura. Así, se determina la cantidad y tipo de sitios básicos en la superficie, clasificados como débiles, intermedios o fuertes según la temperatura de desorción observada.

Contar con un equipo propio que permita realizar estos análisis representa un avance significativo para el desarrollo científico local. En muchos laboratorios del mundo se utilizan equipos comerciales muy costosos específicamente diseñados para este fin. En este contexto, diseñamos y montamos un sistema experimental con equipamiento accesible en nuestro laboratorio. El sistema se compone de líneas de gases conectadas a controladores de flujo másico, un horno tubular programable y el detector de conductividad térmica que forma parte de un cromatógrafo de gases. En la Figura puede observarse un esquema del equipo y dos ejemplos de análisis realizados. El montaje y validación de este sistema permite no solo reducir costos, sino también formar recursos humanos capacitados, y abrir nuevas posibilidades de colaboración interdisciplinaria.

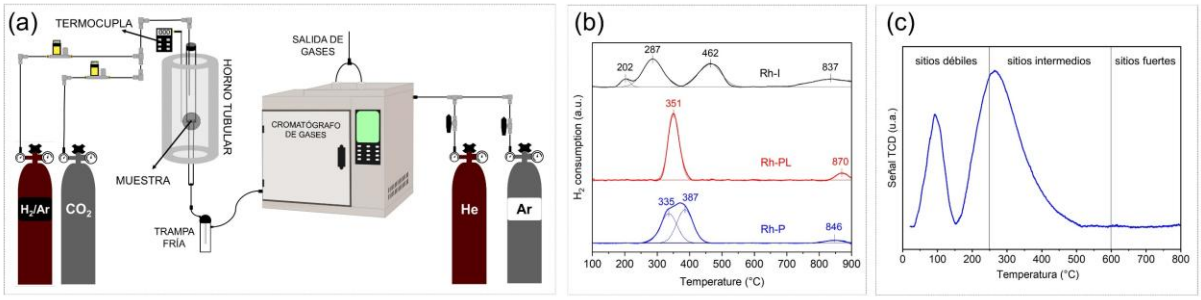


Figura: (a) Esquema del equipo. (b) TPR de catalizadores de rodio preparados por diferentes técnicas. (c) TPD-CO_2 del óxido $La_{1,8}Mg_{0,2}Ce_2O_{7-\delta}$.

Efectos de compuestos de oxovanadio con derivados de 8-hidroxiquinolina sobre *Trypanosoma brucei* y *Leishmania infantum*

Gonzalo Scalese[1,2]; Pilar Terra[1,2]; Diego Benítez[2]; Dinorah Gambino[1]; Marcelo Comini[2]

[1]*Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay*
[2]*Laboratorio de Biología Redox de Tripanosomas, Institut Pasteur de Montevideo, Uruguay*

gscalese@fq.edu.uy

La tripanosomiasis americana, la tripanosomiasis africana y la leishmaniasis, causadas por *Trypanosoma cruzi*, *T. brucei* y especies de *Leishmania* respectivamente, son enfermedades tropicales desatendidas que carecen de vacunas eficaces y presentan limitaciones terapéuticas, lo que demanda el desarrollo de nuevos agentes. Previamente, nuestro grupo ha obtenido nuevos complejos de vanadio con ligandos derivados de 8-hidroxiquinolina (8HQ) que han presentado buena actividad frente a *T. cruzi* (Figura 1). En este trabajo, se extendió su evaluación a la forma infectiva de *T. brucei* (EC_{50}, 24 h: 0.07–4.78 µM) y a amastigotas intracelulares de *Leishmania infantum*, empleando ensayos de bioluminiscencia. Tres compuestos eliminaron amastigotas sin causar lisis de células hospedadoras a 10 µM. La citotoxicidad inespecífica se evaluó en macrófagos J774 y THP-1, mostrando índices de selectividad hacia el parásito de hasta 44. Algunos compuestos con alta actividad contra *T. brucei* alteraron el metabolismo redox y aumentaron la peroxidación lipídica, evidenciada por biosensores redox expresados en líneas reporteras, en paralelo con la acumulación intracelular de hierro, lo que sugiere la activación de mecanismos de muerte ferroptóticos. En conjunto, estos complejos mostraron alta potencia, selectividad y eliminación de amastigotas sin toxicidad para células hospedadoras, aportando información clave sobre relaciones estructura–actividad y apoyando el diseño de nuevos agentes antiparasitarios.

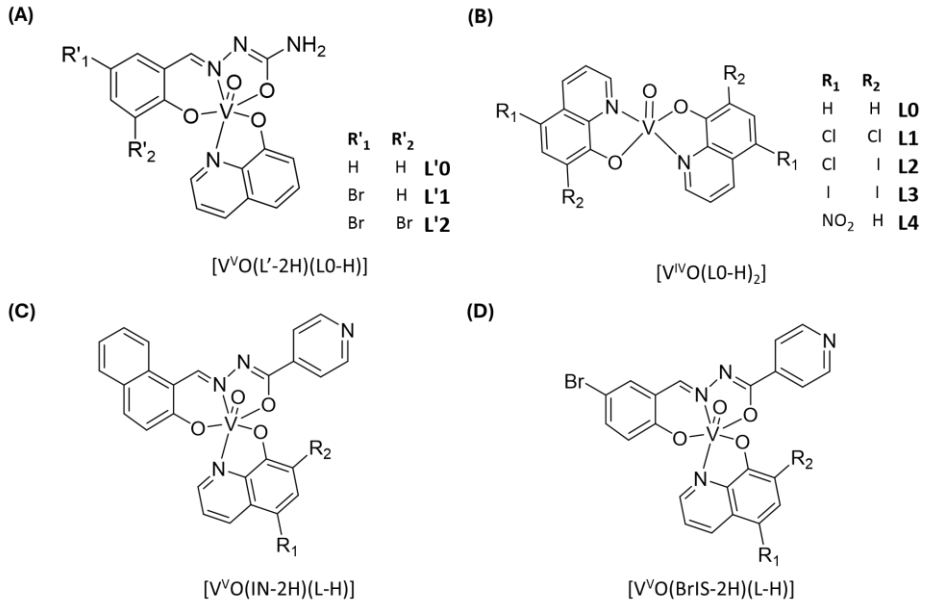


Figura 1: Compuesto de oxovanadio previamente reportados por nuestro grupo. L = ligandos derivados de la 8HQ; IN = hidrazonas derivadas de la isoniazida. L' = semicarbazonas derivadas del salicilaldehído.

El tratamiento con ácido salicílico modifica el perfil de volátiles del tomate y afecta la respuesta de *Tuta absoluta.*

Federico Rodrigo[1]; Carmen Rossini[1]

[1]Laboratorio de ecología química, DQO, Facultad de Química, UdelaR, Mdeo., Uruguay

frodrigo@fq.edu.uy

El ácido salicílico (AS) es una fitohormona responsable de desencadenar respuestas defensivas ante ciertos tipos de estrés. Su aplicación en cultivos de tomate ha demostrado mejorar parámetros de productividad como la altura de la planta y la cantidad de frutos producida [1]; aumentar la tolerancia a estrés abiótico, como a la sequía [2], las altas temperaturas [3] o las variaciones de pH [4]; y contribuir a la defensa frente a uno de sus dos principales insectos plagas en Uruguay: la polilla del tomate, *Tuta absoluta* [5]. Para estudiar el efecto de la aplicación de AS (5mL de una solución acuosa 0,5 mM asperjados/planta) sobre el comportamiento de esta plaga, se ofrecieron plantas de tomate sanas y asperjadas a 50 adultos de *T. absoluta* (n = 12). Luego de 24 h, se observó una preferencia de oviposición por las plantas asperjadas (58 ± 6 % huevos/planta) frente a las sanas (42 ± 6 % huevos/planta, $p < 0,05$ prueba de Wilcoxon). En ensayos de olfatometría de opción entre los volátiles de plantas sanas y asperjadas, 10 adultos fueron liberados en grupo (n = 15) y, tras 30 min, se registró una mayor atracción hacia los volátiles emitidos por la planta asperjada (3,0 ± 0,5) vs. (1,4 ± 0,3) adultos ($p < 0,05$, prueba de Wilcoxon). Los volátiles de plantas (N = 11), previa y posteriormente a su tratamiento con AS, fueron colectados por 24 h y analizados mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. Sesenta compuestos fueron cuantificados y expresados como masa relativa al estándar interno (EI): tridecano. De estos, 54 fueron identificados comparando índices de retención y espectros de masas con bibliotecas disponibles (NIST 20). Entre los 22 compuestos cuya emisión varió significativamente ($p < 0,05$, prueba t, muestras pareadas), se destacan el β -felandreno a la alta (1,7 ± 0,5 vs. 3 ± 1) µg eq EI/24h; y p-cimeno (1,4 ± 0,7 vs. 0,4 ± 0,3) µg eq EI/24h y 1-octen-3-ol (0,6 ± 0,2 vs. 0,3 ± 0,1) µg eq EI/24h a la baja en plantas sin asperjar y asperjadas, respectivamente. Estos resultados contribuyen a comprender el efecto del ácido salicílico sobre la emisión de volátiles en tomate y su influencia en el comportamiento de *T. absoluta*.

Bibliografía

1. Fozia, et al., *Exogenous application of salicylic acid and NPK promotes tomato growth parameters, yield, and nutraceutical quality under cold stress.* Notulae Botanicae Horti Agrobotanici Cluj-Napoca, 2024. **52**(4): p. 13667.
2. Rai, G.K., et al., *Boosting Drought Tolerance in Tomatoes through Stimulatory Action of Salicylic Acid Imparted Antioxidant Defense Mechanisms.* Agronomy, 2024. **14**(6): p. 1227.
3. Saleem, W., et al., *Exogenous application of salicylic acid improves physiochemical and quality traits of tomato (solanum lycopersicum l.) under elevated temperature stress.* Pakistan Journal of Botany, 2025. **57**(2): p. 441-449.
4. Khan, A., et al., *Silicon and salicylic acid confer high-pH stress tolerance in tomato seedlings.* Sci Rep, 2019. **9**(1): p. 19788.
5. Pulga;, P.S., et al., *Salicylic acid treatments induce resistance to Tuta absoluta and Tetranychus urticae on tomato plants.* Horticultura Brasileira, 2020. **38**: p. 288-294.

Más allá del dulzor: la Stevia como fuente de inhibidores naturales para combatir la obesidad

Nathalia Aceval[1,2]; Jorge Cantero[1,3]; Silvio Claudio da Costa Silva[4]; Jeffrey P. Pearson[5]; Margot Paulino[1]

[1]Área Bioinformática, DETEMA, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay.

[2]Dirección de Investigación, Facultad de Ingeniería Agronómica, Universidad Nacional del Este, Minga Guazú, Paraguay.

[3]Centro de Investigaciones Médicas, Facultad de Ciencias de la Salud, Universidad Nacional del Este, Minga Guazú, Paraguay.

[4]Departamento de Bioquímica, Centro de Ciências Biológicas, Universidade Estadual de Maringá, Maringá, Brasil.

[5]Pearson Lab, Biosciences Institute, Medical School, Newcastle University, Newcastle Upon Tyne, UK

nathaliaaceval@fq.edu.uy

La obesidad es un desafío creciente en Uruguay y el mundo, asociado al alto consumo de grasas y a la eficiente absorción intestinal mediada por la enzima lipasa pancreática. Una estrategia clave para combatirla es inhibir esta enzima. Aunque existe un fármaco eficaz (Orlistat®), sus efectos secundarios limitan su uso. Este estudio evaluó la capacidad inhibitoria *in vitro* de extractos crudos y purificados de *Stevia rebaudiana* (SE) sobre la lipasa pancreática porcina (LPP), y exploró la afinidad de sus compuestos mayoritarios mediante acoplamiento y dinámica molecular (DM) sobre el modelo cristalográfico de la LPP (PDB 1ETH). El extracto crudo mostró inhibición dosis-dependiente *in vitro*, alcanzando el 95,15 ± 10,18 % a 5 mg/mL y un IC_{50} de 2,84 ± 0,02 mg/mL. En comparación, Orlistat (0,025 mg/mL) inhibió completamente la enzima. Los extractos más purificados no presentaron actividad significativa. Se estudió el acoplamiento molecular de 12 compuestos presentes en los extractos de *Stevia* (Rebaudiósido A, Esteviósido, Steviol, ácido 3,4-dicafeoilquínico, cianidina-3-glucósido, quercetina-3-O-glucósido, ácido rosmarínico, ácido clorogénico, quercetina, kaempferol, apigenina y ácido cafeico) en el sitio catalítico de la LPP. También se incluyeron como controles Orlistat® y el sustrato lipídico natural trioleína. El *docking* reveló altas afinidades para Rebaudiósido A (–9,01 kcal/mol) y Esteviósido (–8,91 kcal/mol), comparables a Orlistat (–8,30 kcal/mol) y cercanas a la trioleína (–9,78 kcal/mol). Estos compuestos interactuaron con residuos clave como Asp206, Phe216, Ser153 y la tríada catalítica His264. Las simulaciones de DM (100 ns) bajo condiciones de frontera periódica, usando NAMD y el campo de fuerza CHARMM36, mostraron que Rebaudiósido A presentó la mayor energía total de interacción (–244,62 ± 17,97 kcal/mol), seguido de Esteviósido (–186,69 ± 13,35), ambos superiores a Orlistat y trioleína. Las interacciones electrostáticas predominaron en los glucósidos, favoreciendo la estabilización del complejo enzima–ligando. En conjunto, los resultados posicionan a la *Stevia rebaudiana* como fuente prometedora de inhibidores naturales de la lipasa pancreática y posible alternativa para el control de la obesidad.

Posters

Sesión 5 (Viernes 24/10 – 8:30-10:00)

S5.P01_BQ Rodrigo Becco - *Péptidos antimicrobianos recombinantes: una estrategia innovadora para el control fúngico en manzanas almacenadas*

S5.P02_BQ Ronald Labaste - *Pantoea y Xanthomonas en trigo: Coexistencia o competencia?*

S5.P03_BQ Soledad Martínez - *Sistemas de distribución de agua potable: ¿qué variables impactan sobre la estructura de la comunidad microbiana?*

S5.P04_BQ Rubén Antonio Olivares Terrones - *Comparación morfológica y metabólica de las cepas ED65 y ATCC10970 de Streptomyces rimosus*

S5.P05_BQ Sofía Giménez - *Caracterización molecular y bioquímica de cepas autóctonas de levaduras con potencial enológico*

S5.P06_BQ Agustina Arrieta - *Caracterización de una uracil fosforribosiltransferasa recombinante termófila con potencial como biocatalizador*

S5.P07_BQ Cecilia Pérez; Juliana Miranda - *Preparación de nanopartículas de oro funcionalizadas con polisacáridos O-específicos de aislados de E. coli de mastitis bovina*

S5.P08_BQ Diego M. Roldán - *Nanoadyuvantes y microbiota intestinal: efectos inducidos tras administración subcutánea*

S5.P09_BQ Fiorella Ríos - *Exploración de metabolitos halogenados mediante activación de BGCs crípticos en Streptomyces por estrategia OSMAC y análisis HPLC-UV/MS*

S5.P10_BQ Valeria Elizalde - *Nanopartículas de plata biogénicas eficaces contra Salmonella multirresistente: evaluación citotóxica en Huh-7*

S5.P11_BQ Agustin Castilla - *Producción y purificación de PNGasa F de E. miricola, para su aplicación al control de calidad de biofármacos*

S5.P12_FQ Benjamín Montenegro - *Propiedades magnéticas de tetrafenil-porfirinas de cobalto adsorbidas selectivamente sobre sustratos aislantes*

S5.P13_FQ Hiroyuki Kinoshita - *Evaluación de extractos de Calendula officinalis como agente de funcionalización para nanopartículas de oro*

S5.P14_FQ Leila Reyes - *Catalizadores $Ni/Y_2Zr_2O_7$ dopados con Ce^{4+} para la producción de hidrógeno a partir de la descomposición catalítica del amoníaco*

S5.P15_FQ Melisa Olivera Rohrer - *Caracterización óptica de óxidos de titanio obtenidos mediante electrólisis de descarga incandescente*

S5.P16_FQ Mauricio Cardoso - *Estudio del proceso sol-gel de SiO_2 y sus propiedades texturales mediante una metodología de diseño experimental.*

S5.P17_FQ Noelia Méndez - *Efecto del tipo de surfactante en la preparación de materiales porosos heteroestructurados a partir de una arcilla natural*

S5.P18_FQ María Ayala - *Evaluación de coagulantes para el tratamiento primario de efluentes agroindustriales del curado de semillas*

S5.P19_FQ Roberto Rodríguez; Gabriel Di Rienzo - *Combustión latente: del laboratorio al mercado*

S5.P20_FQ Agustina Moreira - *Producción de hidrógeno de alta pureza a partir de la deshidrogenación del etanol utilizando catalizadores CuNiLaSiO*

S5.P21_IA María José Castro - *Profundización en NPS: screening mediante nuevas tecnologías de muestras de orina obtenidas en fiesta de música electrónica*

S5.P22_IA Jhonatan Cardozo; Josefina Rodríguez - *Caracterización de Terpenos en Extractos de Cannabis sativa L. de la Variedad Fem Tonic Mediante Cromatografía de Gases Acoplado a Espectrometría de Masas (GC-MS)*

S5.P23_IA Guzman Porley - *Incorporación de Matrina y Oximatrina a un método multirresiduo*

S5.P24_IA David Menchaca - *Determinación de compuestos bioactivos en propóleos del Uruguay mediante cromatografía de ultra-alta performance*

S5.P25_IA Matias Rosas - *Síntesis y caracterización de compuestos de coordinación de Ga(III) con antiinflamatorios no esteroideos con actividad citotóxica*

S5.P26_IA Lirka Brooks - *Síntesis de nuevos complejos heterolépticos de Cu(II) con 5-amino-fenantrolina y fendiona como potenciales agentes citotóxicos*

S5.P27_IA Brian Cruz - *Preparación de nuevos compuestos de coordinación de Ru(II) como potenciales fármacos contra enfermedades neurodegenerativas*

S5.P28_IA Rodrigo Mateo - *Determinación de arsénico en agua potable mediante HG-AFS: desarrollo de una metodología alineada con la Química Verde*

S5.P29_IA Mariana Barcia - *Arsénico en aguas subterráneas: estudio desde la especiación química*

S5.P30_IA Katherine Alexandrino - *Miniaturización de una metodología analítica para el análisis de pesticidas en suelo*

S5.P31_IA Agustina Valentín - *Caracterización de macro y micronutrientes en compost*

S5.P32_IA Isabel Galain - *Radiosensibilización con Nanopartículas de Sulfuro de Bismuto: Impacto en la Respuesta Celular y la Reducción de la Proliferación Tumoral*

S5.P33_IA Daihanna Rusca; Micaela Bellerati - *Estudio de niveles de metales en el suelo del Ecoparque Idea Vilariño*

S5.P34_IA Camila Pérez - *Evaluación del uso de nanopartículas de sulfuro de bismuto como radiosensibilizadores: impacto genotóxico en líneas celulares cancerígenas*

S5.P35_EQ Ana Claudia Pina - *De la investigación al aula: diseño de una práctica experimental sobre adsorción a partir de una experiencia doctoral*

S5.P36_EQ Andreína Blanco - *Enseñanza de la química con estrategias innovadoras para la modelización y experimentación: nuevos dispositivos y abordajes para la enseñanza del tema carbohidratos en Educación Media Superior*

S5.P37_EQ Teresa Heller - *La enseñanza de la toxicología en la Facultad de Química: un ejemplo de desarrollo epistemológico*

S5.P38_EQ Jimena Presa - *Una intervención sobre la regulación de la procrastinación*

S5.P39_EQ Mirian Casco - *Corrosión en contexto: una experiencia interdisciplinaria para enseñar química en ingeniería*

S5.P40_EQ Shirley Méndez - *Patrones de aprendizaje y emociones de logro en los estudiantes de Facultad de Química*

S5.P41_EQ Silvana Flecchia - *Instagram en la formación docente continua en Química: análisis motivacional mediado por IA de @UnTIC_en5*

S5.P42_EQ Soledad Machado - *Conectar los puntos: el impacto de factores contextuales en el involucramiento de visitantes a un centro de ciencias*

S5.P43_EQ Virginia Aldabalde; Ivana Núñez; Estefanía Dibello - *El uso de videos demostrativos como herramienta didáctica en la enseñanza de la química experimental*

S5.P44_QO Alejandro Peixoto de Abreu Lima - *Nuevas aplicaciones de Dihidrolevoglucosenona como plataforma biorrenovable para sintetizar moléculas con potencial actividad biológica*

S5.P45_QO Kevin Zirbesegger - *Radiosíntesis de [^{11}C]azul de metileno mediante sustitución nucleofílica aromática con [^{11}C]dimetilamina*

S5.P46_QO Victoria de la Sovera - *Plataformas químicas derivadas de biomasa como precursoras de moléculas bioactivas: potenciales agentes anti-UV y antioxidantes.*

S5.P47_QO Agustina Vila - *Explorando nuevas aplicaciones de Dioxigenasas tipo Rieske: reacciones de ciclopropanación*

S5.P48_QO Mariana Ingold - *De la curiosidad química a un hallazgo sintético: una reacción multicomponente novedosa hacia derivados pirrólicos bioactivos*

S5.P49_FQ Mariano Romero - *El efecto de la concentración crítica de micelas en la respuesta de especies anfifílicas utilizando transistores electroquímicos orgánicos basados en P3HT*

S5.P50_IA Joaquín Afonso - *Desarrollo y evaluación de un complejo de 99mTc derivado de Erlotinib para imagenología molecular en cáncer de mama triple negativo*

S5.P51_IA Pablo Fagúndez - *Nanopartículas de oro modificadas con proteína, analizando sus propiedades de color como parámetro de caracterización*

S5.P52_IA Lucía Scagni - *Determinación de mercurio total en atún enlatado comercializado en Uruguay por TDA-AAS*

S5.P53_QO Natalia Díaz Carpintieri - *Desarrollo de análogos de S-adenosilmetionina como inhibidores de la Metiltransferasa NS5 del Virus del Dengue*

Péptidos antimicrobianos recombinantes: una estrategia innovadora para el control fúngico en manzanas almacenadas

Rodrigo Becco[1]; Roberto Castro Rosas[2]; Gianna Cecchetto[2]; Eloísa Arrarte[3]; Mariana Barraco Vega[1]

[1]*Laboratorio de Microbiología Molecular, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Microbiología, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, Universidad de la República, Uruguay*

[3]*Area Fisicoquímica, Departamento DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

rodribecco@gmail.com

Existen diversas estrategias para aumentar la vida útil de la fruta en poscosecha y reducir las pérdidas durante el almacenamiento. En manzanas, los métodos más utilizados son el almacenamiento en frío (0–1 °C) y la aplicación de fungicidas.
A pesar del uso de estas tecnologías, se registran importantes pérdidas por ataques microbianos. Los principales patógenos son *Penicillium expansum*, *Botrytis cinerea* y *Alternaria* spp. Si bien los fungicidas son eficaces, su toxicidad representa un riesgo para consumidores y aplicadores, lo que motiva la búsqueda de alternativas más seguras. En este contexto, los péptidos antimicrobianos derivados de plantas (PAMPs) son una alternativa promisoria.
Nuestro grupo estudia PAMPs obtenidos de plantas nativas de la región, con distintos objetivos de aplicación. En este trabajo se evalúa su potencial como reemplazo de fungicidas químicos.
A partir de un catálogo obtenido por minería genómica del transcriptoma de *Peltophorum dubium* (ibirapitá), *Erythrina crista-galli* (ceibo) y *Maytenus ilicifolia* (congorosa), se seleccionaron siete PAMPs para su expresión recombinante en *Escherichia coli* (HisTag:Trx:PAMP). Se evaluó su actividad antimicrobiana frente a *P. expansum* y *B. cinerea* mediante un cribado inicial con fracciones solubles. Los cuatro con mejor desempeño (E1, M4, P11 y P13) fueron purificados por afinidad His-tag y evaluados in vitro.
Se observaron inhibiciones del crecimiento fúngico de hasta el 100 % a concentraciones de 3–12 µM para *B. cinerea* y 13–20 µM para *P. expansum*. Además, se evaluó su efecto protector en manzanas almacenadas en cámara fría frente a *B. cinerea*. El péptido P11 mostró el mejor resultado: a 6 µM (CIM) la severidad de la enfermedad disminuyó 97 % y la incidencia 86 %.
Actualmente se evalúa su eficacia frente a *P. expansum* en condiciones poscosecha, con el objetivo de validar su potencial como alternativa biotecnológica para el manejo de enfermedades fúngicas en frutas almacenadas.

