

Química aplicada para la Amazonia

Química y sostenibilidad

Memorias VI Seminario internacional
de química aplicada para la Amazonia

Florencia - Caquetá Colombia, mayo 10-12, 2017

Organizadores

Programas de Química
Facultad de Ciencias Básicas
Vicerrectoría de investigaciones y posgrados



Universidad de la Amazonia
Vigilada Mineducación



Programa de
Química

Gerardo Antonio Castrillón Artunduaga

Rector Universidad de la Amazonia

Alcides Villamizar Ochoa

Vicerrector Académico

Alberto Fajardo Oliveros

Vicerrector de investigaciones y posgrados

Berta Lucia Galeano Castro

Vicerrector Administrativo

Jaime Enrique Velásquez Restrepo

Decano Facultad de Ciencias Básica

Gloria Magally Paladines Beltran

Coordinadora del Programa de Química

COMITÉ CIENTÍFICO

Luz Stella Nerio Quintana Ph.D

Jhon Ironzi Maldonado Ph.D

Sol Milena Mejía Chica Ph.D

Jaime Velásquez Restrepo Ph.D

Claudia Yolanda Reyes Ph.D

COMITÉ EDITORIAL

Jenny Melo Ospina MsC

Félix Moncada Arias MsC

Elkin Tilvez Marrugo Ph.D

Esta publicación ha sido realizada con la colaboración y apoyo de la Universidad de la Amazonia

Junio de 2017

Primera edición: octubre de 2016

ISBN: 978-958-8770-97-0

Los resúmenes de las ponencias publicados en este libro son responsabilidad exclusiva de los autores.

Se autoriza la reproducción total o parcial de esta obra con fines educativos. Su utilización se puede realizar con carácter académico, siempre que se cite la fuente.

COMITÉ LOGÍSTICO

Brian Alejandro Castro Agudelo

Sergio Eduardo Silva Campos

Kevin Stiven Granados Tavera

Miguel Ricardo Villarreal Parra

Luis Fernnado Gutierrez Torres

Michael A. Zambrano Angulo

Dairo Fabian Melo Montealgre

Viviana Carvajal López

Daniel Angel Pena Bohorquez

Tatiana Bolaños Carvajal

Laura Camila Polania Varon

Leidy Dayhanna Restrepo Ceballos

Cesar Augusto Serrato Hurtado

Universidad de la Amazonia

Campus Porvenir Calle 17 Diagonal 17 con Carrera 3F - Barrio Porvenir, Tel:
(+57) 8-4340591

Contacto: atencionalciudadano@uniamazonia.edu.co

pquimica@uniamazonia.edu.co

fcienciasua@uniamazonia.edu.co

sequiamaz@uniamazonia.edu.co

Contenidos web: webmaster@uniamazonia.edu.co

Florencia, Caquetá, Colombia, Suramérica

Tabla de contenido

Presentación.....	3
Contribuciones Orales	4
Aplicación de la Química Computacional al Estudio de la Enfermedad de Alzheimer ..	5
Química organometálica y su aplicación en catálisis homogénea y síntesis orgánica.....	7
Estudio computacional de sistemas estabilizados por puentes de hidrógeno y clusters.	9
Perspectivas en la aplicación de compuestos fitoquímicos para el control de enfermedades transmitidas por vectores en el piedemonte amazónico.....	11
Semillero-club de química verde y energías renovables para la sustentabilidad ambiental: una apuesta por la formación de profesores de química	13
Influencia del pH en la degradación de un antibiótico de tipo fluoroquinolona mediante tres procesos fotoquímicos de oxidación avanzada.....	14
Principales cortapisas de la legislación fiscal colombiana frente al desarrollo de las energías alternativas en el país	16
El Impuesto nacional al consumo de bolsas plásticas, un tributo que beneficiará el medio ambiente y a los comerciantes florencianos	19
Degradación por foto-Fenton heterogéneo de una mezcla de tres compuestos orgánicos con extruidos de Fe-Arcilla y Mn-Arcilla.....	21
Divulgación científica para crear aptitudes positivas hacia las ciencias experimentales y sociales, caso Astrobiología.....	23
Producción de H ₂ y nanotubos de carbono a partir de catalizadores con estructura laminar.....	26
Adsorción de productos farmacéuticos y de cuidado personal (PPCPs) en suelos agrícolas.....	28
Intemperismo de Petróleo: mecanismos de resiliencia en sistemas acuáticos marinos..	30
Nuevo método HILIC-ESI-MS/MS para el análisis simultáneo de metabolitos primarios nitrogenados.	32
Caracterización bioquímica y evaluación del potencial antimicrobiano del veneno de serpiente <i>Lachesis muta</i> del departamento del Caquetá	34
Evaluación de Métodos de Derivatización de Fosfolípidos presentes en <i>Mycobacterium tuberculosis</i> empleando GC-MS.....	36
Análisis Lipidómico Comparativo en Cepas de <i>Mycobacterium tuberculosis</i> Susceptible y Resistente a Rifampicina por HPLC-HRMS.....	37
Desarrollo de nuevas matrices de transferencia electrónica para su uso en espectrometría de Masas MALDI.....	39

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

Efecto de la zona de cultivo del copoazú (<i>Theobroma grandiflorum</i>), frente a dos especies reactivas del oxígeno.....	40
Distribución espacial y temporal del mercurio en sus fracciones biodisponibles producto de la actividad minera en la cuenca media alta del río Caquetá	42
Contribuciones en la Modalidad Póster	44
Estudio computacional del espectro UV-vis de derivados del ácido acrílico para su posible aplicación en MALDI.	45
Desarrollo de sensores potenciométricos basados en pasta de carbono dopada con la 4'-(4-bromofenil)-2,2':6',2"-terpiridina (TPYBr) y su potencial uso en detección de mercurio en aguas.....	46
Análisis de los efectos electrónicos en las energías de transición en derivados de diestirilbenceno.	48
Análisis de la relación estructura actividad (QSAR) de compuestos derivados de amida potencialmente activos frente a la enfermedad de Chagas.....	50
Cálculo de la afinidad protónica de moléculas conjugadas para su uso como matrices en MALDI.....	51
Nuevos aportes a la reactividad de aminas en disolventes polihalogenados.....	52
Oxidación de rojo Congo con catalizadores de TiO ₂ inmovilizado sobre un mineral arcilloso natural.....	54
Clasificación de muestras de café por medio de espectroscopía UV-Vis.....	56
Determinación de dopamina usando electrodos serigrafados de carbono modificados con complejos de cobalto.....	58
Determinación de resistencia o susceptibilidad a insecticidas en el mosquito <i>Aedes aegypti</i> en Florencia-Caquetá.....	60
Degradación de la Fluoxetina vía Foto Fenton solar.....	62
Diseño de pilares de Al y AlFe a partir del ión <i>Keggin</i> , para catalizadores heterogéneos con estructura laminar.....	64
Estudio teórico del mecanismo de la reacción Diels-Alder de euparin y ésteres acetilénicos activados.....	66
Caracterización Fitoquímica Del Extracto Hidroalcohólico Del Fruto De <i>Bromelia pinguin</i> Y Evaluación De Su Actividad Antifúngica Frente A un Hongo Aislado del Fruto de Cacao (<i>Theobroma cacao L.</i>) en Estado de Pudrición.....	68
Estudio de la Reactividad de las Moléculas <i>Casearvestrin</i> (A, B, C) Mediante la Función Fukui.....	70

Presentación

El VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia (VI SEQUIAMAZ) y la primera Escuela Andino Amazónica de Química (I EAAQ) fueron dos eventos que se realizaron en las instalaciones de la Universidad de la Amazonia del 8 al 12 del mes de mayo del año 2017 en la ciudad de Florencia Caquetá.

El principal objetivo del VI SEQUIAMAZ y EAAQ fue crear nuevas expectativas en los estudiantes, profesionales y demás profesionales afines a las Ciencias Químicas, a través de un conjunto de conferencias de los investigadores locales, nacionales e internacionales, quienes aportaron información de sus avances científicos, que permitieron una apropiación social del conocimiento y su posterior transferencia a la sociedad. Además, se intentó crear una cultura de investigación entre estudiantes e investigadores, generando un espacio de reflexión y debate, para la inserción de la Investigación, desarrollo e innovación como alternativas a la hora de la resolución de problemas propios de sector social y productivo.

El comité Organizador del VI SEQUIAMAZ planificó en su programa científico, uno ejes temáticos para cubrir los diferentes temas de actualidad científica que componen el área de las ciencias Químicas, siendo sus conferencistas invitados de renombre internacional. También, se brindó a los participantes 6 cursos enmarcados en I EAAQ: Cálculo y análisis de orbitales de Dyson, materiales y métodos para la determinación de contaminantes ambientales, desarrollo de fármacos para enfermedades desatendidas, temas selectos en química de coordinación, reactividad Química: un enfoque desde la química computacional, y teoría cuántica de átomos en moléculas y su aplicación en la caracterización de interacciones débiles. El VI SEQUIAMAZ contó con la presencia de 173 participantes promoviendo la presentación de 23 trabajos de investigación en la modalidad ponencia oral y 15 en la modalidad de póster, los cuales se enmarcaron en diez áreas temáticas.

El Comité Organizador agradece a todos por su participación activa en los días que se llevaron a cabo los eventos organizados desde la Facultad de Ciencia Básicas y el Programa de Química permitiendo la periodicidad y la calidad que los caracterizan

Comité Organizador



Contribuciones Orales

UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA

Aplicación de la Química Computacional al Estudio de la Enfermedad de Alzheimer

Jorge Alí-Torres

Universidad Nacional de Colombia, Departamento de Química, Bogotá- Colombia, Código postal 111321

Email: jjalit@unal.edu.co

Resumen

La enfermedad de Alzheimer es una devastadora condición neurológica que afecta un número cada vez mayor de personas, debido al incremento general en la esperanza de vida. Se ha demostrado que los cationes metálicos, tales como Cu^{2+} , inducen la agregación de péptidos amiloides y favorecen la formación de especies reactivas de oxígeno. En este sentido, la elucidación estructural de los complejos Cu^{2+} -A β es esencial para entender su papel en la agregación del péptido A β , en la formación de especies reactivas de oxígeno y para el diseño racional de nuevos agentes quelantes con potenciales aplicaciones terapéuticas. En la presente contribución revisaremos como se aplica la química computacional en esta área de investigación. En primer lugar, presentaremos las estrategias computacionales para determinar las estructuras tridimensionales de los complejos Cu^{2+} -A β y sus propiedades redox, revisando los retos metodológicos [1,2]. En segundo lugar, mostraremos nuestros estudios computacionales en el papel y mecanismo de los complejos de Cu^{2+} -A β en la formación de peróxido de hidrógeno y sus implicaciones bioquímicas [3,4]. Por último, mostraremos nuestros recientes avances en el diseño *in silico* de agentes quelantes de Cu^{2+} [5] y en marcadores para identificar la formación de placas amiloides y los resultados experimentales obtenidos en modelos celulares y en tejidos. [6]

Palabras clave: Enfermedad de Alzheimer; cobre; agentes quelantes; biomarcadores.