Pantoea y *Xanthomonas* en trigo: Coexistencia o competencia?

Ronald Labaste[1]; Lucía Coimbra[1]; María Virginia Ferreira[1]; Felipe Clavijo[1]; Stefanie De Armas[1]; Silvia Pereyra[2]; María Inés Siri[1]

[1]*Laboratorio de Microbiología Molecular, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, UDELAR, Montevideo, Uruguay*

[2]*Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria, Colonia, Uruguay.*

rlabaste@outlook.com

El trigo, junto con el maíz y el arroz, integra los tres cultivos básicos que alimentan a más del 60 % de la población mundial. En Uruguay, representa cerca del 15 % del área agrícola sembrada, siendo el segundo cultivo en superficie luego de la soja. El estudio de los microorganismos asociados a él es crucial para comprender su salud y productividad. Dos géneros bacterianos de particular interés son *Pantoea* y *Xanthomonas*. *Este último* reúne más de 35 especies, algunas responsables de enfermedades en más de 400 plantas, incluyendo el trigo. Dos especies relevantes son *X. translucens* y *X. prunicola* que causan la estría bacteriana de la hoja y necrosis seca de las hojas de plantas de trigo respectivamente. Por otro lado, los miembros del género *Pantoea* son bacterias Gram negativas ampliamente distribuidas en agua, suelos, plantas y animales. Algunas especies producen antibióticos como pantocinas y herbicolinas, metabolitos antimicrobianos y sideróforos, mientras que otras son fitopatógenas en maíz, arroz, cebolla y remolacha. A pesar de estos roles contrastantes, su función ecológica en el microbioma del trigo sigue siendo poco clara. *Pantoea* presenta morfología homogénea, alta variabilidad bioquímica (incluso a nivel de especie) y suelen coexistir múltiples especies en una misma planta hospedera. En este estudio se aislaron e identificaron 29 cepas de *Pantoea* extraídas de hojas de trigo sintomáticas tomadas de distintos sitios de Uruguay y Brasil. Se realizó PCR convencional con *primers* especie-específicos reportados en bibliografía para identificar 4 especies: *P. agglomerans, P. ananatis, P. allii y P. stewartii*. Para los aislamientos que resultaron negativos para las 4 especies evaluadas, se realizó la identificación del género por secuenciación del gen del ARNr 16S. Además, se evaluó la patogenicidad de 8 cepas seleccionadas en plantas de trigo mediante infiltración. Posteriormente se realizó un ensayo de competencia con 6 cepas de *Pantoea* seleccionadas contra *Xanthomonas,* para evaluar su potencial como agente biocontrolador en base a la presencia o ausencia de halo de inhibición como indicador de la actividad antimicrobiana. Los resultados revelan una gran variedad de especies de *Pantoea* en las muestras de Brasil y Uruguay. Se identificaron 5 cepas de *P. ananatis*, 6 cepas de *P. agglomerans* y 6 cepas *P. allii*, las 12 cepas restantes no pudieron ser identificadas a nivel de especie con las metodologías utilizadas. En el ensayo de patogenicidad ninguna de las cepas estudiadas desarrolló síntomas en plantas de trigo en las condiciones evaluadas. Por otro lado, se encontró una potencial actividad inhibitoria de *Pantoea* contra *Xanthomonas*. Estos resultados representan un punto de partida para futuros estudios orientados a esclarecer la interacción entre *Pantoea* y el trigo como planta hospedera y evaluar su potencial aplicación como agente de biocontrol en el ámbito agrícola.

Sistemas de distribución de agua potable: ¿qué variables impactan sobre la estructura de la comunidad microbiana?

Soledad Martínez[1]; Umer Zeeshan Ijaz[2]; Isabel Douterelo[3]; María Pía Cerdeiras[1]

[1] *Área de Microbiología, Unidad de Análisis de Agua, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2] *Infrastructure and Environment Research Division, James Watt School of Engineering, University of Glasgow, Glasgow, Reino Unido*

[3] *Department of Civil and Structural Engineering, Sheffield Water Centre, The University of Sheffield, Sheffield, Reino Unido*

msmartinez@fq.edu.uy

Dentro de los Sistemas de Distribución de Agua Potable (SDAP), los sistemas secundarios (SSDAP) son infraestructuras (tanques de almacenamiento de agua, bombas, tuberías) utilizadas para almacenar, presurizar y transportar agua desde la red pública de distribución de agua (sistema primario) a los grifos del consumidor. En Montevideo los tanques son motivo de gran preocupación, pues son el punto de entrada de agua y el almacenamiento que abastece edificios completos[1]. Los largos tiempos de retención y la baja rotación de agua en estos sistemas pueden provocar cambios en las características fisicoquímicas del agua[2], así como la formación de sedimentos y *biofilms* microbianos[3].

En este trabajo se analizaron factores ambientales (temperatura y estacionalidad), características fisicoquímicas (pH, turbidez, cloro libre) y diferentes materiales de construcción (concreto y polietileno) para determinar su efecto sobre la estructura microbiana en un SSDAP de Montevideo. Para esto se analizaron datos de secuenciación 16S rRNA obtenidos de muestras de agua, *biofilm* y sedimento de dicho sistema a lo largo de un año, mediante análisis de redundancia (RDA) y PERMANOVA[4].

Los resultados muestran que la temperatura y el pH son los principales factores que afectan la estructura de la comunidad microbiana, mientras que el cloro residual ejerce una influencia secundaria. Además, la fase del sistema (agua, *biofilm* o sedimento) y el material de las superficies (polietileno y concreto) explicaron variaciones significativas en la composición bacteriana. Por otro lado, aunque la calidad del agua de entrada se mantuvo dentro de los límites regulatorios durante todo el año, la calidad microbiológica del agua de los tanques se vio afectada significativamente en verano. Estos cambios estacionales en la calidad del agua y en las comunidades microbianas convierten a los tanques de almacenamiento en verdaderos reservorios de riesgo sanitario, resaltando la urgencia de incorporarlos en los programas de monitoreo y de implementar estrategias de gestión específicas para mejorar la seguridad microbiológica del agua en el punto de consumo.

1. Slavik, I., Oliveira, K. R., Cheung, P. B. & Uhl, W. J. Water Health 18, 439–463 (2020).
2. Miyagi, K., Sano, K. & Hirai, I. Water Res. 119, 171–177 (2017).
3. Gomez-Alvarez, V., Liu, H., Pressman, J. G. & Wahman, D. G. ACS EST Water 1, 1283–1294 (2021).
4. Vass, M., Székely, A. J., Lindström, E. S. & Langenheder, S. Sci. Rep. 10, 2455 (2020).

Comparación morfológica y metabólica de las cepas ED65 y ATCC10970 de *Streptomyces rimosus*

Rubén Antonio Olivares Terrones[1]; Evangelina Esmeralda Quiñones-Aguilar[1]; César Iglesias[2], María Inés Siri[2]; Gabriel Rincón Enriquez[1]

[1]*Laboratorio de Fitopatología, Unidad de Biotecnología Vegetal, Centro de Investigación y Asistencia en Tecnología y Diseño del Estado de Jalisco, A.C. Zapopan, Jalisco, México.*

[2]*Área Microbiología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

ruolivares_al@ciatej.edu.mx

La cepa de actinobacteria ED65 fue aislada de un suelo agrícola de la región de la sierra madre occidental en el municipio de Tzintzio, Michoacán, México. Esta cepa presenta actividad antimicrobiana siendo capaz de inhibir el crecimiento de varios fitopatógenos lo que sugiere su potencial como agente de control biológico (Rico-Aguilar 2020). El análisis de identidad genómica promedio (ANI) mostró una similitud del 97.9 % con la cepa tipo de *Streptomyces rimosus* ATCC10970, lo que permitió agruparla dentro de esa especie. Sin embargo, la cepa ED65 presenta características morfológicas distintivas en cultivo *in vitro.* El objetivo de este trabajo es comparar los perfiles metabólicos de la cepa ED65 y de la cepa tipo de *S. rimosus* ATCC 10970, y relacionarlos con su actividad antimicrobiana frente a fitopatógenos. Ambas cepas se cultivaron en un medio sólido de sémola de trigo durante 13 días siguiendo la metodología de Ellaiah *et al.* (2004) y se realizaron extracciones acuosas en frío. Los extractos se filtraron y su actividad antimicrobiana se evaluó mediante la aplicación de 20 µL sobre sensidiscos depositados en placas de Petri con agar Mueller-Hinton y un tapete bacteriano de *Escherichia coli* ATCC 25922, observándose actividad positiva en ambos extractos. Como siguiente etapa, los extractos serán analizados mediante fraccionamiento por HPLC guiado por bioensayos de actividad antimicrobiana frente a fitopatógenos bacterianos y fúngicos. Las fracciones bioactivas se caracterizarán mediante espectrometría de masas (MS) y\o resonancia magnética nuclear (RMN), con el objetivo de asociar compuestos diferenciales con la actividad biológica observada y consolidar su potencial como agente de biocontrol.

Referencias:

Ellaiah, P., Srinivasulu, B., Adinarayana, K. (2004). Estudios de optimización sobre la producción de neomicina por una cepa mutante de *Streptomyces marinensis* en fermentación en estado sólido. Process Biochemistry. 39:529–534.

Rico-Aguilar, J. C. 2020. “Control biológico de bacterias fitopatógenas por actinomicetos.” Tesis de Maestría, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, México.

Caracterización molecular y bioquímica de cepas autóctonas de levaduras con potencial enológico

Sofía Giménez[1]; Gabriela Soler[2]; Gabriela Garmendia[1]; Paula Gonzalez[2]; Silvana Vero[1]

[1]*Laboratorio de Biotecnología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Área Bioquímica, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

sofiafernanda98@gmail.com

La caracterización molecular de levaduras enológicas permite identificar cepas con valor diferencial y potencial para reflejar la identidad microbiana local. En este estudio se analizaron dos cepas autóctonas: *Saccharomyces cerevisiae T-19-3FS* y *Starmerella bacillaris* T-19-3MS, previamente seleccionadas por su desempeño enológico, incluyendo resistencia a metabisulfito y etanol, cinética de fermentación, actividad β-glucosidasa y fenotipo killer. El objetivo fue tipificarlas genéticamente y compararlas con otras diez cepas de la misma especie, de diferentes orígenes. Para *S. cerevisiae* T-19-3FS se aplicó PCR de regiones interdelta utilizando los cebadores δ1-δ2 y δ12-δ2, mientras que *S. bacillaris* T-19-3MS fue analizada mediante RAPD-PCR con el cebador $(GTG)_3$. Se analizaron los productos de amplificación por electroforesis. Los perfiles obtenidos permitieron diferenciar de forma clara las cepas autóctonas de las de otros orígenes, evidenciando una marcada variabilidad genética intraespecífica. Estos resultados refuerzan la utilidad de ambas metodologías para la discriminación a nivel de cepa en las dos especies. El hallazgo de un perfil genético diferente resulta fundamental para su trazabilidad en fermentaciones en bodega.

Posteriormente, se evaluó el comportamiento fermentativo de las cepas en mostos de uva blanca y Tannat, tanto en condiciones estériles como no estériles. En mosto estéril, *S. cerevisiae* presentó la mayor producción de etanol, y los tratamientos co-inoculados con *S. bacillaris* no mostraron diferencias significativas, lo que indica que *S. cerevisiae* predomina en la fermentación. Ambos tratamientos difirieron significativamente de los fermentados obtenidos con *S. bacillaris*, que mostró menor rendimiento en etanol, probablemente debido a su metabolismo orientado también a la producción de compuestos como glicerol y ácido succínico.

En condiciones no estériles, se observó una mayor producción de etanol en comparación con el mosto estéril, especialmente en el tratamiento con *S. cerevisiae* en uva blanca, que alcanzó el valor más alto de etanol y se diferenció significativamente del resto de los tratamientos. Mediante análisis de regiones interdelta se determinó que la cepa predominante en la fermentación era la cepa inoculada *S. cerevisiae* T-19-3FS, cuyo perfil de diferenció de las cepas presentes naturalmente en el mosto. Esto refuerza la idea de que *S. cerevisiae* T-19-3FS mantiene un buen desempeño fermentativo incluso en presencia de otros microorganismos.

Caracterización de una uracil fosforribosiltransferasa recombinante termófila con potencial como biocatalizador

Agustina Arrieta[1]; Valeria Grazú[2,3]; Cecilia Ortiz[1]; Lorena Betancor[1]

[1]*Laboratorio de Biotecnología, Facultad de Ingeniería, Universidad ORT Uruguay, Uruguay*

[2]*Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón, CSIC/Universidad de Zaragoza, España*

[3]*Centro de Investigación Biomédica en Red de Bioingeniería, Biomateriales y Nanomedicina, España*

aarrietaron@gmail.com

Las uracil fosforribosil transferasas (UFRTs, EC 2.4.2.9) catalizan la transferencia de un grupo fosforribosil desde PRPP al uracilo, formando UMP, un nucleótido esencial en la biosíntesis de ácidos nucleicos. Estas enzimas están ausentes en humanos lo que las convierte en herramientas altamente selectivas para aplicaciones biomédicas. Su promiscuidad de sustrato permite además fosforribosilar al agente quimioterapéutico 5-fluorouracilo (5-FU), generando metabolitos citotóxicos (1). La expresión y estructura cuaternaria de las UFRTs varían entre organismos, y su estado oligomérico se asocia frecuentemente con su actividad y estabilidad, sugiriendo un rol funcional clave.

En este trabajo se estudió la expresión, purificación y estructura cuaternaria de la UFRT de *Thermus thermophilus*, expresada de forma recombinante en *E. coli*. Asimismo, se evaluó su capacidad para transformar uracilo y 5-FU como sustratos. Esta enzima es una variante termófila robusta, con temperatura óptima de 60 °C y tolerancia a un amplio rango de pH (5.5–9), lo que la convierte en una candidata para aplicaciones biotecnológicas y terapéuticas. Se obtuvo un rendimiento de 1,87 mg/g de pellet celular y una pureza superior al 95 % por SDS-PAGE. El análisis por cromatografía de exclusión molecular (SEC) mostró un equilibrio entre especies monoméricas (~28 kDa) y tetraméricas (~120 kDa), siendo esta última la predominante.

La actividad enzimática se evaluó por HPLC utilizando uracilo como sustrato, con diferentes concentraciones de UFRT (0,6; 0,06 y 0,008 mg/mL), observándose conversión completa en todos los casos tras 1 hora de incubación, con diferencias en la velocidad inicial de reacción según la concentración. Los ensayos a 25 °C, 37 °C y 60 °C confirmaron su naturaleza termófila. La actividad específica determinada fue de 0,017 $\mu mol \cdot min^{-1} \cdot mg^{-1}$. Al emplear 5-FU como sustrato, se observó una conversión del 7 % en 1 hora, lo que respalda su promiscuidad de sustrato y potencial aplicación en sistemas terapéuticos enzimáticos. Estos resultados respaldan la continuación de estudios bioquímicos y de inmovilización para su aplicación biotecnológica.

Referencias

1. Ghosh AC. *Scientifics Reports* 5, 13176. (2015).

Preparación de nanopartículas de oro funcionalizadas con polisacáridos O-específicos de aislados de *E. coli* de mastitis bovina

Cecilia Pérez; Juliana Miranda; Florencia Luzardo; Sylvia Cuchman; Carolina Fontana

Laboratorio de Química Orgánica, Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte, UdelaR, Paysandú, Uruguay.
ceciliaperez@fq.edu.uy

Dentro de las bacterias Gram-negativas, la familia *Enterobacteriaceae* comprende algunos de los patógenos más comunes en muestras clínicas, como *Escherichia coli*, *Klebsiella*, *Shigella*, *Salmonella* y *Serratia*, entre otros. Aunque *E. coli* es una bacteria comensal habitual del intestino de animales de sangre caliente, algunas cepas han adquirido factores de virulencia que las convierte en agentes etiológicos de diversas infecciones. Si bien estas cepas no producen enfermedades tan alarmantes, y los antibióticos son la primera opción de tratamiento frente a estas infecciones, la rápida evolución de variantes multirresistentes resulta cada vez más preocupante. En este contexto, se vuelve evidente la necesidad de contar con vacunas comerciales eficaces para combatir infecciones recurrentes causadas por variantes específicas que afectan a la producción ganadera. Asimismo, el desarrollo de biosensores que permitan monitorear de forma más eficiente y accesible la prevalencia de determinados serogrupos en la región podría constituir una herramienta clave para el diseño de vacunas más ajustadas a la realidad epidemiológica nacional.

En este trabajo exploramos el uso de nanopartículas metálicas funcionalizadas con polisacáridos (PS) bacterianos como herramienta para el diseño de nuevas vacunas. Paralelamente, esta estrategia podría contribuir al desarrollo de biosensores portátiles para su uso en establecimientos ganaderos.

Generalmente, las estrategias más comunes para el diseño de este tipo de vacunas se basan en el empleo de oligosacáridos sintéticos acoplados covalentemente a superficies metálicas. Las nanopartículas de oro (AuNPs) resultan particularmente atractivas debido a su baja toxicidad, su relativa inercia química y facilidad con la que puede modificarse su superficie. Por otra parte, también se ha reportado la obtención de biomiméticos mediante la estabilización de la superficie metálica por interacciones electrostáticas con glicopolímeros, que presentaron una interesante estabilidad a lo largo del tiempo

Este trabajo tiene como objetivo evaluar estrategias de funcionalización de AuNPs con PS bacterianos (antígenos O-específicos) mediante interacciones electrostáticas. Los PS fueron obtenidos a partir de cepas de *E. coli* aisladas de muestras de leche de vacas con mastitis. Los cultivos se realizaron en medio LB a 37°C. Se obtuvieron por tratamiento secuencial de los pellets celulares con AcOH 1% y NH_4OH 12%, y purificados por cromatografía de gel filtración. El material obtenido fue caracterizado por espectroscopía de ^{1}H-RMN en D_2O. Las AuNPs se sintetizaron empleando $HAuCl_4$ como precursor, citrato de sodio y/o maltodextrina, como agente reductor y estabilizante, siguiendo un método reportado previamente (Ojea-Jiménez et. al, J. Phys. Chem. C 2010, 114, 1800-1804), e incluyendo los PS durante el proceso. El tamaño de las NPs fue monitoreado por espectroscopía UV-visible, observándose un máximo de resonancia plasmónica entre 516-520 nm, sugiriendo la formación de NPs esféricas y monodispersas. Los radios hidrodinámicos de las NPs sin funcionalizar, determinados por dispersión de luz dinámica (DLS), se encontraron entre 4 y 6 nm. Finalmente, se evaluó la estabilidad coloidal de los sistemas a lo largo del tiempo.

Nanoadyuvantes y microbiota intestinal:

efectos inducidos tras administración subcutánea

Diego M. Roldán[1]; Ana Clara Muniz-Lagos[2]; Gustavo Mourglia-Ettlin[2]; Silvana Alborés[1]

[1]Laboratorio de Biotecnología, Área de Microbiología, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

[1]Área Inmunología, DEPBIO. Facultad de Química, Universidad de la República. Montevideo, Uruguay

droldan@fq.edu.uy

Los adyuvantes desempeñan un rol esencial en la eficacia de las vacunas al potenciar la respuesta inmune en el individuo inmunizado, pero su influencia secundaria sobre la microbiota intestinal del mismo es aún poco comprendida. En este estudio, evaluamos los efectos de la administración subcutánea de un adyuvante convencional (alúmina) y de dos prototipos de nanoadyuvantes basados en nanopartículas de plata biogénicas sintetizadas a partir de hongos, sobre la microbiota fecal de ratones CD-1; realizando análisis de secuenciación masiva de amplicones para la región V3-V4 del gen ARNr16S.

Los ratones se inmunizaron por vía subcutánea con ovoalbúmina (OVA) -antígeno proteico modelo- mezclado con los distintos adyuvantes, o con solución salina como control. Las inmunizaciones se realizaron siguiendo un esquema de *priming* (día 0) y *booster* (día 14), y 30 días post-*priming* se recolectaron muestras fecales de los animales y se procesaron para análisis metagenómico. Los datos se analizaron con las herramientas DADA2, Phyloseq y DESeq2 en R, considerando diversidad alfa y beta, así como abundancia diferencial.

Firmicutes y *Bacteroidota* fueron los phyla dominantes en todas las muestras analizadas. En los ratones inmunizados con alúmina se observó una disminución de *Firmicutes*, grupo asociado a funciones antiinflamatorias, y un aumento relativo de *Bacteroidota*, vinculados a respuestas proinflamatorias, lo que podría reflejar un estado de activación inmune o inflamación sistémica inducido por la inmunización. Un patrón similar se registró en los grupos tratados con nanopartículas, aunque en estos también se detectó un aumento relativo de *Actinobacteriota*.