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

Referencias

- [1] Ali-Torres, J.; Marechal, J.-D.; Rodriguez-Santiago, L. and Sodupe, M. J. *Am. Chem. Soc.* 2011, 133 (38), 15008-15014.
- [2] Ali-Torres, J.; Mirats, A.; Marechal, J.-D.; Rodriguez-Santiago, L. and Sodupe, M. J. *Phys. Chem.B.* 2014, 118 (18), 4840-4850.
- [3] Mirats, A.; Ali-Torres, J.; Rodriguez-Santiago, L. Sodupe, M; and La Penna, G. *Phys. Chem. Chem. Phys.* 2015, 17 (41), 27270-27274.
- [4] Ali-Torres, J.; Mirats, A.; Rodriguez-Santiago, L. and Sodupe, M. *Theor. Chem. Acc.* 2016, 135 (5), 1-9.
- [5] Rimola, A.; Ali-Torres, J.; Rodriguez-Rodriguez, C.; Poater, J.; Matito, E.; Sola, M. and Sodupe, M. J. *Phys. Chem. A.* 2011, 115 (45), 12659-12666.
- [6] Rodriguez-Rodriguez, C.; Telpoukhovskaia, M.; Alí-Torres, J.; Rodríguez-Santiago, L.; Manso, Y.; Bailey, G-A.; Hidalgo, J.; Sodupe M.; and Chris Orvig. *Metallomics*, 2015, 7 (1), 78-87.



**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

Química organometálica y su aplicación en catálisis homogénea y síntesis orgánica

Areli Flores Gaspar

Universidad Militar Nueva Granada, Departamento de Química, Bogotá- Colombia, Código postal 250247

Email: areli.flores@unimilitar.edu.co

Resumen

La química organometálica y su aplicación en catálisis homogénea representa actualmente una de las grandes áreas de la química para el desarrollo de nuevas metodologías a nivel científico, tecnológico e industrial. El uso de catalizadores organometálicos en diferentes procesos químicos ha representado un gran avance en la obtención de fármacos, fibras sintéticas resinas, pigmentos, etc. [1] Un ejemplo de ello es la presente contribución donde se describe una ruta sintética mediada por catalizadores organometálicos de paladio para la obtención de compuestos benzociclobutenonas (BCB) los cuales son compuestos que han mostrado ampliamente su versatilidad sintética para la preparación de un sin fin de compuestos de elevado valor añadido. [2] El protocolo diseñado, empleó la funcionalización catalítica de enlaces C-H posibilitando una reacción de acilación intramolecular. Adicionalmente, se encontró que es posible obtener selectivamente derivados de estireno en condiciones diastereoselectivas empleando el mismo sustrato de partida, pero implicando un cambio de mecanismo de reacción por la influencia del ligando coordinado al centro metálico que forma el catalizador de paladio. [3]

Palabras clave: Catalizador; benzociclobutenonas; estirenos; organometálicos

Referencias

- [1] Behr, A.; Neubert, P. "Applied Homogeneous Catalysis"; Wiley-VCH: Weinheim, 2012.
- [2] Flores-Gaspar, A.; Martin, R. *Synthesis*, 2013, 45, 563.
- [3] Álvarez-Bercedo, P; Flores-Gaspar, A.; Correa, A.; Martin, R. *J. Am. Chem. Soc.*, 2010, 132, 466. Flores-Gaspar A.; Martin, R. *Adv. Synth. Catal.* 2011, 353, 1223. Flores-Gaspar,

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florescia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

A.; Gutierrez Bonet, A.; Martin, R. *Org. Lett.*, 2012, 14, 5234. Flores-Gaspar, A.; Martin, R. *Org. Synth.*, 2012, 89, 159.



**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

Estudio computacional de sistemas estabilizados por puentes de hidrógeno y clusters

Sol Milena Mejía Chica

Pontificia Universidad Javeriana, Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Grupo de Investigación Fitoquímica Universidad Javeriana (GIFUJ), Línea de Química Computacional, Carrera 7 No. 40-62, Bogotá, D. C., Colombia

Email: sol.mejia@javeriana.edu.co

Resumen

La presente charla tiene su enfoque en los resultados principales obtenidos en el estudio computacional de diversos agregados estabilizados por puentes de hidrógeno tales como: etanol-agua (metanol-agua), carbonato de dietilo-agua y de cluster metálicos de Au y bimetálicos de AuPd y AuPt además de clusters de TiO₂. En la Figura 1 se muestran algunos ejemplos de dichos agregados. Por lo tanto se contará con una breve información en cada caso en cuanto a la motivación para realizar dichas investigaciones, como por ejemplo la motivación energética y disminución de la contaminación ambiental para el caso de los sistemas de etanol-agua y carbonato de dietilo como bio-combustibles que pueden ser empleados como tal o como aditivos oxigenados en mezclas con gasolina. En el caso de los clusters metálicos estos han tomado relevancia como sistemas catalíticos cuando están a escala nano.

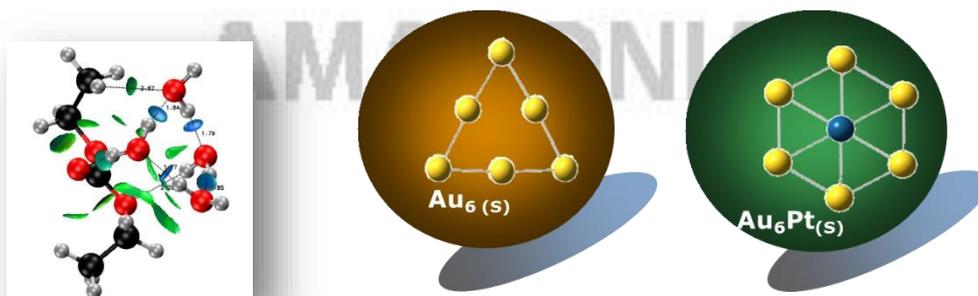


Figura 1. Geometrías optimizadas de: Dietil Carbonato – 4H₂O, Au₆ (singlete), Au₆Pt (Singlete)

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

Se mostrarán entonces los métodos de estructura electrónica empleados para modelar los sistemas descritos anteriormente. En su gran mayoría han sido funcionales de la DFT y algunas aproximaciones como DFTB y métodos estocásticos como el “annealing” simulado. También se hará un énfasis especial en resultados de caracterización de los sistemas con la teoría cuántica de átomos en moléculas y cómo en una de las investigaciones se realizó la implementación de la dicha teoría haciendo uso de Unidades de Procesamiento Gráfico (GPUs). Adicionalmente se relatará algo de las experiencias personales durante el tiempo del pregrado en la Universidad de Antioquia, las pasantías doctorales de investigación en la Universidad de Chile (Chile) y en la Universidad de Manchester (Inglaterra) así como las investigaciones postdoctorales en la Universidad de Adelaida (Australia), la Universidad de Nagoya (Japón) y la Universidad Autónoma metropolitana (México) en aras de motivar a las nuevas generaciones a involucrarse o continuar por el camino de la investigación científica, mostrando como un persona que viene de una familia de bajos recursos ha podido tener diferentes experiencias en el exterior por medio de un buen desempeño académico y dedicación en el campo profesional. Finalmente se mostrarán características de la Pontificia Universidad Javeriana y sus programas de Pregrado y Postgrado para empezar a generar lazos interinstitucionales así como de nuestro grupo de investigación GIFUJ, especialmente de la línea de química computacional.

Palabras clave: cluster metálicos; DFT; computacional; AuPd; AuPt

Referencias

Perspectivas en la aplicación de compuestos fitoquímicos para el control de enfermedades transmitidas por vectores en el piedemonte amazónico

Clemencia Serrato Hurtado, Elkin Tilvez Marrugo

Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básica, Programa de Biología /Programa de Química, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

Email: c.serrato@udla.edu.co

Resumen

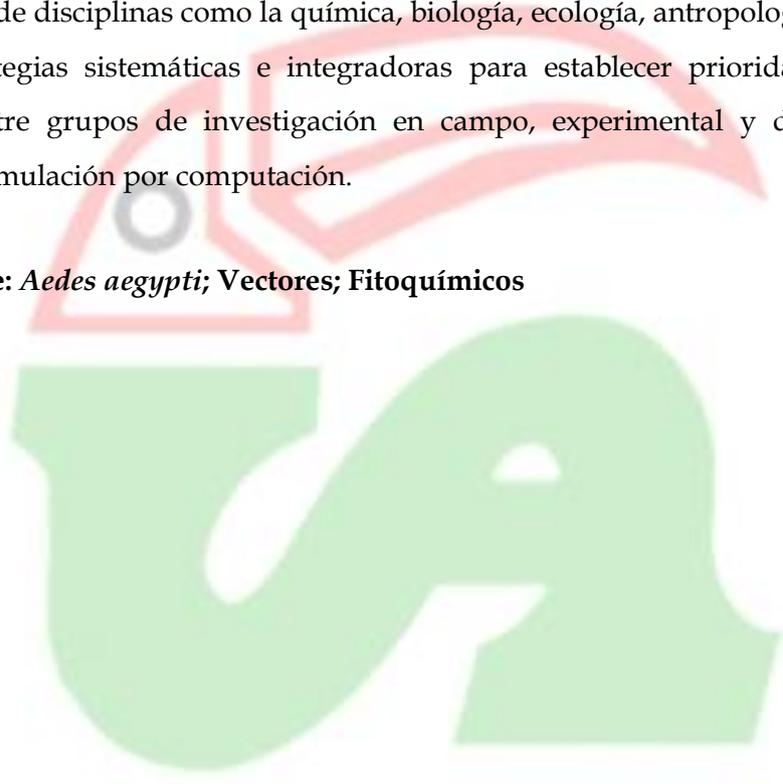
Las enfermedades transmitidas por vectores como los mosquitos, garrapatas y moscas entre otros, se constituyen en una de las afecciones con mayor incidencia en el piedemonte amazónico; los esfuerzos por regular las poblaciones de los invertebrados a través de productos químicos no ha sido suficiente para evitar su propagación y perjuicios en la salud de humanos y animales; los índices de infestación han sido muy altos debido a las condiciones climáticas, al uso indiscriminado de productos insecticidas y como mecanismo para su defensa, las plantas han desarrollado la capacidad de producir metabolitos secundarios; esta estrategia ha sido la base para encontrar en ellas la fuente de pesticidas más seguros para el medio ambiente y la salud humana. La búsqueda de especies vegetales y las fracciones necesarias con potencial actividad biológica, requieren estudios fitoquímicos, quimiotaxonómicos y de bioactividad y lograr la estandarización, adecuación y formulación de extractos. En los estudios que se proyecten realizar, basados en los compuestos activos de plantas deben de considerarse no solo los folíolos como frecuentemente se han utilizado, sino incluir otras estructuras de las plantas como semillas, raíces, micorrizas, corteza, etc. Las cuales pueden contener compuestos activos con características importantes como biolarvicidas o repelentes. Adicionalmente, es necesario muestrear durante los periodos seco y lluvioso que se presentan en la región, para obtener flores y frutos y verificar sus propiedades insecticidas. La exploración de posibilidades debe estar enfatizada en las especies amazónicas y con ello vincular en la investigación participativa a las comunidades indígenas, las cuales poseen un conocimiento ancestral y han aprovechamiento de productos y subproductos de fuentes naturales en especial, especies endémicas para

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

contrarestrar enfermedades transmitidas por vectores; dentro de las prioridades a considerar en estudios de su control con fitoquímicos, incluye la evaluación de extractos y aceites esenciales, no solo para detectar la eficiencia en el control del vector o parásito, sino verificar la inocuidad con el entorno en el que se aplicaría, además verificar el efecto sinérgico de los extractos (efectos combinados con la administración).

La regulación de poblaciones de artrópodos con importancia médica, requiere la convergencia de disciplinas como la química, biología, ecología, antropología, etc., para generar estrategias sistemáticas e integradoras para establecer prioridades, trabajo articulado entre grupos de investigación en campo, experimental y desarrollo de modelos de simulación por computación.

Palabras clave: *Aedes aegypti*; Vectores; Fitoquímicos



**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

Semillero-club de química verde y energías renovables para la sustentabilidad ambiental: una apuesta por la formación de profesores de química

Franco, Ricardo Andrés

Universidad Pedagógica Nacional, Departamento de Química. Bogotá, Colombia.