Los resultados sugieren que las nanopartículas utilizadas como adyuvantes de administración subcutánea generan alteraciones en la microbiota intestinal similares a las del adyuvante alúmina, por lo que sería necesario evaluar su impacto en el microbioma del individuo a inmunizar en etapas tempranas del desarrollo de nuevas vacunas.

Exploración de metabolitos halogenados mediante activación de BGCs cripticos en Streptomyces por estrategia OSMAC y análisis HPLC-UV/MS

Fiorella Ríos; Valentina Croce; María Inés Siri; Cesar Iglesias

Laboratorio de Microbiología Molecular, Departamento de Biociencias, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

fiorellarios1804@gmail.com

El género *Streptomyces* se distingue por su capacidad biosintética, responsable de más del 60% de los antibióticos naturales conocidos, así como de otros metabolitos con propiedades anticancerígenas, inmunosupresoras y antifúngicas, relevantes en biotecnología y farmacología[1]. Dentro de esta diversa capacidad biosintética, *Streptomyces* es conocida por presentar enzimas halogenasas, las cuales son fundamentales en la incorporación de átomos de halógenos en las estructuras moleculares de los metabolitos. Esta halogenación a menudo confiere propiedades biológicas únicas y mejoradas a los compuestos resultantes[2]. Este trabajo se enfoca en la identificación de nuevos metabolitos secundarios halogenados producidos por cepas de *Streptomyces* aisladas de suelos uruguayos. La relevancia de las cepas de *Streptomyces* empleadas en este estudio radica en la detección previa de clústers de genes biosintéticos (BCGs) que contienen genes de enzimas halogenasas. Para estimular la producción de estos compuestos, se aplica el método OSMAC (One Strain Many Compounds). Esta estrategia se basa en la premisa de que la exposición de los microorganismos a diversas condiciones de estrés o a cambios en su entorno de cultivo puede activar rutas metabólicas silenciosas. Las condiciones de estrés aplicadas incluyen el co-cultivo con *Escherichia coli* y *Bacillus subtilis*, alta concentración de NaCl, y la adición de lantano como estímulo abiótico. Después del cultivo, los sobrenadantes se extraen y se analizan mediante HPLC-UV/Vis para obtener un perfil de metabolitos. La aparición de picos diferenciales, que podrían corresponder a compuestos producidos bajo estrés y que están escasos o ausentes en condiciones normales, sugiere la activación de rutas biosintéticas cripticas. Finalmente, los picos de interés se sometieron a HPLC-MS para su identificación preliminar y caracterización estructural primaria. Hasta el momento, los resultados del análisis mediante HPLC UV/Vis muestran la aparición de picos diferenciales en todas las condiciones de estrés utilizadas que demuestra la activación de BGCs crípticos y se está trabajando en el análisis de los HPLC-MS.(Figura 1)

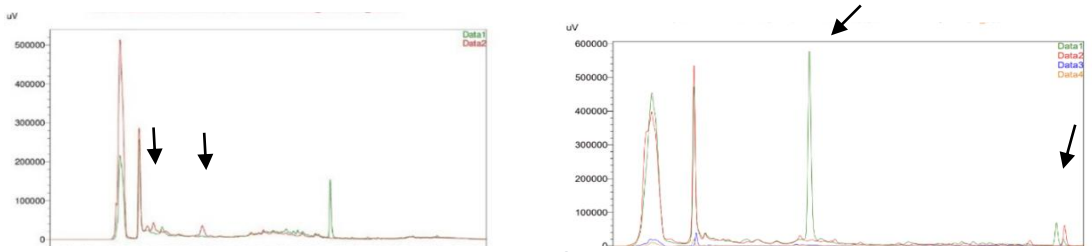


Figura 1: Cromatogramas HPLC UV/Vis *ejemplos de activación diferencial*: Izq: En rojo el cultivo con alta concentración de NaCl y en verde en condiciones estándar. Der: en verde el co-cultivo con *Escherichia coli* y en rojo condiciones estándar.

(1) Van Der Meij, A.; Worsley, S. F.; Hutchings, M. I.; Van Wezel, G. P. Chemical Ecology of Antibiotic Production by Actinomycetes. *FEMS Microbiol. Rev.* **2017**, *41* (3), 392–416.
(2) Lee, J.; Kim, J.; Kim, H.; Kim, E.; Jeong, H.; Choi, K.; Kim, B. Characterization of a Tryptophan 6-Halogenase from *Streptomyces Albus* and Its Regioselectivity Determinants. *ChemBioChem* **2020**, *21* (10), 1446–1452.

Nanopartículas de plata biogénicas eficaces contra Salmonella multirresistente: evaluación citotóxica en Huh-7

Valeria Elizalde[1]; Camila Barrero[2]; Marcelo de Jesus[2]; Silvana Albores[1]

[1]Laboratorio de Biotecnología, Área de Microbiología, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.
[2]Laboratorio de interacciones Nanopartículas-Célula, Departamento de Bioquímica, Universidad de Campinas, Brasil

velizalde@fcien.edu.uy

El avance de la Nanotecnología ha impulsado el desarrollo de nanopartículas metálicas como estrategias innovadoras para el control de patógenos multirresistentes. Entre ellas, las nanopartículas de plata de síntesis biológica (AgNPs) han mostrado propiedades antimicrobianas prometedoras y en algunos casos mayor biocompatibilidad que las obtenidas por métodos convencionales. Este estudio se centró en la evaluación de la citotoxicidad en células humanas Huh-7, de AgNPs sintetizadas por cepas fúngicas (*Phanerochaete chrysosporium, Penicillium expansum* y *Punctularia atropurpurascens*), que presentan actividad antimicrobiana frente a cepas de *Salmonella* multirresistentes. Las AgNPs fueron aplicadas en un rango de concentraciones crecientes (1,6 pM- 200 pM), y su efecto sobre la viabilidad celular se analizó mediante dos ensayos complementarios: MTT, que mide la actividad metabólica, y Calceína-AM/Propidio yoduro, que distingue células viables y no viables mediante marcación fluorescente. Ambas metodologías permitieron identificar respuestas celulares dependientes de la concentración y cambios morfológicos compatibles con efectos citotóxicos leves a moderados. De las AgNPs evaluadas, las PeNPs presentaron los valores de IC50 más altos en ambos ensayos, lo que indica una menor citotoxicidad comparativa y una mayor compatibilidad con células eucariotas a las concentraciones evaluadas.

Los resultados representan un paso inicial relevante para la caracterización del perfil de seguridad de estas nanopartículas en condiciones controladas, respaldando su potencial uso futuro como herramienta alternativa en el control de infecciones bacterianas.

Agradecimientos: Programa de Movilidad-CSIC, UDELAR, UNICAMP, ANII, PEDECIBA

Producción y purificación de PNGasa F de *E. miricola*, para su aplicación al control de calidad de biofármacos

Fabián Mancioni; Yamira Quintero; Cecilia Giacomini; Cecilia Porciúncula; Agustín Castilla

Área Bioquímica, DEPBIO, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

fabimancioni@gmail.com

Las glicoproteínas median numerosos procesos fisiológicos, por lo que patrones alterados de su glicosilación están asociados a diversas patologías. La elucidación estructural de estos glicanos es fundamental para comprender su rol en procesos fisiológicos y patológicos, así como contribuir al diseño de nuevos métodos diagnóstico y de tratamientos. También es de gran relevancia para garantizar la homogeneidad e inocuidad de biofármacos de naturaleza glicoproteica. El estudio de los *N*-glicanos requiere necesariamente de una etapa ineludible de remoción de la glicoproteína. Diversas estrategias han sido aplicadas en este campo, siendo la deglicosilación enzimática una de las más frecuentes. Una de las enzimas más utilizadas para ello es la péptido-*N*-glicosidasa F (PNGasa F) para su posterior análisis. Esta enzima es la encargada de catalizar la hidrólisis de los enlaces amida formados entre los residuos de asparagina (Asn) y la *N*-acetilglucosamina terminal (GlcNAc) del *N*-glicano a separar.

La PNGasa F comercialmente disponible más utilizada, es la de *Elizabethkingia miricola.* Tiene un peso molecular de 36 kDa, un pH óptimo de 8.6 y es estable en un rango de pH de 7.5-9.5. Actualmente, esta enzima se importa a un precio muy elevado.

En este trabajo se llevó a cabo clonado y expresión, de dos construcciones de la PNGasa F de *Elizabethkingia. miricola,* en cepas de *Escherichia coli.* De esta forma se desarrollaron los clones denominados PNGasa ompA para la expresión en periplasma y PNGasa 767 asociada a Glutatión S-transferasa (GST).

Se cultivaron los clones en medio de autoinducción, se exploró la producción de la enzima de interés y se evaluaron diversas condiciones de expresión para mejorar la relación proteína soluble/insoluble. Para la construcción OmpA se diseñó un protocolo de purificación en las condiciones que se obtuvo mayor expresión soluble, mientras que sobre la construcción PNGasa 767 se exploró condiciones de resolubilización y replegamiento de la proteína. Finalmente se evaluó la actividad enzimática de la PNGasa purificada con la glicoproteína RNAsa B como sustrato, a 37°C y pH 7,5, de acuerdo con el protocolo estándar. El perfil de deglicosilación se evaluó por electroforesis desnaturalizante, observando que demostró tener una actividad hidrolítica comparable a la de PNGasa F comercial.

El lograr producir esta enzima a nivel local, implica una gran contribución en el desarrollo de un área de creciente interés como es la glicobiología a nivel nacional, independizándose de los elevados costos de compra e importación para adquirir la misma.

Propiedades magnéticas de tetrafenil-porfirinas de cobalto adsorbidas selectivamente sobre sustratos aislantes.

Benjamín Montenegro; Ricardo Faccio; Álvaro W. Mombrú

Área Física, Departamento de Experimentación y Teoría de la Estructura de la Materia y sus Aplicaciones (DETEMA), Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

montenegro@fq.edu.uy

La espintrónica y la electrónica molecular han captado en forma importante la atención de la comunidad científica en los últimos tiempos. Esta área del conocimiento no sólo se dedica a explicar lo interesante de las nuevas propiedades que ofrece la nanoescala, sino que ofrece un potencial importante ante la cota que está alcanzando la electrónica convencional. La nanotecnología y la posibilidad de preparar y manipular sistemas a nivel molecular dan lugar a la obtención de nuevas propiedades y aplicaciones. Algunos ejemplos son los avances que se han logrado en temas tan importantes y variados como catálisis, energía, electrónica, etc [1]. Un tipo de sistema que ha tomado relevancia en los últimos tiempos es el ensamble híbrido de interfaces molécula/superficie. Las moléculas de estructura basadas en porfirinas ofrecen una impresionante variedad de comportamientos: químico, físico y biológico. La variabilidad de los metales y sustituyentes con las que pueden sintetizarse las porfirinas les dan a estas moléculas una gran cantidad de aplicaciones: en celdas solares de sensibilización espectral (DSSC) como colorantes, en spintrónica y como switches moleculares, entre otras [1-3]. En este trabajo se presentan los resultados obtenidos mediante cálculos DFT para la adsorción de tetrafenil-porfirinas metálicas de cobalto (CoTPP) sobre superficies de Cu_3N/Cu(110). En los cuales se observa gran variabilidad de propiedades electrónicas: densidad de estados, densidad de carga; y las propiedades magnéticas dependiendo del sitio de adsorción de la molécula. Lo cual podría utilizarse tanto en electrónica molecular como en espintrónica.

[1] Auwärter, W., et al., Nature chemistry, 2015. 7(2): p. 105.

[2] Zoldan, V.C., R. Faccio, and A.A. Pasa, Scientific Reports, 2015. 5: p. 8350.

[3] B.F. Baggio, W. Chen, B. Montenegro, M.A. Tumelero, R. Faccio, V.C. Zoldan, C. Gao, A.A. Pasa, The Journal of Physical Chemistry C, 125 (2021) 9695-9702.

Evaluación de extractos de *Calendula officinalis* como agente de funcionalización para nanopartículas de oro

Hiroyuki Kinoshita[1]; Mauricio Ávila[1]; Pablo Fagúndez[2]; María Fernanda Cerdá[1]

[1]*Laboratorio Biomateriales, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, UDELAR, Montevideo, Uruguay*

[2]*Unidad de Bioquímica Analítica, Centro de Investigaciones Nucleares, Facultad de Ciencias, UDELAR, Montevideo, Uruguay*

hiroyuki.amb@gmail.com

En un siglo donde las aplicaciones nanotecnológicas son de gran relevancia, las nanopartículas metálicas son especialmente interesantes por sus propiedades ópticas, electrónicas y catalíticas. Su uso ha sido ampliamente reportado con distintos fines, y en particular en celdas solares sensibilizadas con pigmentos (DSSC) (B. K. Korir *et. al.,* 2024).
En este trabajo se evaluaron extractos obtenidos de *Calendula officinalis* como agente de funcionalización para nanopartículas de oro (AuNP). La *Calendula Officinalis*, de la familia Asteraceae, es una planta perenne anual que posee flores de colores anaranjados y amarillos. Sus extractos (Cale) son ricos en carotenoides (principalmente flavoxantina, luteoxantina y licopeno), flavonoides y xantofila (F. M. Vella *et. al.,* 2024). Debido a sus grupos funcionales hidroxilos, constituyen una opción atractiva para la funcionalización de nanopartículas. Como punto de partida, se sintetizaron y caracterizaron completamente AuNP reducidas con citrato (AuNP-Cit). Luego de la incubación en presencia de los extractos de flores, como resultado se obtuvo un nanoconjugado de AuNP-Cale que fue caracterizado mediante técnicas espectroscópicas (tanto UV-visible como FTIR), dynamic light scattering (DLS), transmission electron microscopy (TEM), electrophoretic light scattering (ELS), voltamperometría cíclica y ensayos de estabilidad coloidal. El diámetro hidrodinámico (Medido por DLS) aumentó de (19 ± 3) nm con (PDI) de 0.23 ± 0.03 en las AuNP-Cit a (25 ± 3) nm con (PDI) de 0.29 ± 0.01. El potencial zeta medio por (ELS) pasó de (-52 ± 2) mV en AuNP-Cit a (-2 ± 6) mV de AuNP-Cale. La estabilidad coloidal (medida por espectrofotometría UV-Vis, concentraciones crecientes de NaCl) aumentó de (22 ± 2) nm para AuNP-Cit a (61 ± 1) nm para AuNP-Cale. Los resultados obtenidos hacen interesantes la funcionalización de AuNP-Cale, una reducción del potencial zeta, en conjunto con las otras técnicas confirman la funcionalización. En el ensayo de estabilidad coloidal, demostramos que se puede usar extracto de caléndula para mejorar la estabilidad de las AuNPs.

Referencias:
B. K. Korir, J. K. Kibet, y S. M. Ngari, «A review on the current status of dye-sensitized solar cells: Toward sustainable energy», Energy Science & Engineering, vol. 12, n.o 8, pp. 3188-3226, ago. 2024, doi: 10.1002/ese3.1815.
F. M. Vella, D. Pignone, y B. Laratta, «The Mediterranean Species Calendula officinalis and Foeniculum vulgare as Valuable Source of Bioactive Compounds«, Molecules, vol.29, n.o15, p. 3594, jul. 2024, doi: 10.3390/molecules29153594.

Catalizadores Ni/$Y_2Zr_2O_7$ dopados con Ce^{4+} para la producción de hidrógeno a partir de la descomposición catalítica del amoníaco

Leila Reyes; Agustina Moreira; Santiago Veiga; Juan Bussi; Mauricio Musso

Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay

mattosreyesleila@gmail.com

La utilización de hidrógeno (H_2) como vector energético limpio y renovable ha cobrado interés en la actualidad como respuesta al calentamiento global debido a las emisiones de gases de efecto de invernadero producidos a partir de la quema de combustibles fósiles. Su baja densidad, su difícil compresión y su alta difusibilidad a través de las paredes de los recipientes presurizados hacen que actualmente su almacenamiento sea todavía un desafío. En este sentido, una alternativa interesante es la utilización de compuestos químicos ricos en H_2 y propiedades que faciliten su almacenamiento en condiciones mucho más moderadas de presión y temperatura, siendo comúnmente denominado este proceso "almacenamiento químico". Dentro de los distintos compuestos propuestos, el amoníaco (NH_3) ha ganado considerable interés debido a su alto contenido en H por molécula (17,8 % en peso), estabilidad química y facilidad para su almacenamiento (8 bar a 20 °C). La obtención de H_2 puede realizarse por descomposición del NH_3 ($NH_3 \rightarrow 3/2H_2 + ½N_2$), también llamado cracking catalítico, lo cual es favorecido por el empleo de catalizadores. En este sentido, catalizadores con alta actividad son necesarios para favorecer la velocidad del proceso y, de esa forma, mejorarlo en aspectos vinculados al equipamiento y al consumo energético del mismo.

En el siguiente trabajo catalizadores conteniendo 15 % en peso de Ni soportados sobre un óxido mixto conteniendo Y y Zr dopados con Ce^{4+} ($Ni/Y_2Zr_{2-x}Ce_xO_{7-\delta}$, nomenclatura: NYZCx) son ensayados en la descomposición del NH_3 en el rango de 400-700 °C. Los resultados muestran que el dopaje con Ce^{4+} tiene un efecto promotor en la actividad catalítica por encima de los 550 °C, con un máximo para NYZ0.2 ($Ni/Y_2Zr_{1.8}Ce_{0.2}O_{7-\delta}$) con respecto al catalizador sin dopar (NYZC0) pero por encima de x = 0.4 la actividad disminuye (Fig. 1).

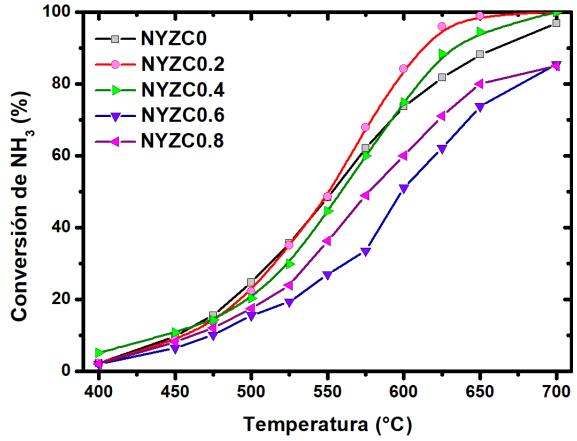


Fig. 1. Conversión de NH_3 en función de la temperatura usando catalizadores NYZC

Caracterización óptica de óxidos de titanio obtenidos mediante electrólisis de descarga incandescente

Melisa Olivera Rohrer[1]; Luciana Fernández Werner[2]; Javier Pereyra[3]; Andrea De León[4]; Ricardo Faccio[2]; Juan Bussi[4]

[1]*Instituto de Ensayo de Materiales, Facultad de Ingeniería, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[2]*Centro NanoMat/ CryssMat-Lab. & Grupo Física, DETEMA, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[3]*Instituto de Física, Facultad de Ingeniería, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[4]*LAFIDESU, Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

molivera@fing.edu.uy

A partir de una electrólisis de alto voltaje [1], se oxidó titanio metálico con el fin de obtener TiO_{2-x}, un semiconductor con potencial para aplicaciones en fotocatálisis y celdas solares, entre otras. Las variables de la electrólisis fueron el voltaje (450 – 850 V) y los diámetros de ánodo de titanio (0,25 - 1 mm). Al caracterizar los materiales obtenidos mediante difracción de rayos X, se observó que consisten en óxidos de titanio con diferentes niveles de oxidación. Se identificaron los polimorfos rutilo y anatasa del TiO_2, que podrían consistir en el TiO_{2-x} buscado, y además subóxidos de titanio (Ti_nO_{2n-1}) como el Ti_3O_5. Para estudiar sus propiedades ópticas, se determinaron espectros de reflectancia difusa y absorbancia, los cuales se relacionaron con la composición de los materiales y las variables de síntesis. Asimismo, se determinaron los bordes de absorción utilizando el método de Tauc [2].

Los resultados mostraron que, a menores diámetros y mayores voltajes, mayor es la presencia de subóxidos. Para el diámetro mayor de ánodo,1 mm, la presencia de TiO_2 fue mayor (~ 90% m/m), en todo el rango de voltaje. En cuanto a los espectros de absorbancia, para las muestras sin presencia destacable de subóxidos (< 10 % m/m), se observó un borde de absorción alrededor de los 3 eV, con un perfil que podría resultar de la superposición de un pico con un escalón. Los valores de energías determinados mediante el método Tauc cayeron en el rango de 2,9 y 3,3 eV. Mientras que para las muestras con más de un 30% m/m en subóxidos, los gráficos de absorbancia cambian apreciablemente, presentando un pico alrededor de los 2,2 eV superpuesto con otro en 3,2 eV aproximadamente.

En este trabajo, se presentarán y discutirán los resultados de la caracterización óptica mencionada, analizando la influencia de las variables estudiadas en la síntesis.

[1] Panomsuwan G, Watthanaphanit A, Ishizaki T, Saito N. Phys Chem Chem Phys. 2015;17:13794–13799.

[2] Pereyra J. Propiedades ópticas de materiales nanoestructurados [Tesis de maestría]. Montevideo: Udelar; 2013.

Estudio del proceso sol-gel de SiO_2 y sus propiedades texturales mediante una metodología de diseño experimental

Mauricio Cardoso; Martín Torres; Eloísa Arrarte; Jorge Castiglioni

Área Fisicoquímica – DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay.

mcardoso@fq.edu.uy

La formación de óxido de silicio (SiO_2) a partir de silicato de sodio (Na_2SiO_3) en condiciones ácidas se produce mediante un proceso sol-gel, que se inicia con la formación y polimerización de ácido silícico (H_4SiO_4) para dar pequeños coloides que luego crecen en tamaño y se agregan entre sí. Finalmente, estos agregados forman una red tridimensional que da lugar a un gel [1]. El inicio de esta última etapa se conoce como tiempo de gelificación (t_g) y depende de las condiciones de síntesis [2]. Este tiempo es posible obtenerlo a partir de medidas ópticas [3]. El equipo de investigación obtuvo los datos a partir de medidas de dispersión de luz. El tiempo de gelificación y las propiedades texturales del SiO_2, como el área superficial (S_{BET}) y el volumen de poro (V_p), dependen de las condiciones de síntesis y son parámetros claves en las diversas aplicaciones tecnológicas del material [4]. En este sentido, con el fin de optimizar el proceso de formación del gel de forma de obtener las condiciones de síntesis que maximicen el área superficial de SiO_2 y minimicen el tiempo de formación, se realizó un diseño experimental con la concentración de SiO_3^{-2}, el pH y la temperatura (T) como las variables experimentales en tres niveles, y como variables de respuesta se utilizó t_g y S_{BET}.