Email: rfranco@pedagogica.edu.co

Resumen

En esta ponencia se comunican los avances del proyecto: "Semillero-club de investigación sobre educación en química verde y energías alternativas para la sustentabilidad ambiental - EduQVersa, que consiste en un espacio extracurricular estructurado en una red conformada por nodos de microproyectos, que permiten articular la dinámica del semillero-club y los procesos formativos propios del currículo para la formación de licenciados en química de la Universidad Pedagógica Nacional, en el marco de la reflexión, la crítica y la acción frente a la temática central, a partir del reconocimiento de situaciones y problemáticas socioambientales a trabajar en el contexto del enfoque de química verde y energías alternativas, relevantes para la formación inicial de profesores de ciencias, y abordarlas en el contexto de la sustentabilidad ambiental.

En tal sentido, además de presentar los antecedentes y fundamentos conceptuales y metodológicos del proyecto en mención, se reportan los avances del desarrollo de actividades de formación investigativa orientadas tanto a profesores en formación inicial y continua del semillero EduQVersa, como de diferentes programas de la Facultad de Ciencia y Tecnología, las cuales se centran en: formulación y desarrollo de iniciativas de -investigación, individuales y colectivas a manera de microproyectos por parte de los integrantes del semillero; producción de documentos académicos derivados de dichas iniciativas; socialización y divulgación de las iniciativas en escenarios como espacios académicos, eventos y revistas especializadas, desarrollo de Trabajos Prácticos de Laboratorio - TPL, entre otros.

Palabras clave: semillero-club de investigación; química verde; sustentabilidad ambiental; energías

Influencia del pH en la degradación de un antibiótico de tipo fluoroquinolona mediante tres procesos fotoquímicos de oxidación avanzada

Lis Manrique Losada^a, Jairo Fernando Gómez^a, Dany Santiago Monje^a, , Paola Villegas^b

^a Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Grupo de Investigación Materiales, Ambiente y Desarrollo MADE,, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

^b Universidad de Antioquia, Grupo de Investigación en Remediación Ambiental y Biocatálisis GIRAB,, Medellín Colombia.

Email: lismanrique@gmail.com

Resumen

Los antibióticos tipo quinolonas son contaminantes emergentes que se ha encontrado en cuerpos de agua. Son medicamentos de amplio espectro sintetizados en su mayoría contra infecciones localizadas producidas por bacterias aerobias Gram-positivas y Gram-negativas. La presencia de estos antibióticos en ambientes naturales ocasiona la aparición de cepas bacterianas resistentes, promoviendo el desarrollo de antibióticos más potentes en el transcurso de los tiempos. En consecuencia, la presencia de antibióticos en las aguas residuales que, aunque son reportados en términos de $\text{ng}\cdot\text{L}^{-1}$, están causando un preocupante problema de salud ambiental. Particularmente, la norfloxacin (NOR) es un antibiótico que, aunque pertenece a la segunda generación de las quinolonas, su uso en la actualidad aun es presenciado y se ha detectado en cuerpos de agua.

En este trabajo de investigación se estudió la influencia del pH en la degradación de la NOR cuando se utilizan los procesos de oxidación avanzada: fotocatalisis con TiO_2 (UV/ TiO_2), UV/ H_2O_2 y foto electro Fenton (FEF). En todos los casos la fuente de iluminación fue una lámpara de 8 W que emite luz a una longitud de onda de 364 nm. El seguimiento de la degradación se hizo por HPLC.

Se encontró que tanto las velocidades iniciales de degradación, como las transformaciones estructurales de la molécula, se ven influenciados cuando se cambia el

pH del sistema de reacción con UV/TiO₂. Contrario al sistema de reacción con UV/H₂O₂ donde el pH de la solución no tiene un efecto significativo. Adicionalmente se evaluó la actividad antibiótica, toxicidad de la solución tratada y las rutas de degradación de cada proceso. En donde se evidenció un aporte mayoritario a la degradación de la NOR por hueco oxidativo en todos los valores de pH para el caso de UV/TiO₂. Para el sistema de degradación con UV/H₂O₂, aunque la vía oxidativa principal son los radicales hidroxilos a pH 7.5 y 10 se evidencia un aporte significativo de fotólisis directa.

Adicionalmente la extensión de trabajo confirma una eliminación completa de la actividad antibiótica de la NOR a medida que se degrada la molécula por UV/TiO₂, UV/H₂O₂. Sin embargo, la fotocatalisis con TiO₂ no disminuye la toxicidad de solución tratada.

En cuanto a la respuesta de la degradación con el proceso FEF, se encontró que no hay diferencias importantes entre los porcentajes de degradación alcanzados a pH 3, 5, natural y 9. Teniendo en cuenta que en todos los experimentos el pH cae desde los primeros minutos a un valor de 3, se puede afirmar que el alcance del 100% de la degradación a los 80 min de iluminación es generado por el proceso foto Fenton. A pH natural se observa un pequeño descenso en la velocidad de degradación, lo que se puede atribuir a que en ese pH la NOR presenta un efecto buffer pues está en equilibrio, por tal razón su degradación se ve reducida en los primeros minutos de exposición, sin embargo, el pH cae igualmente cerca de 3 para llevar a cabo foto Fenton.

Palabras clave: pH; Norfloxacin; Fotocatalisis con TiO₂; Foto electro Fenton; Degradación fotoquímica.

Principales cortapisas de la legislación fiscal colombiana frente al desarrollo de las energías alternativas en el país

Anayibe Ome Barahona, John Jairo Restrepo Lizcano, Evelia Sabí Ramirez

Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Contables, Económicas y Administrativas, Maestría en Tributación, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

Email: a.ome@udla.edu.co

Resumen

Ante el agravante del cambio climático, anualmente, y desde 1995, el sistema de las Naciones Unidas viene celebrando la Conferencia de las Partes en la Convención, también denominada Conferencia de las Partes, más conocida como COP, un mecanismo de este Organismo supranacional para hacer frente a dicho fenómeno mundial.