El resultado fue la obtención de dos modelos matemáticos que se detallan en las ecuaciones 1 y 2. Estos explican la relación de las variables experimentales con $Ln(S_{BET})$ y $Ln(t_g)$.

(1) $Ln(S_{BET}) = 6.3000 - 0.1151.[SiO_3^{-2}] - 0.2220.pH - 0.967.T - 0.1523.[SiO_3^{-2}].pH - 0.0784.pH.T + 0.1372.T^2 + 0.1667.pH.T^2$

(2) $Ln(t_g) = 9.6435 - 0.1482[SiO_3^{-2}] + 1.4726.pH - 0.0866.T + 0.0014.[SiO_3^{-2}]^2 - 0.5663.pH$

Referencias:

[1] Noppari, P., Laukkanen, O. V., & Seppälä, J. (2025). Analyzing the sol-gel transition of colloidal silica suspensions using time-resolved rheometry. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, *710*. https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2025.136290

[2] Hamouda, A. A., & Amiri, H. A. A. (2014). Factors affecting alkaline sodium silicate gelation for in-depth reservoir profile modification. *Energies*, *7*(2), 568–590. https://doi.org/10.3390/en7020568

[3] Matinfar, M., & Nychka, J. A. (2024). Process Mapping of the Sol–Gel Transition in Acid-Initiated Sodium Silicate Solutions. *Gels*, *10*(10). https://doi.org/10.3390/gels10100673

[4] Matinfar, M., & Nychka, J. A. (2023). A review of sodium silicate solutions: Structure, gelation, and syneresis. In *Advances in Colloid and Interface Science* (Vol. 322). Elsevier B.V. https://doi.org/10.1016/j.cis.2023.103036

Efecto del tipo de surfactante en la preparación de materiales porosos heteroestructurados a partir de una arcilla natural

Noelia Méndez; Andrea De León

Laboratorio de Fisicoquímica de Superficies, Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

nmendez@fq.edu.uy

Las arcillas constituyen un recurso presente en la superficie terrestre que es accesible, abundante y de bajo costo. Dentro de ellas, las montmorillonitas se caracterizan por poseer una gran capacidad para intercambiar iones, así como también de expandir considerablemente su estructura. Estas características las convierten en materiales de partida versátiles para una gran diversidad de aplicaciones, tales como la preparación de materiales porosos heteroestructurados (PCH, *Porous Clay Heterostructure*). Estos materiales se pueden utilizar como catalizadores, adsorbentes y matrices porosas, entre otras aplicaciones, debido a su elevada área específica, volumen de poros y alta estabilidad térmica y mecánica. En términos generales, la preparación de PCHs se realiza mediante el tratamiento de una arcilla con un surfactante y tetraetoxisilano (TEOS) como precursor de sílice, finalizando con una calcinación que da lugar a la estructura final del PCH.

En este trabajo se prepararon con éxito PCHs a partir de una montmorillonita natural uruguaya de alta pureza, la cual fue pretratada mediante secado y molienda. Se realizaron síntesis con soluciones acuosas 0,1 mol/L de dos surfactantes diferentes, bromuro de hexadeciltrimetilamonio (CTAB, a 50 °C) y cloruro de hexadeciltrimetilamonio (CTAC, a temperatura ambiente). Adicionalmente, se evaluó en cada caso la incorporación de hexadecilamina (HDA) como co-surfactante en diferentes concentraciones, 0,1 mol/L y 0,2 mol/L, manteniendo una relación molar HDA:TEOS de 1:7,5. La arcilla y los materiales obtenidos se caracterizaron mediante diferentes técnicas.

A partir de las isotermas de adsorción-desorción de nitrógeno se determinó que, tanto al utilizar CTAB como CTAC, junto con 0,1 mol/L de HDA, los PCHs obtenidos tienen valores de las propiedades texturales, área específica y volumen total de poros, significativamente mayores (427 m^2/g y 0,317 cm^3/g al usar CTAC y 394 m^2/g y 0,331 cm^3/g con CTAB) que la arcilla (28 m^2/g y 0,043 cm^3/g). Además, el área específica y el volumen de microporos para los materiales preparados con CTAB resultaron levemente menores que los correspondientes a los materiales preparados con CTAC. Por su parte, el uso de HDA tiene un rol significativo tanto en la incorporación efectiva de sílice, así como en el desarrollo de la red porosa heteroestructurada dado que, en su ausencia, los valores de las propiedades texturales son comparables a los de la arcilla. Estas observaciones son respaldadas por los resultados de contenido de Si determinados por FRX. A su vez, al incrementar la concentración de HDA a 0,2 mol/L se observó que el efecto más significativo fue un aumento en el porcentaje de volumen de mesoporos con respecto al volumen total de poros.

Evaluación de coagulantes para el tratamiento primario de efluentes agroindustriales del curado de semillas

María Ayala; Guillermo Zinola; Ángela Cabezas

Laboratorio de Efluentes, Departamento de Sostenibilidad Ambiental, Universidad Tecnológica (UTEC), ITR-CS, Uruguay

maria.ayala@utec.edu.uy

Los efluentes generados en plantas de curado de semillas presentan altas concentraciones de plaguicidas, carga orgánica, color intenso y metales pesados, lo que dificulta su tratamiento mediante métodos biológicos convencionales. Este estudio evaluó la eficiencia del proceso de coagulación-floculación como tratamiento primario, comparando cuatro coagulantes: sulfato de aluminio, cloruro férrico hexahidratado, cloruro de polialuminio (PAC) y un extracto natural de la planta invasora *Gleditsia triacanthos* (Acacia negra).

Se empleó un diseño completamente aleatorio con muestras compuestas homogéneas, utilizando la técnica de ensayo de jarras (NTC 3903:2010) [1] (Figura 1). Se analizaron Sólidos Totales (ST), Sólidos Suspendidos Totales (SST), Demanda Química de Oxígeno (DQO), turbidez, color verdadero, volumen de lodo y concentración de metales pesados (Cu, Zn, Cd, Ni, Pb y Cr). Se calcularon porcentajes de remoción y se aplicó análisis exploratorio de datos. Además, se elaboró una matriz de sostenibilidad que consideró criterios ambientales, sociales y económicos.

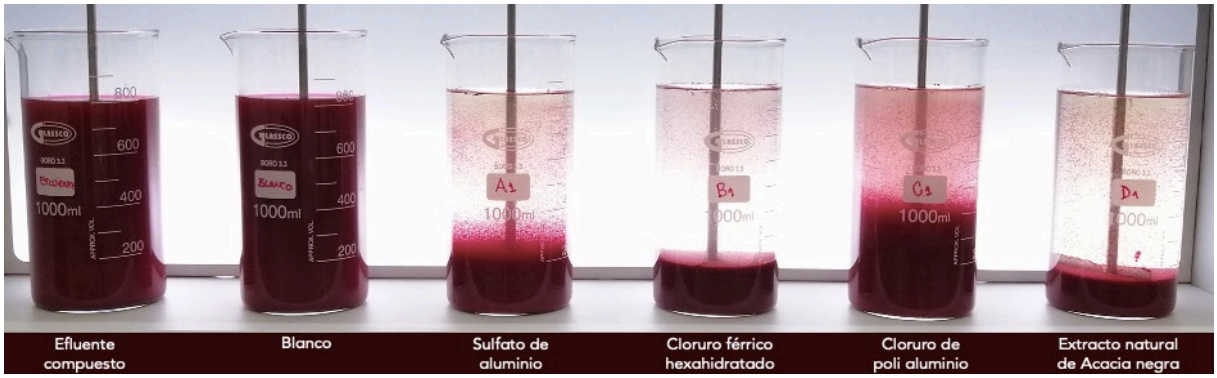


Figura 1: Evaluación del proceso de coagulación y floculación

Todos los coagulantes presentaron un buen desempeño ya que superaron el 90 % de remoción de SST y turbidez, y el 75% de remoción de DQO. Si bien el PAC y el extracto de Acacia negra fueron más eficaces en la remoción de color verdadero y Cu que el resto de los coagulantes, fue el extracto natural el que generó el menor volumen de lodo sedimentado. Al integrar su desempeño como coagulante y el índice de sostenibilidad, el extracto de Acacia negra resultó ser la mejor alternativa de las que fueron evaluadas para este efluente.

ICONTEC, “Procedimiento para el ensayo de coagulación-floculación en un recipiente con agua o método de jarras” Norma Técnica Colombiana NTC 3903:2010, Apr. 2010.

Combustión latente: del laboratorio al mercado

Roberto Rodríguez[1]; Gabriel Di Rienzo[1]; Martín Torres[2]; Andrés Cuña[2]; Mirian E. Casco[1]

[1]*Grupo de Materiales, Energía y Medioambiente (GMEM), Departamento de Ingeniería, Universidad Católica del Uruguay, Montevideo, Uruguay*

[2]*Laboratorio de Energías Renovables, Instituto Polo Tecnológico Pando, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

roberodri68@gmail.com, gabriel.dirienzo@gmail.com

La generación de residuos es inherente a cualquier proceso industrial, incluidos los agroindustriales, y generan impactos indeseados tanto en el ambiente como en las comunidades cercanas. En este trabajo, se evaluó la valorización un residuo de la industria cárnica mediante combustión latente (también conocido como smouldering en inglés).

La reacción de combustión latente se define como un proceso de combustión sin llama visible y de menor temperatura que su contraparte con llama. En ciertas condiciones puede ser autosostenible [1], y con una comprobada generación de gases combustibles [2], permitiendo una potencial revalorización de residuos. Un reactor de combustión latente es un cuerpo cilíndrico metálico aislado térmicamente, al cual se le inyecta aire por un extremo y por el otro se encuentra una salida de los gases de combustión. Para dar el calor inicial a la muestra, cuenta con una resistencia eléctrica en su base inferior, y monitoreo de la evolución de la temperatura a lo largo del reactor. En estos reactores, puede ser necesaria la incorporación de combustible suplementario, así como arena, con el propósito de mejorar el poder calorífico de la mezcla y la porosidad, respectivamente.

El objetivo principal de este trabajo es lograr una compatibilidad entre la técnica de combustión latente, y un mercado receptivo a soluciones. Por ello, el proyecto cuenta con dos etapas principales.

Durante la primera etapa, se trabajó con un modelo de viabilidad comercial de la aplicabilidad de la tecnología. Luego de una selección de candidatos posibles, se llegó a una instancia de validación de negocios con los candidatos, donde se decantó por la opción de residuos de la industria cárnica. En particular, el residuo para el cual no se tiene algún método de utilización es el lodo de los corrales de acopio previo a faena, afluente de la línea de aguas verdes de los frigoríficos bovinos.

Durante el módulo de laboratorio, se realizaron una serie de experimentos usando: lodo de corral como objetivo, rumen como biomasa, y arena. El caso de éxito fue de 5,70%, 41,67%, 52,63% respectivamente, en un flujo de 10 SLPM de entrada de aire al reactor. En la salida de gases, se detectó de forma cualitativa la presencia de metano, lo que marca un camino para proyectos futuros de esta línea de investigación.

Referencias

[1] J. L. Torero et al., (2020) Processes defining smouldering combustion: Integrated review and synthesis, *Prog Energ Combust*. 81, 100869. doi: 10.1016/j.pecs.2020.100869

[2] T. L. Rashwan et al., (2021) Scaling up self-sustained smouldering of sewage sludge for waste-to-energy, *Waste Manage*. 135, 298-308. doi: 10.1016/j.wasman.2021.09.004

Producción de hidrógeno de alta pureza a partir de la deshidrogenación del etanol utilizando catalizadores CuNiLaSiO

Agustina Moreira; Santiago Veiga; Juan Bussi; Mauricio Musso

Área Fisicoquímica, DETEMA, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay

agustinamoreiracontacto@gmail.com

El hidrógeno (H_2) producido a partir de recursos renovables y biomasa aparece como una alternativa de interés para cubrir, al menos parcialmente, la demanda energética mundial que actualmente es casi totalmente cubierta por combustibles fósiles (gas natural, petróleo, carbón mineral). Varios son los procesos por los cuales el H_2 puede ser obtenido a partir de fuentes tradicionales o alternativas. El reformado de hidrocarburos con vapor de agua es una tecnología madura que plantea la posibilidad de utilizar distintos tipos de materia prima (principalmente gas natural) para su conversión en H_2. Dentro de las alternativas renovables de interés está el etanol producido por fermentación de distintos tipos de biomasa (bioetanol) posee las ventajas de ser fácilmente almacenable, no tóxico y puede ser distribuido utilizando la red de combustibles actual. Por el otro lado, durante el proceso de reformado son producidas mezclas H_2-CO_2 las cuales es necesario pasar por sistemas de remoción de CO_2 para obtener un H_2 100 % puro. En este sentido, la producción de H_2 a partir de la deshidrogenación del etanol (primer paso del mecanismo de reformado) puede resultar interesante debido a la posibilidad de obtenerlo a baja temperatura y como único producto gaseoso: $C_2H_5OH \rightarrow H_2 + CH_3CHO$.

En el presente trabajo, catalizadores de Cu dopados con Ni y soportados sobre un óxido mixto conteniendo La_2O_3 y SiO_2 y ensayados en la deshidrogenación del etanol en el rango de 200-400 °C. Los resultados preliminares muestran que el dopaje con Ni en los catalizadores de Cu lleva a una mejora en las propiedades texturales del catalizador (área específica, tamaño de cristalita de fase activa). Por el otro lado, también se promueve la ruptura del enlace C-C del acetaldehído (CH_3CHO) que lleva a la formación de CH_4 y CO. Esto es apreciable con relaciones H_2/Etanol mayores a 1 por encima de 200 °C (Fig. 1).

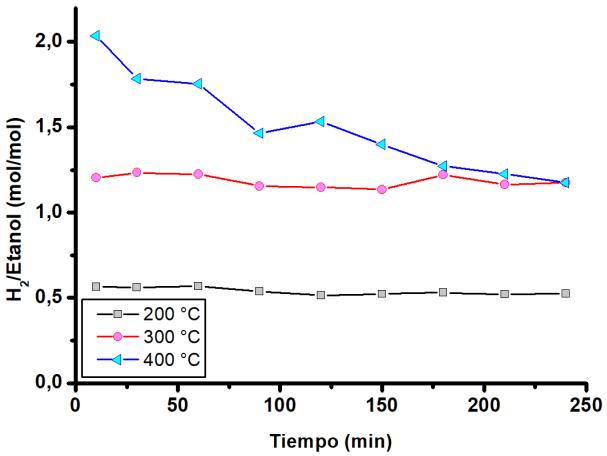


Fig. 1. Relación H_2/Etanol en función de la temperatura de reacción para Cu14Ni1LaSiO

Profundización en NPS: screening mediante nuevas tecnologías de muestras de orina obtenidas en fiesta de música electrónica.

María José Castro Santos[1]; Bruno P. Dos Santos[2]; Letícia Birk[2]; Patrícia de S. Schwarz[2]; Sarah Eller[2]; Tiago Franco de Oliveira[2]; Eleuterio F. Umpiérrez[1]; Lucía Dellepiane[1].

[1]*Unidad de Medio Ambiente, Drogas y Doping, Instituto Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, UDELAR, Montevideo, Uruguay*

[2] *Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre, Porto Alegre, Brasil*

mcastro@fq.edu.uy

En el marco del proyecto de cooperación con la Junta Nacional de Drogas de Uruguay – Facultad de Química, Udelar, y en continuidad con el programa de monitoreo de drogas, la Unidad de Medio Ambiente, Drogas y Dopaje (UMADD) del Instituto Polo Tecnológico de Pando, en 2019, llevó a cabo la tercera edición del estudio “Screening de nuevas sustancias psicoactivas, THC y cocaína en muestras de orina obtenidas en una fiesta de música electrónica en el área metropolitana”. El objetivo fue ampliar y mejorar la información, utilizando nuevas tecnologías, sobre la circulación en el territorio uruguayo de Nuevas Sustancias Psicoactivas y otras drogas de abuso que se consumen en estos eventos, así como comenzar una cooperación activa con colegas de la región. Se analizaron 28 muestras mediante tres técnicas de extracción, en diferentes condiciones fisicoquímicas que permitieron la extracción de drogas de diversa naturaleza, considerando sustancias neutras, básicas, ácidas y aquellas excretadas como metabolitos y/o conjugados. Cada una de las extracciones fue analizada mediante LC-MS/MS (LC8045, Shimadzu) y LC-HRMS (microOTOF-QIII, Bruker). Como resultados destacados del screening, se detectaron MDMA, MDA, MDEA, cocaína y ketamina en el 100 % de las muestras. Además, fue posible identificar la presencia de Dipentilona, Metilona, Eutilona, Pentilona y Pentedrona. Este estudio permitió comparar los resultados obtenidos mediante GC/MS con aquellos de LC/MS/MS y LC-HRMS. Si bien existe un alto porcentaje de coincidencias entre ellos, fue posible identificar nuevas sustancias que posteriormente dieron lugar a intoxicaciones en Uruguay. Asimismo, se observó que el MDMA y las catinonas sintéticas están altamente relacionadas con casos de intoxicación en este tipo de eventos en Brasil. También se pudo evaluar la presencia de Eutilona, una droga en ascenso en Brasil durante el año 2019, según datos de incautaciones. Esta información es de suma relevancia para la salud pública tanto en Brasil como en Uruguay, ya que se trata de sustancias que no siempre son incautadas y son causa de intoxicaciones.

Es necesario expresar mi agradecimiento a la Universidade Federal de Ciências da Saúde de Porto Alegre, Departamento de Ciências Farmacêuticas, y a la Facultad de Química de la Universidad de la República del Uruguay, que hicieron posible la realización de esta investigación a través del programa de intercambio docente (720).

Caracterización de Terpenos en Extractos de Cannabis sativa L. de la Variedad Fem Tonic Mediante Cromatografía de Gases Acoplado a Espectrometría de Masas (GC-MS)

Jhonatan Cardozo; Josefina Rodríguez; Victoria Panzl; Bruno Silva; Anabela Estévez

Laboratorio 6, Departamento de Paysandú, ITR SurOeste Ex-Paylana, Universidad Tecnológica, Paysandú, Uruguay

jhonatan.cardozo@estudiantes.utec.edu.uy; josefina.rodriguez@estudiantes.utec.edu.uy

En los últimos años la planta de cannabis ha emergido como una industria global de importancia tanto económica como medicinal. Sin embargo, a pesar de ello, las investigaciones relacionadas a ella enfrentan desafíos debido a sus restricciones legales. Dentro de la variedad de compuestos de interés, los terpenos son compuestos orgánicos responsables del aroma y sabor característicos de muchas plantas, así como de su función de defensa contra insectos y patógenos incluyendo al cannabis. Cada planta de cannabis contiene una combinación única de terpenos que le confiere un aroma característico. Esta combinación de diversos terpenos en proporciones específicas es lo que se conoce como perfil terpénico. A nivel normativo, se encuentra liberado para su uso, desde el punto de vista medicinal, aunque en el mundo su legislación es confusa, ya que dependerá de cada país en cuestión, por esta razón se indagó profundamente en el marco regulatorio vigente internacional, regional y nacional. En la presente investigación se llevó a cabo la identificación y análisis del perfil químico característico de los terpenos en un extracto de *Cannabis sativa* L. Para ello, se utilizó cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS), con el propósito de determinar y establecer un perfil terpénico representativo de la variedad estudiada. Complementariamente, se desarrolló un protocolo de ensayo con el objetivo de estandarizar el servicio de caracterización de terpenos en materiales vegetales.

Referencias

AOAC Guidelines for Single Laboratory Validation of Chemical Methods for Dietary Supplements and Botanicals (AOAC, 2002)

Milay, L., Berman, P., Shapira, A., Guberman, O. y Meiri, D. (2020). Metabolic profiling of Cannabis secondary metabolites for evaluation of optimal postharvest storage conditions. Frontiers in Plant Science, 11. doi:10.3389/fpls.2020.583605

Sommano, S. R., Chittasupho C., Ruksiriwanich W. & Jantrawut P. (2020). The Cannabis Terpenes. Molecules. DOI: 10.3390/molecules25245792

Incorporación de Matrina y Oximatrina a un método multirresiduo

Guzman Porley[1]; Paco Pérez Alvarez[1]; Facundo Ibañez[3]; Valentina Mujica[3]; Verónica Cesio[1]; Horacio Heinzen[1]

[1]*Farmacognosia, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay;*

[2]*Departamento de Química del Litoral, Centro Universitario Regional (CENUR) Litoral Norte, Universidad de la República, Paysandú, Uruguay;*

[3]*Instituto Nacional de Investigación Agropecuaria, Las Brujas, Uruguay.*

gporley8@gmail.com

La metodología analítica estuvo enfocada al análisis multirresiduo de matrina, oximatrina, clorantraniliprole, spinosad A y D, tebuconazol y spirotetramat, junto con sus metabolitos spirotetramat-mono y spirotetramat-enol. Este es un enfoque novedoso, ya que la oximatrina se analiza comúnmente mediante métodos monorresiduos. Dada las estructuras de la matrina y oximatrina, consideramos la protonación del alcaloide por lo que el pH y las interacciones fueron claves en el desarrollo de la metodología, al igual que la solubilidad en agua de la oximatrina, que dificulta su extracción conjunta.

Se testeó el método QuPPE desarrollado para oximatrina y su adecuación al análisis multirresiduo. Para la extracción con metanol en medio ácido fórmico, sin y con agregado de ACN, la recuperación de matrina y oximatrina fue de 180%, mientras que el resto de los compuestos presentaron recuperaciones muy bajas, por lo que fue descartado.

Para el desarrollo del método se partió del protocolo AOAC 2007.01 tradicional sin ninguna variación, obteniendo resultados muy buenos para todos los analitos a excepción de matrina y oximatrina. Estos dos últimos mostraron porcentajes de recuperación <30%. La sustitución de PSA para evitar pérdidas de oximatrina y dar interacciones iónicas, y el empleo de RPC18 en la etapa de *clean up,* arrojaron igualmente niveles de recuperaciones muy bajos. El uso de acetato de amonio como buffer tampoco fue exitoso.