En 2016, del 7 al 18 de noviembre, en Marrakech, se celebró COP 22, en continuación de COP 21, celebrado del 30 de noviembre al 11 de diciembre de 2015, en París. En COP 21, ante la amenaza eminente de los efectos del cambio climático, y buscando alcanzar un equilibrio entre las emisiones antropogénicas en la fuente y la absorción de las mismas por sumideros, en un lapso no mayor a treinta años (en 2050), se acordó no incluir niveles de reducción vinculantes para alcanzar un punto máximo de emisiones de GEI; a cambio, y en cumplimiento de los criterios de integridad ambiental, transparencia, exactitud, exhaustividad, comparabilidad y coherencia, se tomó la decisión de animar a que las Partes unilateralmente adopten medidas internas de mitigación de emisiones, y, sin excepción alguna, rindan cuentas sobre las contribuciones nacionales por absorción de las emisiones antropogénicas y de la cantidad originada de las mismas.

En consonancia con lo antecedido, y tendiente a cumplir con el compromiso de reducción de emisiones de GEI, Colombia presentó una gama de opciones de mitigación para hacerlas efectivas en el orden regional y en los renglones más importantes de la economía nacional, como lo es la agricultura y la silvicultura; la actividad industrial (responsable en la generación de toneladas de desechos); el sector energético, de transporte y de vivienda. Dentro del abanico de opciones figura el portafolio de energías

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florenia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

renovables, que concuerda con la Estrategia Colombiana de Desarrollo Bajo en Carbono (EDBC), consignada en CONPES 3700 de 2011, un documento del Consejo Nacional de Política Económica y Social y del Departamento Nacional de Planeación, relativo a la Estrategia institucional para la articulación de políticas y acciones en materia de cambio climático en Colombia, que sirvió de motivación al legislador colombiano expedir la Ley 1715 de 2014, cuyo objetivo es “promover el desarrollo y la utilización de las fuentes no convencionales de energía, principalmente aquellas de carácter renovable, (...)” (Art. 1). Este cuerpo legislativo declaró la producción de energías renovables (de fuentes no convencionales), de interés social y de utilidad pública (Art. 4). Asimismo, insta a todos los agentes públicos y privados a participar del desarrollo y aprovechamiento de las fuentes de carácter renovable, no sólo en función de contribuir al medio ambiente, sino ante la búsqueda de una gestión más eficiente en la prestación del servicio de energía y de las actividades complementarias (Art. 3).

La generación de energía a partir de fuentes renovables ya cuenta con su propio marco normativo; sin embargo, resultó un instrumento jurídico insuficiente, fue necesario emplear el sistema fiscal para impulsar su desarrollo. En atención a esta necesidad, la Ley 1819 de 2016, que adoptó una reforma tributaria estructural, declaró como rentas exentas, a partir del 1 de enero de 2018, la venta de energía eléctrica generada a partir de fuente eólica, biomasa o residuos agrícolas, solar, geotérmica o de los mares. Como el propósito es contribuir con la reducción de emisiones de gases contaminantes a la atmósfera, la citada Ley 1819 creó - además - el Impuesto Nacional al Carbono y el Impuesto nacional al consumo de bolsas plásticas; dos impuestos ambientales que a largo plazo coadyuvarán a mitigar el impacto del cambio climático.

En esas condiciones, los agentes privados (personas naturales y jurídicas) son los principales llamados a invertir en la generación de energía a base de fuentes no convencionales, y el incentivo tributario aludido es un aliciente para hacerlo; no obstante, la Ley 1819 de 2016, limita este beneficio a las empresas generadoras de energía; en otras palabras, no lo hace extensivo a las personas naturales. Al tiempo que lo condiciona al cumplimiento de dos requisitos específicos: i) las empresas en mención, deben tramitar, obtener y vender certificados de emisión de bióxido de carbono; y, ii) demanda que al menos el 50% de los recursos percibidos por la venta de esos certificados sean invertidos en obras de beneficio social en la región donde opera el generador (Art. 99, *Ídem*).

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

No obstante a lo anterior, el legislador colombiano, pensando en el sistema de tutela ambiental, también mediante la Ley 1819 de 2016 (Art. 140), amplió el ámbito de ejercicio de las Entidades Sin Ánimo de Lucro-ESAL (reconocidas en el Art. 19 del Estatuto Tributario) al desarrollo de actividades de protección del medio ambiente, más exactamente, al uso y aprovechamiento de los recursos naturales renovables, utilizados en la generación de energías alternativas; que entró a denominarse actividad meritoria. Un punto a favor de las renovables; y aunque las ESALs son figuras antiguas en el ordenamiento jurídico colombiano, a partir de la entrada en vigor de la mencionada Ley 1819, para constituir nuevas entidades de este tipo, se deberá gestionar – previamente - ante la DIAN su admisión al Régimen Tributario Especial, caracterizado por contemplar una tarifa reducida en el Impuesto sobre la renta y complementarios. Sin embargo, obtener el reconocimiento de una ESAL bajo el objeto social de protección ambiental, no es trabajo sencillo por las mismas exigencias que consagra la legislación.

Lo que nos lleva a concluir que la legislación fiscal colombiana no promueve del todo la producción de energías alternativas en el país y menos en la Amazonia colombiana, siempre que todavía impera el interés económico antes que la salvaguarda del medio ambiente.

Palabras clave: Gases de efecto invernadero-GEI; Cambio climático; Conferencia de las Partes; Energías renovables; Incentivo tributario; Régimen Tributario Especial.

**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

El Impuesto nacional al consumo de bolsas plásticas, un tributo que beneficiará el medio ambiente y a los comerciantes florencianos

Evelia Sabí Ramirez, Anayibe Ome Barahona, John Jairo Restrepo Lizcano.

*Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Contables, Económicas y Administrativas, Maestría en
Tributación, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007*

Email: e.saby@udla.edu.co

Resumen

La última reforma nacional al consumo de bolsas plásticas (Artículo 207); un tributo que busca desincentivar el uso de las mismas, gracias al segundo beneficio del instituto jurídico del impuesto: la función extra-fiscal, que se aparta de la finalidad meramente recaudatoria. El legislador colombiano quiso seguir el ejemplo de la mayoría de países europeos que han optado por controlar la contaminación por la vía de los impuestos verdes. Estas figuras complementarán la regulación directa de comando y control que decretan sanciones y prohibiciones, ayudando gradualmente a disminuir el uso máximo de bolsas plásticas; y con ello, a mitigar la contaminación ambiental.

El Congreso decidió introducir esta figura extra-fiscal con fines ambientales al ordenamiento tributario, dado que en promedio un colombiano usa seis bolsas plásticas a la semana; cuando bien es sabido, se trata de un producto de alto índice de contaminación ambiental y que ha contribuido al calentamiento global. Las bolsas plásticas son útiles en las labores cotidianas; sin embargo, vienen afectado principalmente el suelo y los cauces de los afluentes, produciendo estancamiento del agua y muerte de las especies acuáticas. Florencia no ha sido ajena a la causa generada por la contaminación de estos residuos, en varias ocasiones ha sufrido inundaciones debido a los desechos plásticos depositados en los cauces de ríos y quebradas.

La anunciación de este Impuesto en un proyecto de ley tributaria, motivó a realizar un “Estudio de viabilidad para la creación de un gravamen en el uso de bolsas plásticas para establecimientos comerciales en el Municipio de Florencia”, bajo el método exploratorio con un enfoque cuantitativo y descriptivo para evaluar el impacto producido por la utilización masiva e inadecuada de las bolsas plásticas. El estudio demostró que los sitios con mayor número de entrega de bolsas plásticas a los clientes, son los supermercados, con un 48,7%, seguido de las tiendas de barrio, con un 24,3%, y un 20,6% en las plazas de mercados. Esto indica que los supermercados es el lugar donde se debe ejercer más control sobre la entrega de bolsas plásticas.

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

El estudio en alusión, permitió conocer que en adelante no sólo resulta beneficiado el medio ambiente, también los comerciantes florencianos, a raíz de la no obligatoriedad de obsequiar bolsas plásticas a sus clientes. El comprador que decida usar una bolsa para cargar los artículos adquiridos, tendrá que pagar \$20 por ella a partir del 1 de julio y durante todo el 2017 (en 2018: \$30, en 2019: \$40, en 2020: \$50); pues, en términos de la Ley 1819 de 2016, el sujeto pasivo del Impuesto nacional al consumo de bolsas plásticas es toda persona que opte por recibir bolsas plásticas (incluyendo en domicilios), con el fin de llevar o cargar los productos adquiridos en los establecimientos de comercio (Art. 207).

Pese a que el Impuesto recae directamente sobre el consumidor de bolsas plásticas, existe disposición por parte de la ciudadanía para reemplazarlas por biodegradables o compostables, con un 74% de respuestas afirmativas; esto significa que se pueden realizar programas de reemplazo o sustitución. Existe la posibilidad de fabricar en la región, bolsas compostables a base de residuos orgánicos de productos agrícolas nativos; como el plátano. La puesta en marcha de otras alternativas de fabricación, diezmaría el impacto económico negativo de las empresas productoras de bolsas plásticas, una actividad económica que ha tomado fuerza en los últimos dos décadas en todo el país.

El impuesto aludido, permitirá a los comerciantes obtener una mayor rentabilidad financiera, siempre que sus gastos operacionales disminuirán, permitiéndoles un mayor flujo de efectivo en la actividad que ejercen. Este efecto se traslada al valor neto del Impuesto sobre la Renta y Complementarios, toda vez que habrá lugar a liquidar un mayor impuesto, en favor del erario público estatal. El estudio realizado muestra cifras alarmantes. Se pudo constatar que 100 unidades de bolsas tienen un costo promedio de \$6.000, y 31 establecimientos de comercio (tiendas de barrio, panaderías y minimercados) entregaron a sus clientes hasta 300 bolsas semanales en 2015. Mientras que supermercados, salsamentarías y droguerías llegaron a obsequiar a sus clientes más de 4.400 bolsas en una semana.

El legislador previendo una posible evasión a nivel del Impuesto nacional al consumo de bolsas plásticas, consideró conveniente que el impuesto se cause en el instante en que se entrega la bolsa al consumidor. En consecuencia, los responsables del mismo (personas naturales o jurídicas inscritos en el régimen común del IVA), deberán reflejar su valor en la factura o en el documento equivalente a la misma; en el que, se deberá constar expresamente el número de bolsas y el valor del impuesto originado. De lo contrario, los comerciantes podrían cobrar el impuesto pero quedarse con el recaudo, y con ello, entorpecer los programas de mejora y de preservación del medio ambiente.

Palabras clave: Bolsas plásticas; contaminación; impuesto extra-fiscal; medio ambiente; comerciantes.

Degradación por foto-Fenton heterogéneo de una mezcla de tres compuestos orgánicos con extruidos de Fe-Arcilla y Mn-Arcilla

Érika Jasbleidy Laguna Castillo, Lis Manrique Losada*

Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Grupo de Investigación Materiales, Ambiente y Desarrollo (MADE) Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

*Email: lismanrique@gmail.com

Resumen

En esta investigación se evaluó un material arcilloso del Caquetá y su potencialidad hacia la formación de extruidos activos en la reacción de foto-Fenton heterogéneo con luz solar simulada. La arcilla utilizada fue recolectada en el municipio de “El Doncello” Caquetá - Colombia, y pertenece al grupo de las bentonitas. La impregnación de los metales en el mineral se realizó utilizando tres métodos, impregnación húmeda (IH), impregnación incipiente (II) y autocombustión (AC). Los extruidos que presentaron actividad catalítica fueron caracterizados por espectroscopia Raman, difracción de rayos x (DRX) y microscopía electrónica de barrido (SEM) con detector de energía dispersiva (EDS). Para identificar el extruido con mayor actividad catalítica se desarrolló un diseño experimental, con tres factores experimentales: el método de preparación del material, la concentración del metal soportado y el elemento a soportar (hierro y manganeso); se hizo seguimiento a la DQO y la decoloración del naranja de metilo (NM); para la batería de experimentos el reactor operó con 40 mL de NM a 40 mg.L⁻¹, y pH 3, y un anillo del material. En el ANOVA multifactorial para porcentaje de decoloración se analizaron los tres factores experimentales (metal soportado, método de preparación y [metal soportado]) para un total de 24 experimentos, puesto que el valor-P es menor que 0,05 para “el método de preparación”, ese fue el factor que tuvo un efecto estadísticamente significativo sobre el porcentaje de decoloración del NM, con un 95,0% de nivel de confianza. La mayor variación en la decoloración y la DQO se obtuvo cuando el método de preparación fue la autocombustión con Fe; los materiales desarrollados por los otros métodos (II, IH) presentan mayor resistencia mecánica, eran más compactos pero tenían