Se estudió la influencia del pH en la extracción de estos compuestos, ya que los demás mostraron buenas recuperaciones en todos los ensayos. Para esto, se emplea el QuEChERS original y se ajustó el pH entre 7,90-8,00 en la solución de extracción. Se ajustó el pH con solución de NaOH 10% hasta obtener el volumen utilizado para el ajuste de 250 uL. Este volumen se adicionó a la solución de extracción y no se realizó *clean up* con PSA, para la etapa de *clean up* solamente se utilizó $MgSO_4$. Se comparó la eficiencia de la extracción a temperatura ambiente y con nitrógeno líquido, obteniéndose mejores resultados con este último. Los resultados mejoraron ya que la matrina se recuperaba en valores cercanos al 100%, y la oximatrina había llegado a valores cercanos al 65%. Finalmente, con el fin de mejorar aún más esta recuperación, se realizó una prueba adicional, agregando al método AOAC modificado con el agregado de NaOH 10% y sin PSA, 1 g de Acido ascórbico sobre la muestra como antioxidante e inhibir enzimas que degradan los compuestos. No se obtuvieron buenos resultados ya que obtuvieron recuperaciones de 30-40%.

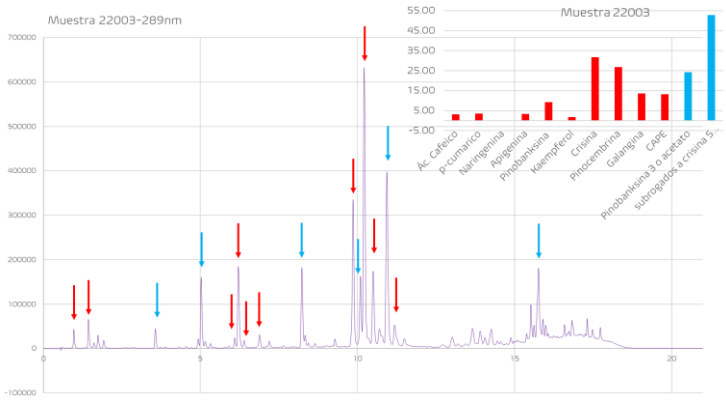
Determinación de compuestos bioactivos en propóleos del Uruguay mediante cromatografía de ultra-alta performance

David Menchaca[1]; Alejandra Rodríguez-Haralambides[1]

[1]*Laboratorio de Química Bioanalítica, Instituto Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, Universidad de la República, Pando, Uruguay*

dmenchaca@fq.edu.uy

El propóleos es un producto apícola complejo elaborado por Apis mellifera a partir de exudados vegetales disponibles en su entorno. Se le atribuyen múltiples actividades biológicas, entre las que destaca su marcada capacidad antioxidante. En propóleos de regiones templadas, los principales compuestos bioactivos pertenecen al grupo de los polifenoles, especialmente los flavonoides. Este estudio tuvo como objetivo desarrollar, optimizar y validar un método cromatográfico basado en UHPLC con detección por arreglo de fotodiodos (PDA) para la determinación de polifenoles en muestras de propóleos crudo y productos comerciales. Los analitos seleccionados incluyeron pinocembrina, crisina, ácido p-cumárico, kaempferol, pinobanksina, ácido cafeico y su éster de fenetilo (CAPE). Para ampliar el alcance del análisis, se incorporó una estrategia semicuantitativa mediante el uso de estándares subrogados. Se empleó una columna cromatográfica de alta eficiencia, operada bajo condiciones optimizadas de flujo, temperatura y gradiente, lo que favorece una excelente resolución de los analitos presentes en estas matrices complejas. Además, el método desarrollado permite reducir significativamente el tiempo de análisis y minimizar el uso de solventes, en línea con los principios de la química verde. Entre 2022 y 2025 se realizaron campañas de muestreo en apiarios distribuidos en ocho regiones ecológicas del país. Los resultados obtenidos revelan una marcada estabilidad en los perfiles químicos dentro de un mismo apiario a lo largo del tiempo, aunque con variaciones interanuales en el rendimiento total de flavonoides. Asimismo, se observan diferencias composicionales entre regiones, lo que evidencia la existencia de perfiles químicos distintivos a nivel territorial. Esta combinación de estabilidad intrarregional y variabilidad geográfica constituye un factor clave para la valorización del propóleos uruguayo, con vistas a identificar regiones con alto potencial productivo para extractos enriquecidos en compuestos bioactivos.



Síntesis y caracterización de compuestos de coordinación de Ga(III) con antiinflamatorios no esteroideos con actividad citotóxica.

Matías Rosas; Victoria Collazo; Carlos Y. Fernández; Gianella Facchin

Área Química Inorgánica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

mrosas@docente.ceibal.edu.uy

El Ga(III) es uno de los iones metálicos más usado y para el cual se han reportado resultados prometedores en el desarrollo de nuevos metalofármacos con actividad anticancerígena. La coordinación de Ga con ligandos orgánicos es una estrategia prometedora para el desarrollo de nuevos agentes con mayor biodisponibilidad y mejor penetración en la membrana celular, en relación con las sales simples [1]. En este contexto, nuestro grupo de investigación ha trabajado en el diseño de complejos de Ga(III) que incorporan la 1,10-fenantrolina (phen) y sus derivados, con el objetivo de potenciar la actividad citotóxica tanto del metal como de los ligandos. En este trabajo se han desarrollado compuestos homolépticos y heterolépticos con los ligandos ácidos flufenámico y mefenámico, fármacos antiinflamatorios no esteroideos, aprobados para su uso en humanos. El uso de este tipo de compuestos como ligandos para metalofármacos ha crecido en los últimos años debido a que se ha reportado que al unirse al metal la actividad farmacológica del ligando se ha visto mejorada [2,3]. Se obtuvieron nuevos complejos homolépticos con fórmulas [Ga(flufenamato)$_3$] (**C1**) y [Ga(mefenamato)$_3$] (**C2**) y dos complejos heterolépticos con fórmula [Ga(flufenamato)$_2$(phen)](PF$_6$)$_2$ (**C3**) y [Ga(mefenamato)$_2$(phen)](PF$_6$)$_2$ (**C4**). La caracterización estructural se realizó mediante espectroscopía de IR y de ^{1}H-RMN y análisis elemental. La evaluación de la actividad citotóxica en células MCF-7, (adenocarcinoma de mama), mostró que los compuestos homolépticos presentan una actividad superior (IC_{50} = 2,35 µM para C1 y 0,83 µM para C2), a la del cisplatino (IC_{50} = 8,91 µM), utilizado como fármaco de referencia.

Referencias:

[1] P. Collery, B. Keppler, C. Madoulet, B. Desoize, Gallium in cancer treatment, Crit. Rev. Oncol. Hematol. 42 (2002) 283–296. https://doi.org/10.1016/S1040-8428(01)00225-6.
[2] L.-G. Liu, Y.-M. Sun, Z.-Y. Liu, Y.-H. Liao, L. Zeng, Y. Ye, H.-Y. Liu, Halogenated Gallium Corroles:DNA Interaction and Photodynamic Antitumor Activity, Inorg. Chem. 60 (2021) 2234–2245. https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c03016.
[3] M.R. Kaluderović, S. Gómez-Ruiz, B. Gallego, E. Hey-Hawkins, R. Paschke, G.N. Kaluderović, Anticancer activity of dinuclear gallium(III) carboxylate complexes, Eur. J. Med. Chem. 45 (2010) 519–525. https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2009.10.038.

Síntesis de nuevos complejos heterolépticos de Cu(II) con 5-amino-fenantrolina y fendiona como potenciales agentes citotóxicos

Lirka Brooks Iribar[1,2]; Carlos Y. Fernández[1]; Gianella Facchin[1]

[1]*Área Química Inorgánica, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[2]*Programa de Posgrados de la Facultad de Química, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

lbrooks@fq.edu.uy

Los compuestos de coordinación presentan aplicaciones clínicas como fármacos en quimioterapia, contribuyendo al tratamiento del cáncer. [1] La Química Inorgánica Medicinal ofrece la posibilidad de desarrollar nuevos metalofármacos antitumorales que incluyan diversos metales, entre ellos el cobre. Existen numerosos antecedentes de complejos de Cu(II) con potente actividad citotóxica, e incluso antitumoral, incluyendo uno que se encuentra en etapas iniciales de estudios clínicos. El grupo de investigación en que se enmarca este trabajo estudia complejos de Cu(II) con diiminas, que han demostrado una fuerte actividad citotóxica y antitumoral [2], enfocándose actualmente en mejorar su selectividad hacia células tumorales.

En este estudio se describe la síntesis y caracterización de nuevos complejos utilizando las diiminas 5-amino-fenantrolina y fendiona, seleccionadas por antecedentes que sugieren una posible mejora en la selectividad respecto a complejos desarrollados previamente. Se prepararon complejos de tipo [Cu(diimina)(dipéptido)], (siendo los dipéptidos: Ala-Gly, Ala-Phe y Gly-Val) los cuales fueron caracterizados en estado sólido mediante espectroscopía de infrarrojo y análisis de elementos livianos, confirmando su composición. En solución, se identificó la especie mayoritaria presente mediante espectroscopía UV-Vis, encontrando la coordinación típica de estos complejos, evaluándose también su estabilidad y lipofilia (mediante el método de reparto entre agua y n-octanol). Finalmente, se realizaron estudios preliminares de citotoxicidad en cultivos celulares de cáncer de mama humano MCF7, que mostraron una elevada actividad citotóxica.

Referencias:

[1] Aguilar-Jiménez, Z., *et al.*, Inorganics, **11,** 394 (2023).

[2] Alvarez, N., *et al.*, J. Biol. Inorg. Chem., **27**, 431 (2022).

Preparación de nuevos compuestos de coordinación de Ru(II) como potenciales fármacos contra enfermedades neurodegenerativas

Brian Cruz; Agustina Taño; Feriannys Rivas; Lucía Otero

Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay

brian.cruz@fing.edu.uy

La enfermedad de Alzheimer (EA) es una enfermedad neurodegenerativa que afecta a adultos mayores, caracterizada por deterioros cognitivos, desequilibrio de la memoria y anomalías del comportamiento. Entre los mecanismos implicados en su patogénesis se encuentran la acumulación del péptido amiloide-β (Aβ), disminución de los niveles sinápticos del neurotransmisor acetilcolina (ACh), estrés oxidativo, etc. Actualmente, no existe ningún agente terapéutico disponible para la cura y el tratamiento completo de la EA, por lo que resulta indispensable desarrollar nuevos potenciales fármacos para el tratamiento de esta enfermedad.

En los últimos años, diversos complejos metálicos, incluidos los de rutenio (Ru), han mostrado potencial para modular la agregación de Aβ y tratar aspectos de la enfermedad. Estos complejos destacan por su baja toxicidad y buena biodisponibilidad.

Este trabajo se enfoca en el desarrollo de nuevos compuestos de coordinación de Ru(II), utilizando ligandos polipiridínicos (NN = phen, bipy, tmp) y tiosemicarbazonas (R-tio), que son ligandos con reconocidas propiedades bioactivas. La síntesis se inicia con la obtención de un precursor común (PRE1), de fórmula *cis,fac*-[$RuCl_2(DMSO)_4$], que se hace reaccionar con distintos ligandos para formar precursores tipo *cis,cis*-[$RuCl_2(NN)(DMSO)_2$] (PRE2). Luego, estos precursores se combinan con diferentes tiosemicarbazonas para formar compuestos [RuCl(NN)(R-tio)] con variaciones en el sustituyente R. Los compuestos obtenidos fueron caracterizados por análisis de elementos livianos y espectroscopías de FTIR y de ^{1}H-RMN.

Los resultados obtenidos sientan las bases para continuar el desarrollo de esta familia de nuevos compuestos como potenciales candidatos terapéuticos contra el Alzheimer, combinando química de coordinación con objetivos biomédicos concretos.

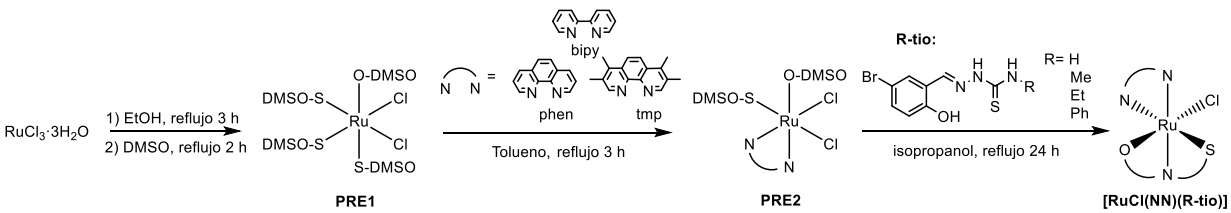


Figura 1: Esquema general de síntesis de los compuestos de [RuCl(NN)(R-tio)]

Determinación de arsénico en agua potable mediante HG-AFS: desarrollo de una metodología alineada con la Química Verde

Rodrigo Mateo[1]; Alexandra SIxto[1,2]; Alicia Mollo[1,2], Lucía Falchi[1,2]

1 Unidad de Análisis de Agua. Facultad de Química. UdelaR. Montevideo, Uruguay
2 Área Química Analítica. DEC. Facultad de Química. UdelaR. Montevideo, Uruguay
rmateo@fq.edu.uy

El acceso al agua potable segura es un derecho humano fundamental. Entre los contaminantes inorgánicos más relevantes se encuentra el arsénico (As), cuyo valor máximo permitido objetivo es de 10 μgL^{-1}.[1] Resulta entonces necesario implementar metodologías analíticas sensibles y confiables con límites de cuantificación adecuados.
El trabajo presenta el desarrollo de una metodología de espectrometría de fluorescencia atómica acoplada a la generación de hidruros (HG-AFS).
Se utilizó un espectrómetro PERSEE Analytics PF7. La pre-reducción se realiza con KI 1% y ácido ascórbico 0,2% en medio ácido. La generación del hidruro se efectúa luego de 2 h con $NaBH_4$ 1% en NaOH 0,5%. Se evaluó la robustez del método mediante un diseño factorial fraccionado 2^{7-4}, analizado con el software JMP. Ninguno de los seis factores estudiados presentó efecto significativo ($p > 0,05$).

	[HCl] (%m/m)	Tiempo pre-reducción (min)	Flujo argón (mL/min)	Vol. de muestra (mL)	[KI] (%m/m)	[Ác. Asc] (%m/m)	[NaOH] (%m/m)	[$NaBH_4$] (%m/m)
Optimización (óptimo)	3-(6)-30	30-60-(120)	-	0,5-(1,0)-1,5	-	-	-	-
Intervalo de robustez	-	105-135	380-420	-	0,75-1,25	0,15-0,25	0,375-0,625	0,75-1,25

Se evaluó la veracidad analizando 11 muestras previamente cuantificadas mediante un método de referencia (ETAAS). Las recuperaciones obtenidas fueron entre 80 y 120%. La comparación mediante prueba t-pareada no mostró diferencias significativas entre ambos métodos ($p = 0,98$; $texp_{(0.05,10)}=0,03$, $tcrit_{(0.05,10)}=2,23$). Estas fueron también analizadas bajo las condiciones de la norma ISO 17378-1:2014 que emplea un 30% de HCl y tampoco se encontraron diferencias significativas entre los resultados de ambos métodos ($p=0,15$, $texp_{(0.05,10)}=1,57$, $tcrit_{(0.05,10)}=2,23$). Una de las principales fortalezas del método radica en la reducción drástica del empleo de ácido clorhídrico, desde 30% a 6%. Esta modificación se alinea con los principios de la Química Verde, al disminuir el uso de reactivos peligrosos, mejorar las condiciones de seguridad del laboratorio y reducir el impacto ambiental del método, sin comprometer su desempeño analítico.

[1] IMPO. (2011). Decreto Nº 375/011: Reglamentación del artículo 6° de la Ley N° 18.610. Diario Oficial. https://www.impo.com.uy/bases/decretos-reglamento/375-2011/1

Arsénico en aguas subterráneas: estudio desde la especiación química

Mariana Barcia[1]; Alexandra Sixto[1, 2]; Alicia Mollo[1, 2]; Julia Torres[3]

[1]Unidad de Análisis de Agua, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo Uruguay
[2]Área Química Analítica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo Uruguay
[3]Área Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo Uruguay
marianabarcia@fq.edu.uy

El arsénico es un elemento ampliamente distribuido en la corteza terrestre que constituye una preocupación sanitaria a nivel internacional y también en Uruguay (P. Collazo et al., 2020). Las especies en las que el elemento se encuentra influyen directamente en su movilidad y biodisponibilidad y en particular la adsorción superficial en óxidos de hierro constituye en medios naturales uno de los mecanismos principales que definen su comportamiento. En este trabajo se realizó el modelado químico de aguas subterráneas destinadas al consumo humano, empleando las herramientas Visual MINTEQ (2024) y HySS (2009), en conjunto con datos termodinámicos y analíticos. En primer lugar, los resultados sugieren que en estas muestras las asociaciones de aniones de As y cationes de Fe en solución acuosa no son relevantes. Por otra parte, el modelo de adsorción sobre ferrihidrita, complementado con la posible interacción con otros iones mayoritarios presentes (Gustafsson & Antelo 2022) resultó el más adecuado. Los resultados del modelado muestran que para bajos niveles de hierro total (<0.017 mg L^{-1}) y en presencia de fosfato (0,00269 mg L^{-1} P), el elemento se encuentra mayormente disuelto como aniones de As(V) (Figura 1a). A concentraciones mayores de hierro total, surge una interacción más compleja entre ambos aniones y la superficie adsorbente (Figura 1b).

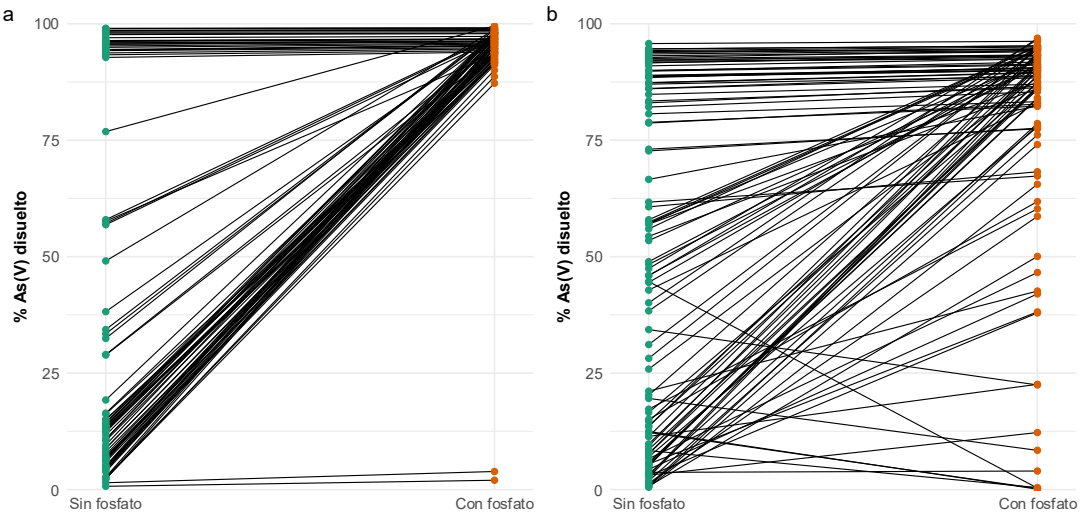


Figura 1-Modelado de As: cada línea conecta una muestra con (naranja) y sin (verde) agregado de P 0,00269 mg L^{-1} a) Fe total menor <0.017 mg L^{-1}. b) Fe total > 0.017 mg L^{-1}.

[1] Collazo, P., Pamoukaghlián, K., Bühl, V., Pizzorno, P., & Mañay, N. (2020). *Revista Latino-Americana de Hidrogeología*, *11*(3), 44–55.

Agradecimientos: PEDECIBA – Química

Miniaturización de una metodología analítica para el análisis de pesticidas en suelo

Katherine Alexandrino[1], Inés Telles[2], Lucía Pareja[2]

[1] *UTEC Tecnólogo Químico, Polo tecnológico, Paysandú, Uruguay.*

[2] *Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte. Universidad de la República. Ruta 3 km 363, Paysandú, Uruguay.*

katherine.alexandrin@estudiantes.utec.edu.uy

Uruguay cuenta con 16.4 millones de hectáreas destinadas al uso agropecuario, lo que representa más del 90 % de su superficie total. Esta abundancia de recursos naturales y factores productivos le otorga al país ventajas comparativas en la producción de alimentos, posicionándolo como un proveedor global en este ámbito[1]. En las últimas décadas se ha observado un cambio significativo en la distribución relativa de la tierra entre las principales actividades productivas. Entre el 2000 y el 2011, las áreas destinadas a la agricultura se duplicaron, mientras que las dedicadas a la ganadería se redujeron en un 20 %, sin que ello implicara una merma en los niveles de producción[1]. El incremento en la intensidad de la producción agrícola trajo aparejado un mayor uso de pesticidas para el control de plagas. La acumulación de estos compuestos en los ecosistemas puede alterar profundamente su equilibrio, afectando tanto la biodiversidad como la calidad de los recursos naturales. No obstante, la escasez de estudios específicos y datos confiables sobre su presencia y comportamiento en Uruguay dificulta la evaluación integral del impacto ambiental que estos productos generan. En este trabajo se realizó la miniaturización de un método QuEChERS modificado, desarrollado por nuestro grupo para suelos, en consonancia con la química verde, dado que disminuye la cantidad de muestra, disolventes y sales a utilizar. El análisis se realizó mediante espectrometría líquida acoplada a espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS) con el algoritmo Scheduled MRM™. La metodología cumplió con los criterios del Documento No. SANTE/11312/2021v2 para la mayoría de los compuestos, resultando en porcentajes de recuperación entre 79 y 109 % para los niveles 10, 25 y 100 µg/kg. La desviación estándar relativa (RSD) fue entre 1,0 y 13 % y se cumplieron los criterios de linealidad con concentraciones retro calculadas (BCC) menores al 20 %. El efecto matriz (EM) se encontró por debajo del 20 %. Para confirmar la aplicabilidad del método se evaluaron muestras de suelo de predios agrícolas-ganaderos del departamento de Paysandú. El método logró detectar con éxito la presencia de insecticidas/acaricidas como cumafós, clorprifós, etión, fluazurón y lufenurón en concentraciones que oscilaron entre 10 y 1200 µg/kg.

1- Ministerio de Ganadería, Agricultura y Pesca [MGAP], 2011 https://www.uruguayxxi.gub.uy/uploads/informacion/3c65f7d9c47fd2235bbc5752bd3ad5c2f005ec88.pdf

Caracterización de macro y micronutrientes en compost

Agustina Valentín [1]; Javier Silva [1]; Jessica Báez [2]; Florencia Tissot [1]; Fiorella Iaquinta [1]

[1] *Química Analítica, DEC, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[2] *Laboratorio de bioactividad y nanotecnología de alimentos, CYTAL, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

agustinavalentinp@gmail.com

Tanto la intensificación de la producción agroindustrial como el incremento del consumo de alimentos han generado un aumento en la generación de residuos orgánicos, impulsando el compostaje como una solución sostenible para su gestión. Este es un proceso biológico de descomposición que convierte los residuos orgánicos en compost, un material estable y libre de patógenos, útil como mejorador de suelos y fertilizante. Es importante evaluar el contenido de macro y micronutrientes de forma de conocer las características del producto final. En el caso particular de los micronutrientes, si bien son esenciales en pequeñas cantidades para el desarrollo de las plantas, su presencia en exceso puede ser perjudicial. El Cr(III) es considerado un nutriente esencial, aunque altos niveles de exposición pueden causar efectos adversos. El Cu es requerido por las plantas en pequeñas cantidades para la síntesis de clorofila. El Mn es esencial para el funcionamiento de diversas enzimas y juega un rol esencial en el metabolismo del N. El K es necesario para el crecimiento de las plantas. El C es una fuente de energía para los microorganismos y el N es necesario para la síntesis proteica. Este puede estar presente en el compost de forma insoluble, formando parte de proteínas y compuestos orgánicos, o soluble, como NO_3^- o NH_4^+. Este trabajo propone el desarrollo de metodologías de análisis de macro y micronutrientes como C total, N total y soluble, K, Cu, Cr y Mn. Se analizaron 10 muestras de compost. Para la determinación del C total se utilizó un analizador de carbono con módulo de análisis de sólidos. La determinación de N soluble se realizó mediante la unidad analizadora de nitrógeno del mismo equipo, para lo cual el tratamiento de la muestra consistió en una extracción en medio básico suave (KCl, 2 mol L^{-1}) y se analizó el sobrenadante, y la determinación de N total se realizó mediante el método Kjeldahl. Los metales fueron analizados por espectroscopía de fluorescencia de rayos X por energía dispersiva (EDXRF). Se utilizó una fuente de rayos X de rodio en atmósfera de aire, diámetro del colimador 5 mm y con un tiempo de medida de 100 s. Los resultados obtenidos fueron entre 192,8 - 983,7 g kg^{-1} para el C; 0,88 - 3,49 % para N total; 0,03 - 0,16 % para N soluble; 12,87 - 54,38 mg kg^{-1} para Cu; 74,92 - 7143,65 mg kg^{-1} para Mn, 1,29 - 13,74 mg kg^{-1} para Cr y 2,34 - 8,63 g kg^{-1} para K. Las metodologías desarrolladas resultaron adecuadas para la determinación de macro y micronutrientes en muestras de compost. Los resultados obtenidos en las muestras de compost cumplen con las normativas nacionales.

Agradecimientos

Los autores agradecen a PEDECIBA – Química, ANII y CSIC

Radiosensibilización con Nanopartículas de Sulfuro de Bismuto: Impacto en la Respuesta Celular y la Reducción de la Proliferación Tumoral

Isabel Galain[1,2]; Camila Pérez[1]; Wilner Martínez-López[3]; Valtencir Zucolotto[2]; María Pérez-Barthaburu[4]; Ivana Aguiar[1]

[1]Área Radioquímica, DEC, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.

[2]Grupo de Nanomedicina e Nanotoxicologia, IFSC, Universidade de São Paulo, São Carlos, Brasil.

[3]Laboratorio de Epigenética e Inestabilidad Genómica, IIBCE, MEC, Montevideo, Uruguay.

[4]Departamento de Desarrollo Tecnológico, CURE, Universidad de la República, Rocha, Uruguay.

igalain@fq.edu.uy

El cáncer sigue siendo una de las principales amenazas para la salud humana. Aunque la radioterapia es un tratamiento clave, su falta de especificidad para las células tumorales, dañifica también células sanas. Los radiosensibilizadores ofrecen una solución nueva y simple para mejorar la eficiencia del tratamiento, ya que aumentan la cantidad de radiación absorbida por las células tumorales. En este trabajo se estudiaron nanopartículas de sulfuro de bismuto (Bi_2S_3) como radiosensibilizadores. Su síntesis se realizó mediante el método "hot injection", seguido de un proceso de intercambio de ligandos, para mejorar su biocompatibilidad. Se obtuvieron nanorod de Bi_2S_3 recubiertas con polivinilpirrolidona (PVP), con un tamaño promedio de 4,1nm de ancho y 20,4nm de largo. La evaluación de su citotoxicidad se realizó a través de ensayo colorimétrico en células normales de riñón (BHK-570), hígado (HepaRG) y pulmón (MRC5), y en células de cáncer de mama (MCF7) y de pulmón (A549), mostrando baja toxicidad hasta 100 µg/ml, lo que sugiere una buena biocompatibilidad. Para la determinación de la eficacia de las nanopartículas como radiosensibilizadores, se realizaron en células MCF7 y A549, utilizando dosis de 2, 4 o 8 Gy de una fuente de radiación ionizante. Se evaluó la viabilidad celular después de 48 y 72 horas de la irradiación, observándose una reducción de hasta un 40% adicional en la viabilidad celular en comparación con las células únicamente irradiadas. Se investigó el mecanismo de muerte celular realizando el ensayo de triple marcación, evidenciando que la combinación de nanopartículas y radiación aumenta significativamente la muerte celular por necrosis, sugiriendo un efecto sinérgico. Además, se evaluó el daño sufrido por el ADN mediante el ensayo de micronúcleos, revelando que la irradiación en presencia de las nanopartículas provoca hasta el doble de daño irreparable en el ADN, en comparación con la radiación sola. Finalmente, la capacidad de las nanopartículas de Bi_2S_3 para afectar la proliferación celular postirradiación se evaluó mediante un ensayo clonogénico. Se observó una disminución significativa en la formación de colonias cuando las células fueron irradiadas en presencia de las nanopartículas, confirmando su papel como radiosensibilizadores al reducir la capacidad de las células tumorales para regenerarse tras la radioterapia. Este efecto fue mayor en las células A549 que en las células MCF7. Los hallazgos de este trabajo subrayan el potencial de las nanopartículas de Bi_2S_3 en aplicaciones biomédicas, representando una estrategia innovadora para mejorar los resultados clínicos en pacientes oncológicos.

Estudio de niveles de metales en el suelo del Ecoparque Idea Vilariño

Daihanna Rusca; Micaela Bellerati; Brian Cruz; Jessica Santander; Lucía Falchi; Florencia Tissot; Fiorella Iaquinta.

Grupo Química Analítica Ambiental, DEC, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

daihannabode6@gmail.com

El análisis de metales en suelos es crucial, debido a su impacto en la salud humana. El Ecoparque Idea Vilariño en Montevideo es un área de uso comunitario. Pero presenta antecedentes de actividades antropogénicas contaminantes, como la quema de residuos (en el asentamiento que se encontraba en el predio), disposición de residuos domésticos e industriales (por su uso como vertedero), y explotación minera con uso de explosivos [1]. Basados en el contexto barrial y en el marco de un trabajo de extensión de Facultad de Química, se planteó con la comunidad zonal, el estudio de metales (Pb, Cr, Cu y Mn) en el suelo del Ecoparque.

Se realizó el muestreo, de manera aleatoria y deliberada, considerando el aporte de vecinos que identificaron zonas de interés. Se tomaron 20 muestras, provenientes de siete sectores del parque. Para el tratamiento de muestra, se secaron a 105 °C hasta masa constante en estufa. Se molieron y tamizaron. Se realizó una extracción ácida con HNO_3 (12 mol L^{-1}) asistida con microondas. La determinación de Cr y Mn se realizó mediante MP-AES y la de Pb y Cu por FAAS. Los resultados se presentan en la tabla (valores máximos recomendados por guía canadiense para suelos residenciales/parques [2]).

	Cromo	Plomo	Cobre	Manganeso
Rango de concentración (mg kg-1)	781 - 9	740 - 22	1001 - 21	5138- 155
Valor máximo recomendado (mg kg-1)	64	140	63	4000

En la mayoría de las zonas los resultados obtenidos superan lo recomendado, lo que confirma una contaminación posiblemente asociada a los antecedentes del sitio. Estos evidencian la necesidad de trabajo comunitario para concientizar y mitigar los posibles efectos adversos a la salud.

Referencias:

[1] Colectivo de Vecinas y Vecinos del EcoParque Idea Vilariño. (2022). *Memoria barrial: EcoParque Idea Vilariño y su entorno*. Intendencia de Montevideo.

[2] Canadian Soil Quality Guidelines for the Protection of Environmental and Human Health. Update 7.0. Canadian Council of Ministers of the Environment, 2007.

Agradecimientos: Los autores agradecen a PEDECIBA-Química, ANII y CSIC.

Evaluación del uso de nanopartículas de sulfuro de bismuto como radiosensibilizadores: impacto genotóxico en líneas celulares cancerígenas

Camila Pérez[1]; Isabel Galain[1]; Wilner Martínez[3]; María Pérez Barthaburu[2]; Ivana Aguiar[1]

[1]*Área Radioquímica, DEC, Facultad de Química, UDELAR, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Departamento de Desarrollo Tecnológico, CURE, UDELAR, Rocha, Uruguay.*

[3]*Laboratorio de epigenética e Inestabilidad genómica, IIBCE, Montevideo, Uruguay.*

camila241099@icloud.com

La radioterapia es una herramienta fundamental en el tratamiento de más del 50% de los pacientes con cáncer. No obstante, su efecto no se limita a las células tumorales, sino que también puede dañar células sanas y generar efectos adversos en los pacientes [1]. Una estrategia para mitigar este problema es el uso de radiosensibilizadores, que potencian el efecto de la radiación en células tumorales y permiten reducir la dosis necesaria.

En este trabajo, exploramos el uso de nanopartículas de sulfuro de bismuto (Bi_2S_3) como potenciales radiosensibilizadores. Estas nanopartículas fueron sintetizadas mediante la técnica de hot injection, seguida de un cambio de ligando con polivinilpirrolidona (PVP) para mejorar su dispersión en medios biológicos y su biocompatibilidad [2].

Para evaluar los efectos genotóxicos de nuestras nanopartículas en células cancerosas bajo radiación y cuantificar el daño al ADN y las aberraciones cromosómicas, utilizamos el ensayo de micronúcleos en líneas celulares MCF7 (cáncer de mama) y A549 (cáncer de pulmón), empleando distintas combinaciones de dosis de radiación y concentraciones de nanopartículas.

Los resultados mostraron un aumento significativo del daño genotóxico, con hasta el doble de formación de micronúcleos en las dosis más altas de nanopartículas y radiación en comparación con la radiación sola.

Estos hallazgos destacan el potencial de las nanopartículas de Bi_2S_3 como radiosensibilizadores efectivos, contribuyendo al desarrollo de terapias contra el cáncer más seguras y eficaces basadas en nanotecnología.

Agradecimientos:
Comisión Sectorial de Investigación Científica (CSIC) de la Udelar, Gustavo Paollini del Centro Hospitalario Pereira Rossell.

Referencias:

1. Rotellar, J. V., López, M. A., Arnalot, P. F., Tarragona, M. D., & Mon, A. B., Medifam 12(2002) 426-35.
2. I. Galain, et al., Journal of Nanoparticles Research 24 (2022), 68.

De la investigación al aula: diseño de una práctica experimental sobre adsorción a partir de una experiencia doctoral

Patrice Portugau[1]; Ana Claudia Pina[1]

[1]*Área Fisicoquímica, Detema, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

acpina@fq.edu.uy

El presente trabajo muestra el proceso de planificación, desarrollo e implementación de una práctica de laboratorio en el curso de Fisicoquímica, diseñada a partir de los estudios realizados durante una tesis doctoral centrada en la remediación ambiental mediante procesos de adsorción [1]. La actividad propuesta se enfoca en el estudio de la cinética de adsorción de Azul de Metileno (AM) en fase líquida, utilizando carbón activado como adsorbente. El objetivo didáctico es introducir al estudiante en los fundamentos de los mecanismos de adsorción, familiarizándolo con los modelos cinéticos de Pseudo Primer Orden (PPO) y Pseudo Segundo Orden (PSO) [2], así como con técnicas de cuantificación de contaminantes por espectrofotometría UV-Vis.

La práctica permite integrar conceptos fundamentales de fisicoquímica, transferencia de masa y equilibrio químico, acercando a los estudiantes a metodologías aplicadas en investigación. Se desarrolla un enfoque por competencias que incluye: comprensión de la interacción adsorbato–adsorbente, análisis de curvas de decaimiento de concentración, ajuste de modelos cinéticos y discusión de parámetros experimentales como pH, fuerza iónica y masa de adsorbente.

Los resultados obtenidos por los estudiantes permiten visualizar tendencias y discutir fenómenos de transporte y afinidad superficial, promoviendo un aprendizaje activo y contextualizado. Esta experiencia constituye un ejemplo concreto de cómo trasladar conocimientos científicos avanzados al ámbito de la enseñanza universitaria, potenciando la formación experimental y el pensamiento crítico en el aula.

1 - Pina, A.C., 2025. “Estudios de adsorción – desorción de fármacos sobre fibras de carbón activado”, Tesis de doctorado, Facultad de Química.

2 - Brandani, Stéfano. 2021. “Kinetics of Liquid Phase Batch Adsorption Experiments. *Adsorption* 27 (3): 353–68. https://doi.org/10.1007/s10450-020-00258-9.

Enseñanza de la química con estrategias innovadoras para la modelización y experimentación: nuevos dispositivos y abordajes para la enseñanza del tema carbohidratos en Educación Media Superior

Andreína Blanco[1]; Fernando Ferrerira[2]; Carolina Fontana[3]; Laura Silva[4]

[1]Programa de Posgrados de la Facultad de Química, Universidad de la República, Uruguay.
[2]Laboratorio de Carbohidratos y Glicoconjugados, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República.
[3]Laboratorio de Espectroscopía y Fisicoquímica Orgánica, Departamento de Química del Litoral, CENUR Litoral Norte (S.R.A. Facultad de Química), Universidad de la República.
[4]Departamento de Química, CeRP del Litoral, Consejo de Formación en Educación.
andreinablanco@fq.edu.uy

Cuando ocurren cambios a nivel de cultura, en los modos y formas de vida de las personas, en el ambiente, etc., la relación entre sistema educativo y sociedad cobra especial importancia, demandando una evolución conjunta para poder cumplir con el desarrollo pleno de cada persona. En el contexto actual, puede afirmarse que esas acciones o funciones de los sistemas educativos se vuelven más complejas. Vinculado a ello, UNESCO (2021), plantea que los sistemas educativos deben preguntarse acerca de qué deberían continuar haciendo, qué deberían dejar de hacer y qué debería reinventarse de forma creativa. Las TICS junto al desarrollo actual de la Inteligencia Artificial Generativa (IAG) han producido un impacto profundo en todos los ámbitos de la sociedad, transformando los escenarios de la enseñanza y de los aprendizajes y provocan un gran desafío tanto para docentes como para alumnos (Marzocchi et al. 2013). En relación con lo antes expuesto, el trabajo realizado se orientó a investigar, en el marco de la enseñanza del tema carbohidratos, las estrategias de enseñanza que los docentes de educación media superior (específicamente educación secundaria) diseñan e implementan y el impacto que en ellas puede producir la incorporación de aportes desde las TICS y un ejemplo de práctica de laboratorio diferente a lo que tradicionalmente se realiza en las clases de educación media. Para ello se realizaron encuestas y entrevistas a diferentes docentes para recabar información sobre la utilización de herramientas de enseñanza. Luego se diseñaron y pusieron a punto las actividades a implementar. Seguidamente se desarrolló un taller con los dos docentes que aceptaron participar, donde se presentó la actividad experimental diseñada, el audiovisual elaborado y las herramientas tecnológicas seleccionadas para que tengan conocimientos de qué es lo que realizarán, cómo y con qué propósito. En la etapa final se realizaron entrevistas a los docentes participantes para indagar sobre su opinión acerca del taller y las herramientas sugeridas para incorporar en sus clases. Luego se desarrolló la observación participante de las intervenciones didácticas de estos, tanto teóricas como prácticas, donde incorporaron a sus estrategias de enseñanza algunos de los recursos tecnológicos presentados en el taller y la técnica cromatográfica diseñada.

Marzocchi, V. A., Vilchez, A. G., Vanzetti, N. A., Beldoménico, H. R., DAmato, M. A., & Marino, L. A. La importancia de las TICS de visualización y modelado molecular en la enseñanza de la ingeniería química. CAIQ 2013 – VII Congreso Argentino de Ingenierìa Química. 20-23 Octubre 2013, Argentina.

Arévalo, E. Reimaginar Juntos Nuestros Futuros: Un Nuevo Contrato Social Para La Educación. (2021). Informe de La Comisión Internacional Sobre Los Futuros de La Educación. UNESCO. Sumario. Warisata - Revista de Educación 2022, 4 (12). https://doi.org/10.61287/warisata.v4i12.6.

La enseñanza de la toxicología en la Facultad de Química: un ejemplo de desarrollo epistemológico

Teresa Heller[1]

[1]Area Toxicología, Departamento Estrella Campos, Facultad de Química, Universidad de la República Montevideo, Uruguay

theller@fq.edu.uy

La toxicología es la ciencia multidisciplinaria que estudia los efectos adversos de las sustancias químicas en los organismos vivos. La epistemología es la rama de la filosofía que se ocupa del estudio del conocimiento científico, El objetivo de esta presentación es demostrar cómo el campo de estudio de la asignatura Toxicología en la Facultad de Química de la Udelar se fue desarrollando , agregando nuevas áreas a lo largo de su historia. En cuanto a su metodología, este trabajo es parte de una investigación educativa más amplia llevada a cabo en la Facultad de Química, en la que se exploraron las interrelaciones entre la toxicología, la química y la educación ambiental. Los resultados de este estudio permitieron concluir que el Área Toxicología fue ampliando sus contenidos de enseñanza, investigación y extensión a lo largo de su trayectoria institucional, acompañando la evolución a nivel mundial y local A partir de la toxicología legal y forense de 1908, que se mantuvo a lo largo del siglo XX , a partir de 1990 se incorporaron la toxicología ocupacional, ambiental y social, lo que permitió no solo el desarrollo académico de la investigación y la enseñanza, sino también dar respuesta a la demanda de la sociedad manifestada en consultas y pedidos de asesoramiento. Como ejemplos de este desarrollo destacamos la relevancia de la inclusión de los enfoques y disciplinas de Ecosalud y Geología médica. Nuestra conclusión principal a nivel epistemológico nos confirma en la importancia de seguir en este camino de apertura a la incorporación de las nuevas tendencias de la toxicología en nuestras prácticas de enseñanza, sin dejar de lado las tradicionales que siguen plenamente vigentes.

Bibliografía:

Casarett and Doull's Toxicology, The Basic Science of Poisons, 8th Edition, Mc Graw-Hill, New York, 2013

Stanley Manahan, Fundamentals of Environmental and Toxicological Chemistry, 4th Edition, CRC Press, Boca Raton, 2013

Olle Selinus, Essentials of Medical Geology, Revised Edition, Springer,New York, 2013

Una intervención sobre la regulación de la procrastinación

Jimena Presa[1]; Martina Cerruti[1]; Patricia Esperón[2]; Virginia Rubio[3]; Shirley Méndez[1]

[1]*Unidad Académica de Educación Química, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[2] *Departamento de Bioquímica Clínica, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[3]*Programa de Respaldo al Aprendizaje, CSEEP, Udelar, Montevideo, Uruguay*

jimenapresa@gmail.com

La procrastinación se refiere a un patrón cognitivo conductual desadaptativo en el que el individuo tiene la intención de realizar una tarea, pero presenta un atraso con una falta de atención y esmero en el cumplimiento tanto al empezar, como también en el desarrollo y la finalización que generalmente se acompaña de sentimientos de nerviosismo o inquietud y abatimiento (Steel, 2007; Mustaca et al, 2022). La Teoría de la motivación temporal (Steel y König, 2006) es un modelo integrador de la procrastinación, encuadrado en la teoría motivacional y el concepto esencial en torno al cual gira la teoría es el tiempo. Desde el año 2023 se viene desarrollando en Facultad de Química una propuesta formativa el "*Taller de regulación de las emociones y la procrastinación".* El objetivo de esta intervención es contribuir en los procesos de aprendizaje y en las trayectorias educativas de los estudiantes a partir de la resolución de problemas relacionados con la procrastinación académica y las dificultades en la regulación de las emociones. Han participado en la actividad 46 estudiantes. En cada sesión se abordan las emociones académicas, las estrategias de procesamiento cognitivo, el uso del tiempo, etc. a partir de presentaciones por parte de los docentes y discusiones en base a actividades colaborativas, interactivas. A través de una evaluación continua se hace un seguimiento del progreso académico, de actitudes y desempeño, así como la regulación de las emociones promoviendo la metacognición sobre su forma de aprender. Luego de finalizado el curso se les consulta en cada semestre sobre cómo van avanzado, si han podido aplicar las estrategias aprendidas. Se les consulta sobre si han podido afrontar situaciones de aprendizaje diversas y resolverlas continuando con sus trayectorias curriculares con autonomía. Este seguimiento nos ha permitido conocer que estos estudiantes valoran fuertemente lo realizado en el curso y aplican diversas estrategias tanto de procesamiento cognitivo como de regulación emocional y uso del tiempo aprendidas. Se puede concluir que los y las estudiantes manifiestan que el reflexionar sobre sus emociones y su relación con el aprendizaje les permite identificar sus estrategias de aprendizaje. De esta manera logran establecer una relación con su aprendizaje de forma organizada y agradable que facilita la superación de aquellas emociones que obstaculizan su desempeño y llevan a conductas procrastinadoras evitando el rezago en sus trayectorias o la desvinculación.

Referencias:

Mustaca, A. E., Luján, M., y Rinaudo, M. C. (2022). Procrastinación académica: Evaluación y relaciones con variables motivacionales. *Psiencia. Revista Latinoamericana de Ciencia del Psicológica*, 14(1), 1–12.

Steel, P. (2007). The nature of procrastination: A meta-analytic and theoretical review of quintessential self-regulatory failure. *Psychological Bulletin,* 133(1), 65–94.

Corrosión en contexto: una experiencia interdisciplinaria para enseñar química en ingeniería

Ana Claudia Pina[1,2]; Mirian Elizabeth Casco[2]

[1]Área Fisicoquímica, Detema, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay

[2] Grupo de Materiales Ingeniería y Medioambiente, Departamento de Ingeniería, Universidad Católica del Uruguay.

acpina@fq.edu.uy

Este trabajo presenta una experiencia didáctica orientada a estudiantes de Ingeniería Industrial, Ingeniería en Alimentos e Ingeniería Ambiental, en el marco de las asignaturas Química General y Ciencia de los Materiales de la Universidad Católica del Uruguay. La propuesta consistió en un taller sobre corrosión, diseñado con el objetivo de integrar contenidos teóricos desde una perspectiva aplicada, fortaleciendo la comprensión de un fenómeno relevante en diversos campos de la ingeniería [1].

El taller se organizó en cinco estaciones experimentales rotativas, abordando temáticas como formación de pares galvánicos, variación de condiciones (presión, temperatura, concentración de oxígeno), ambientes agresivos y estrategias de protección catódica. En cada estación, los estudiantes trabajaron en equipos para formular hipótesis, ejecutar experimentos, registrar observaciones y discutir resultados, promoviendo un aprendizaje activo y colaborativo.

Desde el punto de vista pedagógico, la experiencia permitió resignificar el rol de la química como disciplina transversal, que aporta herramientas fundamentales para analizar y resolver problemas técnicos reales. Además, se promovió el desarrollo de habilidades como el pensamiento crítico, la comunicación científica y la toma de decisiones basadas en evidencia.

La actividad fue bien recibida por el estudiantado, evidenciando un mayor nivel de participación y apropiación de los conceptos. Se concluye que este tipo de estrategias de enseñanza interdisciplinaria favorecen una comprensión más profunda de los contenidos y fortalecen el vínculo entre la teoría y la práctica profesional.

1 – Callister, William D., 2003. Materials Science and Engineering: An Introduction, 6th edition, U.S.A., John Wiley & Sons.

Patrones de aprendizaje y emociones de logro en los estudiantes de Facultad de Química

Shirley Méndez[1]; Luis Furlan[2]; Patricia Esperón[3]

[1]*Unidad Académica de Educación Química, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[2] *Cátedra de metodología de la investigación, Facultad de Psicología, UNC, Córdoba, Argentina*

[3] *Departamento de Bioquímica Clínica, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

smendez@fq.edu.uy

En el presente trabajo se analiza cómo las emociones influyen en la motivación, las estrategias regulatorias, cognitivas y conductuales de los estudiantes de las distintas carreras de la Facultad de Química. Uno de los elementos centrales de la investigación es la teoría de control-valor de las emociones de logro de Pekrun. Además, se abordan los patrones de aprendizaje según la teoría de Vermunt, identificando perfiles estudiantiles diferenciados y sus vínculos con las emociones experimentadas. Para explorar estas relaciones se utilizó un enfoque empírico-descriptivo donde se aplicó el Inventario de estilos de aprendizaje (Martínez Fernández et al, 2010) y el Cuestionario de emociones de logro (Sánchez Rosas, 2015) a los estudiantes que cursaban sexto semestre en la FQ (N= 149). Entre los análisis realizados se incluye análisis factorial exploratorio, de correlaciones y de redes que permitieron visualizar las dimensiones subyacentes, las interacciones entre las variables consideradas. El análisis de redes reveló patrones de relación y nodos clave, mostrando los factores con mayor impacto en los patrones de aprendizaje. Los resultados indican que los estudiantes de FQ se agrupan en dos patrones de aprendizaje, uno dirigido al significado y a la aplicación (ω= 0.852) y otro dirigido a la reproducción sin regulación (ω= 0,753). Por otro lado, las emociones de valencia negativa presentan relaciones estadísticamente significativas con el patrón de aprendizaje dirigido a la reproducción sin regulación y las emociones de valencia positiva lo hacen con el patrón dirigido al significado y a la aplicación. En el caso del patrón dirigido al significado y a la aplicación las emociones de valencia negativa correlacionan con valores bastante más bajos que como lo hacen con el patrón dirigido a la reproducción sin regulación. Como conclusión, se subraya la importancia de diseñar intervenciones pedagógicas que fomenten la regulación emocional y metacognitiva, reduciendo la ansiedad y promoviendo un aprendizaje más profundo y autónomo. Se propone utilizar estrategias educativas basadas en el diseño de itinerarios personalizados de aprendizaje y en la regulación emocional, con el fin de optimizar el rendimiento académico de los estudiantes y mejorar su bienestar general.

Referencias

Martínez-Fernández, J. R. y Vermunt, J. D. (2015). A cross-cultural analysis of the patterns of learning and academic performance of Spanish and Latin-American undergraduates. *Studies in Higher Education,* 40 (2), 278-295.

Sánchez Rosas, Javier. (2015). The Achievement Emotions Questionnaire-Argentine (AEQ-AR): internal and external validity, reliability, gender differences and norm-referenced interpretation of test scores. *Revista Evaluar*. 15. 41-74.

Instagram en la formación docente continua en Química: análisis motivacional mediado por IA de @UnTIC_en5

Silvana Flecchia [1]; Viviana Heguaburu[2]; Alejandro Amaya[1]

[1]*Unadeq, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay*

[2]*Departamento de Innovación y Emprendimiento, Universidad Tecnológica, Montevideo, Uruguay*

sflecchia@fq.edu.uy

El uso de redes sociales como espacios de formación permanente no formal representa una oportunidad para el desarrollo profesional docente en Química. En este estudio se analiza el perfil de Instagram @UnTIC_en5, concebido como una estrategia formativa accesible, flexible y situada, orientada a fortalecer las competencias docentes en el uso pedagógico de tecnologías digitales. La propuesta surge durante la pandemia de COVID-19 como respuesta a la necesidad de recursos contextualizados que acompañen la práctica educativa en entornos mediados por tecnologías. A través del perfil se ofrecen microcontenidos de rápida apropiación, diseñados para su transferencia al aula, promoviendo así nuevas formas de aprendizaje. Con el objetivo de profundizar en los aspectos motivacionales de esta experiencia formativa, se realizó un análisis cualitativo de los comentarios incluidos en los 135 cuestionarios de la Escala Motivacional de Formación a través de Redes sociales (EMFoR), respondidos por docentes seguidores del perfil. Este análisis se apoyó en el uso de la inteligencia artificial Gemini, siguiendo un protocolo temático adaptado a herramientas de IA, según lo propuesto por Lopezosa et al. (2024), y se estructuró en torno a los subcomponentes del componente valor de la teoría Expectativa-Valor de Eccles y Wigfield (2002): interés, utilidad, importancia y costo. Mediante una serie de prompts específicos, los comentarios fueron clasificados por la IA y valorados en una escala de 1 a 5, lo que permitió sistematizar la información y generar una tabla con las puntuaciones obtenidas para cada subcomponente, acompañadas de evidencias textuales representativas. Los resultados muestran una alta valoración de la utilidad práctica del perfil, así como de su relevancia e interés, destacando el potencial de las redes sociales como espacios innovadores para la formación docente.

Eccles, J. S., & Wigfield, A. (2002). *Motivational beliefs, values, and goals*. *Annual Review of Psychology, 53*, 109–132. https://doi.org/10.1146/annurev.psych.53.100

Lopezosa, C., Goyanes, M., & Codina, L. (2024). *Acelerando la investigación cualitativa con inteligencia artificial: Una guía práctica para el diseño, desarrollo y ejecución de investigación con entrevistas. Col·lecció del CRICC. Universitat de Barcelona.*

Perfil IG: https://www.instagram.com/untic_en5/

Conectar los puntos: el impacto de factores contextuales en el involucramiento de visitantes a un centro de ciencias

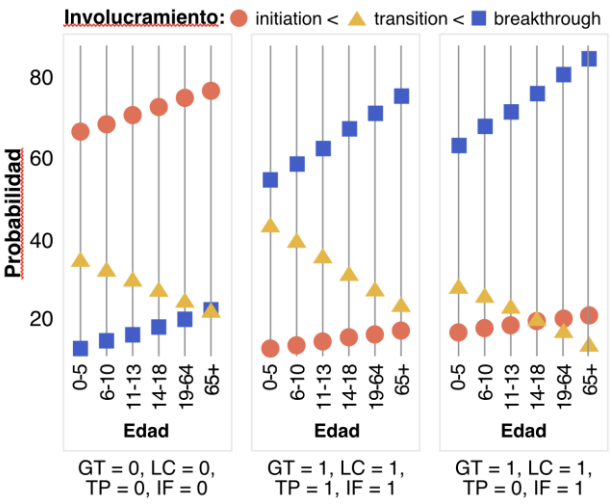
Soledad Machado Corral[1]; Nicolás Veiga[2]; Chantal Barriault[3]; Lucía Otero Zubiaurre[2]

[1]CEF, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay
[2]Química Inorgánica, DEC, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay
[3]School of Natural Sciences, Laurentian University, Sudbury, Canadá
smachado@fq.edu.uy

El aprendizaje informal en centros de ciencia ha ganado relevancia como una forma efectiva de promover la educación en ciencias fuera del entorno escolar. Sin embargo, existe una brecha en la comprensión de los factores que influyen en el aprendizaje en estos espacios, y en qué grado. Este estudio examina la relación entre {1} factores contextuales, como género y edad de los visitantes, presencia de un facilitador, y diseño de la exhibición, y {2} el involucramiento, medido con el Visitor-Based Learning Framework. Utilizamos técnicas de regresión ordinal en un conjunto de datos secundarios de 97 exhibiciones y más de 9.000 visitantes a un centro de ciencias canadiense para determinar qué variables tienen un impacto en el involucramiento.

Se identificaron varios descriptores estadísticamente significativos que influyen en los niveles de involucramiento. Controlando el efecto del resto de las variables, se observó que la probabilidad relativa (odds) de que un visitante alcance un nivel más alto de involucramiento es 3.24 veces mayor si visita en grupo (odds ratio, OR = 3.24). En el caso de exhibiciones con características más colaborativas, la probabilidad relativa también se incrementa significativamente (OR = 2.70), mientras que la presencia de un facilitador triplica las odds (OR = 3.24).

Asimismo, desarrollamos un modelo predictivo que estima el nivel de involucramiento considerando variables clave de manera conjunta: tipo de grupo (GT), lectura de cartelería (LC), toma fotografías (TP), interacción con un facilitador (IF), y edad. Este enfoque holístico, más cercano a las condiciones reales de interacción en entornos informales de aprendizaje, permite explorar patrones complejos y más representativos del comportamiento.



Los resultados de este estudio pueden aplicarse para optimizar el diseño de programas y exhibiciones, y mejorar la formación del personal. Además, comprender los factores que inciden en el involucramiento permite desarrollar estrategias basadas en evidencia, potenciando tanto la experiencia del visitante como los resultados de aprendizaje.

El uso de videos demostrativos como herramienta didáctica en la enseñanza de la química experimental

Virginia Aldabalde[1]; Ivana Núñez[1,2]; Estefanía Dibello[1]; Mariela Riso[1]; Alejandro Perixoto[1]; Mariana Pazos[1]

[1]*Laboratorio de Síntesis Orgánica, DQO, Facultad de Química-Udelar, Montevideo, Uruguay*

[2]*Secretaría de Apoyo al Estudiante, Facultad de Química-Udelar, Montevideo, Uruguay*

valdabal@fq.edu.uy, ivanu@fq.edu.uy, edibello@fq.edu.uy

Frente a los desafíos impuestos por la pandemia, y en el marco de un proyecto de Innovaciones Educativas, el curso de laboratorio QO-103 del Departamento de Química Orgánica de la Facultad de Química (UdelaR) incorporó nuevos recursos audiovisuales con el objetivo de fortalecer la metodología de clase invertida. Esta estrategia busca una mayor participación y autonomía del estudiante en su proceso de aprendizaje, promoviendo y facilitando instancias más significativas de intercambio durante la clase.

Se elaboraron 14 videos demostrativos breves, de menos de 5 minutos cada uno, para acompañar la preparación previa de cada práctica experimental. Estos materiales, disponibles a través del aula virtual (Moodle), complementan la lectura del material teórico y permiten una comprensión más efectiva de las técnicas de laboratorio. La evaluación de esta implementación se realizó mediante encuestas a estudiantes y docentes, cuyos resultados mostraron una mejora en la comprensión de los procedimientos prácticos, una mayor autonomía en el trabajo experimental y una valoración positiva de la herramienta audiovisual.



Figura 1: Video demostrativo de la práctica Síntesis de Acetanilida

La experiencia demuestra que este recurso audiovisual es una herramienta didáctica y pedagógica valiosa en la enseñanza de la química experimental, permitiendo avanzar hacia una educación centrada en el estudiante, más activa, flexible y adaptada a las necesidades de los estudiantes del siglo XXI.

Nuevas aplicaciones de Dihidrolevoglucosenona como plataforma biorrenovable para sintetizar moléculas con potencial actividad biológica

Alejandro Peixoto de Abreu Lima[1]; David Tejedor[2]; Williams Porcal[1]; Virginia López[1]

[1]*Laboratorio de Síntesis Orgánica y Desarrollo de Fármacos, Instituto Pasteur de Montevideo, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay*

[2]*Instituto de Productos Naturales y Agrobiología, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, La Laguna, Tenerife, Islas Canarias, España*

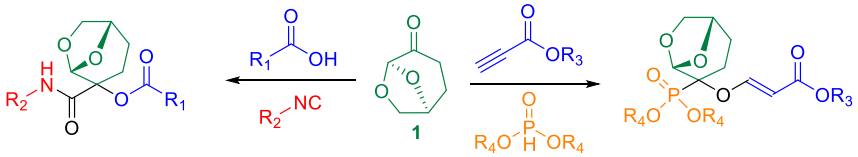
apeixoto@pasteur.edu.uy

Dihidrolevoglucosenona (Cyrene) **1** es una cetona bicíclica quiral que se obtiene en dos pasos a partir de biomasa.[1] Su bajo costo, origen biorrenovable y capacidad biodegradable la convierten en una alternativa atractiva como disolvente "verde", en sustitutución de disolventes de alta polaridad como DMF. Además, se ha observado que presenta una reactividad sorpresivamente alta en comparación con otras cetonas, lo que nos motivó a explorar su comportamiento en diferentes reacciones, con enfoque en condiciones "verdes".

Comenzamos planteando utilizar el reactor monowave 50W, como fuente eficiente de energía, para obtener productos de Passerini-3C, empleando **1** como componente carbonílico, junto con ácidos e isonitrilos.[2] Mediante esta estrategia conseguimos sintetizar 22 compuestos (sin considerar posibles diasterómeros) en cinco minutos de reacción, a temperaturas moderadas (40°C) y sin uso de disolventes. Análogamente, ensayamos la reacción de Ugi-4C mediante la incorporación de aminas, pero, no obtuvimos los productos deseados, al no conseguir formar el intermedio imina, paso clave para esta reacción.

Finalmente, exploramos el uso de **1** como reactivo en una reacción de tipo Pudovik-3C, que involucra la adición secuencial de fosfito a un carbonilo y luego a un alquino activado.[3] Esta reacción se llevó a cabo en hexanos usando DABCO como catalizador, a temperatura ambiente y en una hora. Si bien los rendimientos obtenidos fueron bajos, logramos aislar un producto final, así como el intermedio correspondiente a la adición de fosfito a **1**.

Para concluir, demostramos que **1** puede participar como reactivo en distintas reacciones multicomponente, permitiendo obtener productos de mayor complejidad estructural en un solo paso de reacción y bajo condiciones compatibles con los principios de la química verde.



1-Stini, N. A., Gkizis, P. L., & Kokotos, C. G. (2022). *Green Chemistry*, **24**, 6435–6449. 2-Martinho, L. A., Rosalba, T. P. F., Sousa, G. G., Gatto, C. C., Politi, J. R. S. & Andrade, C. K. Z. (2024). *Mol. Divers.* **28**, 111–123. 3-Pudovik, A. N. & Konovalova, I. V. (1979). *Synthesis.* **2**, 81-96.

Radiosíntesis de [^{11}C]azul de metileno mediante sustitución nucleofílica aromática con [^{11}C]dimetilamina

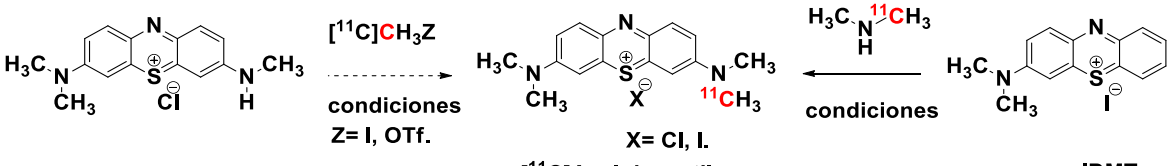
Kevin Zirbesegger[1]; Eduardo Savio[1]; Williams Porcal[2]

[1]*Departamento de Radiofarmacia, Centro Uruguayo de Imagenología Molecular, Montevideo, Uruguay*

[2]*Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, UdelaR, Montevideo, Uruguay*

kevin.zirbesegger@cudim.org

El PET es una técnica de imagenología molecular que permite visualizar diferentes procesos bioquímicos a nivel celular y molecular. Ésta se basa en el uso de moléculas marcadas con radionucleidos emisores de positrones dirigidas a blancos moleculares específicos. En este contexto, diversos estudios han establecido el papel de la enzima monoaminooxidasa A (MAO-A) en la agresividad del cáncer de próstata (CP). En base a estos antecedentes, nuestro grupo se planteó el estudio de radiotrazadores PET para la evaluación y posible diagnóstico del CP de alta agresividad. En este sentido, se estudiaron radiotrazadores que son reconocidos inhibidores selectivos de MAO-A. De este modo, se obtuvieron resultados prometedores de la evaluación biológica del radiotrazador [^{11}C]harmina, en un modelo xenográfico, inducido en ratones atímicos con líneas celulares humanas de CP. En el presente trabajo se describen los resultados de la radiosíntesis del inhibidor de MAO-A [^{11}C]azul de metileno. Inicialmente, se intentó obtenerlo mediante el seguimiento de la única estrategia descrita, a partir de una reacción de *N*-metilación nucleofílica del precursor comercial Azure B. Los resultados obtenidos nos llevaron a la conclusión de que el producto generado mediante dicha metodología no era el esperado, siendo el propuesto [^{11}C]CH_3Cl. En base a estos resultados nos planteamos el diseño de una nueva estrategia, basándonos en la síntesis orgánica convencional de azul de metileno y una estrategia reportada para la incorporación de ^{11}C por sustitución nucleofílica aromática mediante [^{11}C]dimetilamina. Esta metodología nos permitió efectuar la radiosíntesis de [^{11}C]azul de metileno. Además, nos planteamos un sistema de purificación mediante HPLC semipreparativo y cartucho SEP-PAK, así como su formulación final que permita realizar ensayos biológicos *in vivo*.



Diferentes estrategias para la obtención del radiotrazador [^{11}C]azul de metileno.

Referencias: Wu, J.B.Y.; Chen, C.H. Front Oncol, **2023**, 13, 1137050. Zirbesegger, K.; Reyes, L.; Paolino, A.; Dapueto, R.; Arredondo, F.; Gambini, JP.; Savio, E.; Porcal, W. ACS Pharmacol Transl Sci, **2023,** 6, 11, 1734–1744. Jacobson, O. et al. App Rad Isot, **2008**, 66, 188-193.

Plataformas químicas derivadas de biomasa como precursoras de moléculas bioactivas: potenciales agentes anti-UV y antioxidantes

Victoria de la Sovera[1]; Agustina Sanders-Pons[2]; Miriam López[2]; Guillermina Pallas[2]; Tiago Tassano[1]; Williams Porcal[1]; Gloria Virginia López[1]; Paola Hernández[2]

[1]Laboratorio de Síntesis Orgánica y Desarrollo de Fármacos, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

[2]Departamento de Genética, Instituto de Investigaciones Biológicas Clemente Estable, Montevideo, Uruguay

vdelasovera@fq.edu.uy

La radiación ultravioleta (UV) genera daño en el ADN y estrés oxidativo, provocando fotoenvejecimiento celular y favoreciendo el desarrollo de cáncer de piel.[1] Los fotoprotectores de uso actual obtenidos a partir de derivados de petróleo presentan algunos efectos adversos para la salud humana y ambiental.[2] Estudios recientes describen propiedades fotoprotectoras e inocuidad de derivados obtenidos a partir de biomasa que los hacen prometedores sustitutos de los filtros UV de uso común.[3-4] El objetivo principal de nuestro trabajo es la síntesis y evaluación biológica de nuevas moléculas, obtenidas a partir de plataformas químicas derivadas de biomasa lignocelulósica y desarrolladas siguiendo principios de química verde, con potencial para ejercer un efecto fotoprotector frente a la radiación UV. Para esto se evaluó una quimioteca de más de 30 compuestos, seleccionando aquellos capaces de absorber en el rango y mantener su fotoestabilidad frente a la radiación UV. Se determinó su citotoxicidad en queratinocitos HaCaT y la actividad antioxidante mediante las técnicas ABTS, ORAC-FL y DCFH-DA.[5-7] La protección frente al daño en el ADN fue evaluada a través de inmunocitoquímica. Finalmente, determinamos el efecto disruptor endócrino *in silico.* La avobenzona, molécula derivada del petróleo y principio activo en filtros solares comerciales, fue utilizada como referencia en estos ensayos. En esta oportunidad presentamos los resultados obtenidos hasta el momento donde, de los 30 compuestos estudiados se identificó un grupo de moléculas que resultó fotoestable frente a la radiación UVA y UVB, no presentó citotoxicidad y mostró un efecto fotoprotector superior al compuesto de referencia. Estos resultados son alentadores y abren una nueva perspectiva respecto a la protección frente a la radiación solar.

[1] Armstrong, B. K. et al, *J. Photochem. Photobiol. B Biol.* **2001**, 63, 8–18.[2] Paul, S. P., *Front. Med.* **2019**, 6, 1–7.[3] Peyrot, C. et al, *Molecules* **2020**, 25, 1-15.[4] Mention, M.M. et al, *Green Chem. Lett. Rev.* **2023**, 16.[5] Re, R. et al, *Free Radic. Biol. Med.* **1999**, 26, 1231–1237. [6] Ou, B. et al, *J. Agric. Food Chem.* **2001**, 49, 4619–4626. [7] Cancela, S. et al, *Eur. J. Pharmacol.* **2020**, 871, 172926.

Explorando nuevas aplicaciones de Dioxigenasas tipo Rieske: reacciones de ciclopropanación

Rodrigo Arce[1]; Victoria Giorgi[1]; Ignacio Carrera[2]; Agustina Vila[1]

[1]*Laboratorio de Biocatálisis y Biotransformaciones (LBB), Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Laboratorio de Síntesis Orgánica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

avila@fq.edu.uy

Las dioxigenasas tipo Rieske (RDOx) son enzimas bacterianas comúnmente utilizadas para dihidroxilación de arenos por su alta regio- y estereoselectividad. Durante el estudio de estas enzimas nuestro grupo ha explorado distintas actividades catalíticas[1–3] centradas en la reactividad del átomo de hierro que presentan en su sitio activo, entre ellas la capacidad de formar carbenos y catalizar reacciones de ciclopropanación (Figura 1A), de manera análoga a lo que ha sido reportado previamente para otras enzimas de hierro como las monooxigenasas hemo dependientes.[4–6] La posibilidad de aplicar estas enzimas a la formación de nuevos enlaces C-C resulta de interés como aporte de una nueva herramienta a la síntesis orgánica clásica dada la alta quimio, regio y estereoselectividad que caracteriza las reacciones enzimáticas, así como su menor impacto ambiental.

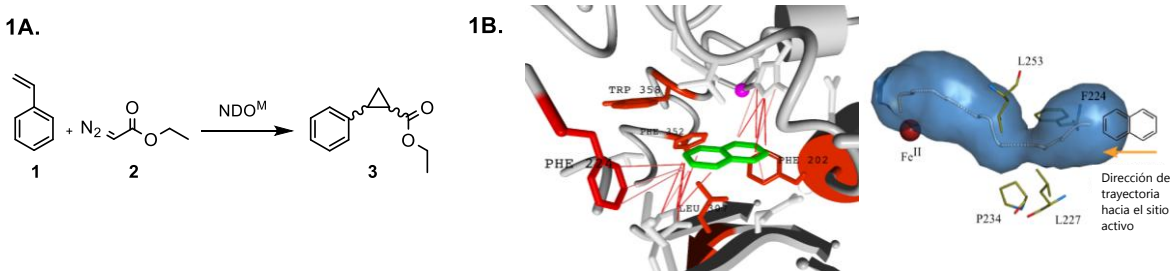


Figura 1: A. Reacción de ciclopropanación en estudio. **B.** Aminoácidos modificados en las bibliotecas de NDO utilizadas.

En este trabajo se estudiaron 6 bibliotecas de mutantes de la Naftaleno Dioxigenasa (NDO^M) en posiciones claves del sitio activo y su túnel de acceso (F202_NHT, F224_RNC, H295_NHT, L307_NHT, F352_NHT y W358_NHT, Figura 1B), utilizando células enteras de *E. coli* JM109 (DE3) recombinantes como biocatalizadores en la reacción entre estireno (**1**) y diazoacetato de etilo (**2**) en condiciones anaerobias, y se compararon con la cepa que expresa la NDO nativa. En un primer screening se analizaron 34 colonias de las bibliotecas NHT y 22 colonias de la biblioteca RNC en placas multipocillo, y tras el análisis de los productos por GC-FID y GC-MS se seleccionaron 64 clones que mostraron conversiones mayores que la cepa nativa, los cuales se sometieron a un segundo screening. Así se seleccionaron los dos clones con mayores conversiones pertenecientes a las bibliotecas F352 y W358 con los que actualmente se está trabajando a mayor escala para determinar el rendimiento y evaluar el exceso diasteromérico y exceso enantiomérico de los productos obtenidos (**3**).

1. Vila, M. A. *et al. ChemBioChem* 17, 291–295 (2016). **2.** Vila, M. A. *et al. Adv. Synth. Catal.* 359, 2149–2157 (2017). **3.** Vila, M. A., Steck, V., *et al. Chembiochem* 1900783, 1–8 (2020). **4.** Brandenberg, O. F., *et al. J. Am. Chem. Soc.* 141, 8989–8995 (2019). **5.** Bordeaux, M., *et al. Angew. Chemie - Int. Ed.* 54, 1744–1748 (2015). **6.** Coelho, P. S. *et al. Nat. Chem. Biol.* 9, 485–487 (2013).

De la curiosidad química a un hallazgo sintético: una reacción multicomponente novedosa hacia derivados pirrólicos bioactivos

Mariana Ingold[1]; Tiago Tassano[1]; José M. Padrón[2]; Leopoldo Suescun[3]; Gonzalo Hernández[4]; Williams Porcal[1,4]; Gloria. V. López[1,4]

[1]Laboratorio de Síntesis Orgánica y Desarrollo de Fármacos, Instituto Pasteur de Montevideo, Uruguay.
[2]BioLab, Instituto Universitario de Bio-Orgánica "Antonio González" (IUBO-AG), Universidad de La Laguna. La Laguna, España.
[3]Laboratorio de Cristalografía, Química del Estado Sólido y Materiales/DETEMA, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay
[4]Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Udelar, Montevideo, Uruguay.

mingold@pasteur.edu.uy

Las reacciones multicomponente (RMC) constituyen en la actualidad una herramienta poderosa en la síntesis orgánica y la química medicinal, ya que permiten construir productos diversos y complejos a partir de tres o más reactivos en un solo paso, maximizando la eficiencia atómica y reduciendo etapas de purificación. Esta metodología, además de ser eficiente y versátil, se alinea con los principios de la química verde, lo que la convierte en una estrategia sostenible para el diseño de nuevas moléculas.

En los últimos años, las RMC han cobrado especial relevancia en el desarrollo de compuestos bioactivos y en la optimización de rutas sintéticas en la industria farmacéutica. Por este conjunto de antecedentes, en nuestro laboratorio nos hemos dedicado activamente a su estudio.[1] En este contexto, identificamos una reactividad inesperada al ensayar la reacción de Ugi-Smiles utilizando 2-nitroetenilfenol como componente ácido. Esto nos permitió obtener derivados pirrólicos altamente funcionalizados mediante una RMC novedosa (Figura 1), empleando condiciones suaves y amigables con el ambiente.

El presente trabajo se centra en el estudio sintético de esta nueva variante de RMC descubierta por serendipia, con el objetivo de optimizar las condiciones de reacción, explorar su alcance estructural y evaluar preliminarmente el perfil bioactivo de los productos obtenidos. Se muestran los avances en su optimización, alcance y el estudio de su mecanismo a través de RMN. Asimismo, se presentan resultados preliminares de la caracterización de bioactividad de los compuestos generados como agentes antiproliferativos, incluyendo el análisis de su índice de selectividad y su capacidad para inhibir el factor de transcripción NF-κB.

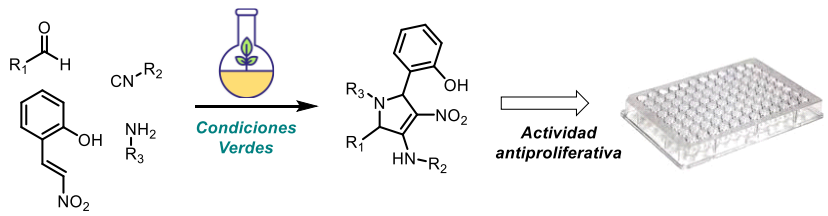


Figura 1. Esquema general de la nueva variante de RMC para la obtención de derivados pirrólicos bioactivos descripta en nuestro laboratorio

1.a) Ingold, M; et al. Eur. *J. Med. Chem*. **2018**, 143, 1888–1902. b) Ingold, M; et al. *ChemMedChem* **2019**, 14, 1669–1683. c) Ingold, M; et al. *Molecules* **2022**, 27, 1756.

El efecto de la concentración crítica de micelas en la respuesta de especies anfifílicas utilizando transistores electroquímicos orgánicos basados en P3HT

Mariano Romero; Tatiana Gregorio; Dominique Mombrú; Álvaro W. Mombrú

Área Física, DETEMA, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay

mromero@fq.edu.uy

Aquí presentamos un estudio sobre el efecto de la concentración micelar crítica en la respuesta de especies anfifílicas de alquilsulfonato mediante transistores electroquímicos orgánicos (OECT) que funcionan en modo de acumulación. En primer lugar, la drástica mejora de la respuesta de los OECT encima de la concentración micelar crítica nos permite utilizar esta técnica para determinarla, obteniendo valores bastante similares a los de otros métodos publicados en la literatura. Por encima de la concentración micelar crítica, los dispositivos OECT con mejor respuesta produjeron relaciones ON/OFF de 30 – 60, transconductancia normalizada máxima g_{max}^* = 1.99 – 1.39 mS.cm^{-1} y voltaje umbral -V_{th} = 0.39 – 0.55 V. Nuestros estudios de espectroscopia de impedancia realizados en los modos ON y OFF sugirieron que, en presencia de un voltaje de compuerta negativo suficientemente fuerte, no solo los contraiones de sodio son expulsados del canal, sino que también las moléculas anfifílicas de la monocapa probablemente invierten su orientación y se inyectan en la región P3HT. En este escenario, los grupos sulfonato de las especies anfifílicas inducen sincrónicamente el dopaje de P3HT, lo que conduce a un aumento drástico de la corriente del canal por encima de la concentración micelar crítica. Nuestros resultados indican que los dispositivos OECT representan una plataforma prometedora para estimar la concentración crítica de micelas de especies anfifílicas, pero también para estudiar la formación de monocapas anfifílicas de sistemas más complejos de interés biológico.

Desarrollo y evaluación de un complejo de ^{99m}Tc derivado de Erlotinib para imagenología molecular en cáncer de mama triple negativo.

Joaquín Afonso[1]; Valentina Lembo[1]; Daniela Gamenara[2]; Ana Rey[1]; Gonzalo Carrau[2];

Ma. Emilia Tejería[1]

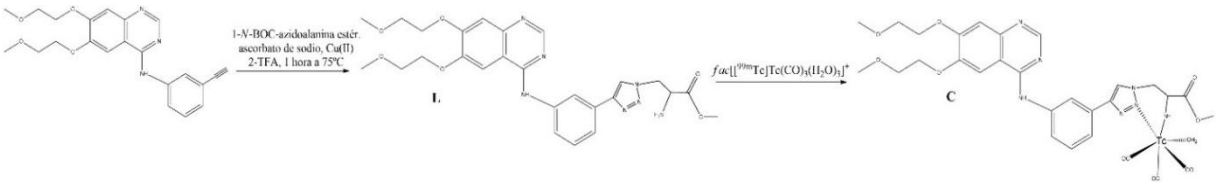
[1] *Área Radioquímica, Facultad de Química, Universidad de la República, (UdelaR), Montevideo, Uruguay.*

[2] *Laboratorio de Síntesis Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República (UdelaR), Montevideo, Uruguay.*

joacoafonso93@gmail.com

El cáncer de mama triple negativo es un problema de Salud Pública mundial que cuenta con una alta tasa de recurrencia y mortalidad. En el 60% de los casos hay una sobreexpresión del factor de crecimiento epidérmico (EGFR), por lo que este blanco molecular podría utilizarse para desarrollar una nueva estrategia de diagnóstico y terapia.

Con el objetivo de desarrollar un radiotrazador para imagenología de los EGFR se sintetizó un ligando (**L**) empleando una cicloadición “3+2” entre el alquino del Erlotinib (inhibidor del EGFR) y una azida (*N*-BOC-azidoalanina), para formar un triazol, que junto con el grupo amino e hidroxilo coordinan el metal mediante la formación de un complejo tricarbonílico de Tc(I) (**C**). **L** fue marcado en 2 etapas: preparación del precursor tricarbonílico $[^{99m}Tc(I)(CO)_3(H_2O)_3]^+$ (30-50 mCi) y sustitución de **L** durante 30 min a 75°C (0.7mg, 3-6 mCi). La pureza radioquímica (PRQ) fue evaluada por cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) siendo de 85%. El complejo de interés (**C**) fue purificado por HPLC obteniéndose una especie con tiempo de retención de 19 minutos y una PRQ mayor al 90%. **C** fue estable en el tiempo y en plasma humano por al menos 4 horas. Se determinó la lipofilicidad a través del log P, que fue de (1.3±0.1) y también se evaluó la unión a proteínas plasmáticas por exclusión molecular, la cual fue de 66.3±9 %.



Como conclusión se logró obtener un potencial radiofármaco derivado de Erlotinib con una PRQ mayor al 90% y buena estabilidad en el medio de reacción y en plasma humano. La unión a proteínas plasmáticas es moderada y la lipofilicidad está dentro del rango (Log P -0.5 y 2 a pH = 7.4) que se consideran óptimos para asegurar un buen pasaje a través de la membrana plasmática. En un futuro cercano se van a realizar los estudios *in vitro* en células epiteliales adherentes MDA-MB-231 de cáncer de mama triple negativo que expresan el EGFR y en MCF-7 como control negativo.

Agradecimientos: ANII (POS_NAC_2022_1_173941), Centro de Medicina Nuclear e Imagenología Molecular del Hospital de Clínicas, Consultorio Ferrari Ferrando Paez, PEDECIBA Química.

Nanopartículas de oro modificadas con proteína, analizando sus propiedades de color como parámetro de caracterización.

Pablo Fagúndez[1]; Sabrina Maccio[2]

[1]*Unidad de Bioquímica Analítica, Centro de Investigaciones Nucleares, Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Laboratorio de Biomateriales, Instituto de Química Biológica, Facultad de Ciencias, UdelaR, Montevideo, Uruguay.*

pfagundez@fcien.edu.uy

Las nanopartículas plasmónicas de oro (AuNPs) y plata (AgNPs) son ampliamente utilizadas en bioanálisis y biosensores por sus propiedades colorimétricas. [1,2] Para estas aplicaciones se requiere inmovilizar moléculas de reconocimiento en su superficie, siendo crítica la caracterización posterior para confirmar la modificación y estabilidad coloidal mediante un abordaje multi-técnica, tales como UV-VIS, DLS, potencial-Z y FTIR. [3,4] Particularmente la caracterización UV-VIS, un corrimiento de pocos nanómetros en la posición del máximo del plasmón de las NPs suele ser tomado como evidencia contundente de la modificación en muchos trabajos científicos, sin perjuicio de que estos corrimientos pueden obtenerse también por formación de agregados de NPs, debido a la pérdida de estabilidad coloidal. En este trabajo nos planteamos utilizar el análisis de espacios de color, como forma alternativa de procesamiento de espectros y evaluar la sensibilidad en los cambios de color como parámetro indicativo de la modificación de AuNPs, particularmente con biomoléculas. Se sintetizaron AuNPs esféricas de 13 y 40 nm, y "nanoerizos" (AuNS), se modificaron con seroalbúmina bovina (BSA) o proteína A/G, y se caracterizaron por TEM, DLS y espectrofotometría. Para el análisis de color se procesaron los espectros de transmitancia en el rango 340-850 nm y se transformaron al espacio de color CIELab, considerando un iluminante D65 y un observador estándar (2°). A partir del análisis se obtuvieron los parámetros L, a y b para cada solución. En paralelo se analizaron muestras de AuNPs a las cuales se les indujo la agregación mediante incremento de fuerza iónica.

Los análisis de los gráficos a vs b mostraron que las modificaciones con proteína derivan en disminución en el valor de b (eje amarillo-azul), lo que equivale a un corrimiento al azul. En cambio, la formación de agregados, registró disminución tanto de los valores de b como a (eje rojo-verde), indicando un corrimiento tanto al azul como al verde.

El análisis de color demostró ser más robusto que los corrimientos espectrales convencionales, diferenciando exitosamente entre inmovilización de biomoléculas y agregación en AuNPs. Esta técnica puede implementarse como caracterización de rutina en laboratorios con equipamiento básico, requiriendo solo un espectrofotómetro convencional y software de procesamiento de color open-source.

(1) Daniel, M.-C., Astruc, D. Gold Nanoparticles: Assembly, Supramolecular Chemistry, Quantum-Size-Related Properties, and Applications toward Biology, Catalysis, and Nanotechnology.; (2) Jiang, P.; Wang, Y.; Zhao, L.; Ji, C.; Chen, D.; Nie, L. Applications of Gold Nanoparticles in Non-Optical Biosensors. *Nanomaterials* **2018**, *8* (12), 977. https://doi.org/10.3390/nano8120977.; (3) Fagúndez, P.; Botasini, S.; Tosar, J. P.; Méndez, E. Systematic Process Evaluation of the Conjugation of Proteins to Gold Nanoparticles. *Heliyon* **2021**, *7* (6). https://doi.org/10.1016/J.HELIYON.2021.E07392.; (4) Sperling, R. a; Parak, W. J. Surface Modification, Functionalization and Bioconjugation of Colloidal Inorganic Nanoparticles. *Philosophical transactions. Series A, Mathematical, physical, and engineering sciences* **2010**, *368* (1915), 1333–1383. https://doi.org/10.1098/rsta.2009.0273.

Determinación de mercurio total en atún enlatado comercializado en Uruguay por TDA-AAS

Lucía Scagni; Silvio Ronzzoni; Lucía Dellepiane; Eleuterio Umpiérrez

Unidad de Medio Ambiente, Drogas y Doping, Instituto Polo Tecnológico de Pando, Facultad de Química, UdelaR.

luciascagni@fq.edu.uy

INTRODUCCIÓN: El mercurio es un elemento presente en el ambiente de forma natural o por acción antropogénica. Se encuentra en forma elemental, formando sales inorgánicas, o compuestos organometálicos estables al unirse a uno o dos átomos de carbono. La forma inorgánica presente en cuerpos de agua puede ser metilada por microorganismos produciendo metilmercurio. Este ingresa a la cadena trófica acuática donde se biomagnifica, dando como resultado la exposición humana al mismo a través del consumo de pescado. El metilmercurio se absorbe en el tracto gastrointestinal, afectando principalmente el cerebro y a los fetos en desarrollo. Debido al fácil acceso para la población en general al atún enlatado, comercializado en varios formatos y en un amplio rango de precios, es de interés la determinación de la concentración de mercurio total, evaluando además los distintos patrones de consumo de la población.
OBJETIVOS: Determinar la concentración de mercurio total en muestras de atún enlatado, para latas donde el medio líquido es escurrido y otras procesadas de forma entera. Establecer una cantidad y frecuencia de consumo de las muestras analizadas.
METODOLOGÍA: Para este estudio se obtuvieron del mercado latas de atún de distintas marcas y presentaciones que se comercializan en Uruguay. La determinación de mercurio total se realiza mediante el Método EPA 7473, para ello se utilizó un Analizador Directo de Mercurio DMA-80, marca Milestone, utilizando oxígeno de alta pureza. Se utilizó un Material de Referencia Certificado de la Agencia Internacional de Energía Atómica en la matriz tejido de pescado para realizar una curva de calibración y se evaluaron algunas características de desempeño del método. Se determinó mercurio total en atún escurrido (por gravedad) y en un homogeneizado del contenido total de la lata, para aquellos casos en que se tenían latas del mismo lote. Se analizaron 11 marcas comerciales.
RESULTADOS Y DISCUSIONES: No se observó una diferencia importante en las concentraciones de muestras escurridas frente a las homogeneizadas para las envasadas al natural. Los rangos de concentraciones encontrados fueron entre 0.168 y 3.123 mg/kg de escurrido en base seca. Cabe resaltar que si bien existe una especificación en el Reglamento Bromatológico Nacional de que no se puede comercializar pescado enlatado con contenido mayor a 0.5 mg/kg, no se establece ningún tipo de procedimiento ni especificación extra de cómo llevar a cabo el análisis.
CONCLUSIÓN: El método utilizado resultó adecuado para el uso previsto, requiriendo una correcta homogenización de la muestra para el análisis. Dados los resultados obtenidos para las muestras analizadas y considerando la ingesta semanal tolerable, el consumo de latas de atún según la marca, puede variar de entre 1 lata por mes a incluso 5 latas por semana.

Desarrollo de análogos de *S*-adenosilmetionina como inhibidores de la Metiltransferasa NS5 del Virus del Dengue

Natalia Díaz Carpintieri[1]; Danilo Davyt[1]; Gonzalo Hernández[2]; Jaquelline Germano de Oliveira[3]; Eliza Flores De Souza[3]; Etienne Decroly[4]; Priscila Sutto-Ortiz[4]

[1]*Laboratorio de Química Farmacéutica, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[2]*Laboratorio de Resonancia Magnética Nuclear, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad de la República, Montevideo, Uruguay.*

[3]*Grupo de Investigación en Imunología Celular y Molecular, Instituto René Rachou - Fiocruz Minas, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil.*

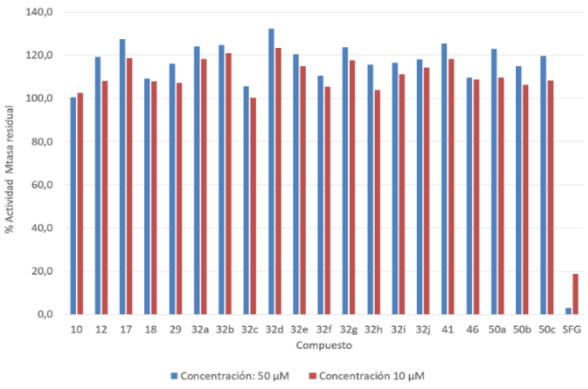
[4]*Laboratorio de Arquitectura y Función de Macromoléculas Biológicas (AFMB) de la CNRS, Aix Marseille Université, Francia.*

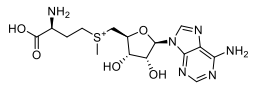
ndiaz@fq.edu.uy

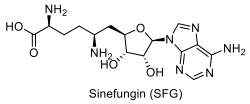
En la búsqueda de un compuesto líder con actividad inhibitoria frente a la metiltransferasa de la subunidad NS5 del virus del Dengue del serotipo 2 (NS5-Mtasa-Den2) [1], nuestro grupo desarrolló y sintetizó un total de 20 análogos similares a la *S*-adenosilmetionina (SAM) y al Sinefungin [2].

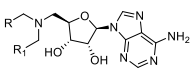
Estos compuestos fueron evaluados en ensayos *in-vitro* frente a la NS5-Mtasa-Den2 y frente al virus del dengue, serotipo 2. Si bien a partir de estos ensayos se concluyó que ninguno de los compuestos presentó actividad inhibitoria frente al blanco de interés, se identificaron varias modificaciones posibles para continuar con el estudio de inhibidores de la NS5-Mtasa-Den2.

Se presentarán las rutas sintéticas generales para la obtención de los compuestos de interés, así como también, los resultados de actividad obtenidos.




S-adenosilmetionina (SAM)


Sinefungin (SFG)


Análogos sintetizados

[1] Lim, S. P.; Noble, C. G.; Shi, P. *Antiviral Res*, **2015**, 119, 57–67. [2] Yan, K.; Dong, H.; Theodore, A.; Shi, P.; Lescar, J.; Pheng, S. *Virology,* **2010**, 402 (1), 52–60.