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

menor actividad catalítica; los materiales productos de la autocombustión quedaron porosos, lo que se debe al escape del gas a altas temperaturas producto del proceso de autocombustión con la glicina, por lo que la capacidad de adsorción de este material fue mayor, lo que dificultó su aglomeración en forma de anillo.

La composición apropiada de la mezcla para la manufactura de extruidos del método de autocombustión corresponde a 1:2 material de AC-arcilla. Este material se utilizó para efectuar oxidación avanzada por foto-Fenton heterogéneo y degradar la mezcla de tres colorantes el NM, rojo congo (RC) y el negro eriocromo T (NET). El porcentaje de mineralización en términos de COT para los extruidos en 1 hora de reacción oscila entre 10 % y 30 %.

En general, el extruido de AC conservó la actividad catalítica durante mínimo 7 ensayos consecutivos (7 horas de operación); se observó una ligera pérdida de la estabilidad mecánica. Se recomienda agregar un elemento como el cerio en la síntesis de catalizador, ya que adicional a su capacidad de almacenamiento de oxígeno y propiedades redox, contribuye a la estabilidad mecánica de los extruidos. La concentración de Fe lixiviado por los extruidos en el medio de reacción estuvo entre 0.3-0.6 ppm. La decoloración de la mezcla de los colorantes por foto-Fenton homogéneo con 0,6 ppm de Fe fue menor con respecto al foto-Fenton heterogéneo con el extruido de AC con hierro (77%), en una hora de reacción.

Palabras clave: extruidos; foto-Fenton heterogéneo; arcilla; mezcla de colorantes azoicos.

UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA

Divulgación científica para crear aptitudes positivas hacia las ciencias experimentales y sociales, caso Astrobiología

Germán Londoño Villamil

Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas. Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

Email: londonog@gmail.com

Resumen

Los adelantos científicos cada día se convierten en casos que tienen que ver con la vida cotidiana, ligada a los fenómenos naturales y artificiales. Todas las personas deben enterarse de las investigaciones que se adelantan con respecto a la ciencia, la tecnología, la sociedad y el ambiente CTSA. Se pretende con esta investigación buscar mecanismos de motivación para crear actitudes positivas hacia la comprensión de las ciencias experimentales y sociales.

La divulgación científica y la alfabetización científica, facilitan a quien la realiza, un lenguaje apropiado para hacer entender y relacionar las influencias que revelan los temas científicos de sus estudios y descubrimientos más significativos, por consiguiente el que conoce y remedia cualquier situación, no teme a las reacciones de la naturaleza como respuesta a los fenómenos presentados en los diferentes casos y se motiva a profundizar e investigar.

La creación del semillero de astrobiología JIAS. Busco y continuo en un acercamiento al estudio de los ambientes extremos y extremófilos, habitabilidad, exoplanetas, origen de la vida en la tierra, química prebiótica, vida en el universo, vida extraterrestre inteligente, terraformación, astrobiología en el mundo, evolución, la tierra primitiva, origen del universo, entre otros.

Al investigar sobre estos temas, se va creando un ambiente de interés y motivación, que logra la oportunidad de divulgar los trabajos que realizan, como también conocer qué

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florenia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

están laborando otros investigadores para intercambiar experiencias y proponer investigaciones interdisciplinarias.

El semillero se desplaza por varias instituciones educativas, realizando conferencias como: El conocimiento del universo, tras las pistas del Big Bang, mecanismos de evolución, vida en el universo, búsqueda de planetas extrasolares, gases súperinvernaderos, astrobiología, entre otras. Esto viene a motivar la creación de semilleros en las instituciones; que luego de lograr competencias en estas áreas, al culminar los estudios buscan estudiar en las universidades carreras afines a las ciencias experimentales y sociales.

Los integrantes del semillero que se graduaron, motivados a continuar vienen organizando un grupo de investigación en astrobiología; así el insumo del semillero se está fortaleciendo con los que ingresan de los semilleritos a la Uniamazonia y los graduados continúan con las investigaciones y actividades vinculando a los recién ingresados.

La realización de las noches estelares, astrobiología en el parque, campamentos astrobiológicos, programas de radio, actividades televisivas, redes sociales, laboratorios, entre otros; vienen motivando a estudiantes de todas las carreras para su vinculación al semillero creando un ambiente interdisciplinar que amplía el espectro de las investigaciones y facilita su divulgación.

Aficionados a la astronomía, público cautivado por la capacidad de asombro ante la propuesta del semillero, profesores y estudiantes se unen con un mismo propósito ante las diferentes actividades que se realizan, conjugando la academia con las actividades de la astrobiología.

Se diseñó un telescopio con todos los requisitos indispensables para una buena e interesante observación. Se organizó un macroproyecto sobre la creación de un parque temático de quinta generación; presentando como centro de investigación y atracción el observatorio astronómico, facilitando la enseñanza y el aprendizaje de las ciencias experimentales. Como también guías y guías para la divulgación científica, con material presentado en ponencias en los congresos y encuentros internacionales.

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

Se realiza permanentemente revisiones bibliográficas y se asiste en lo posible a todas las conferencias sobre astrobiología, divulgación científica y alfabetización científica, entre otras.

El semillero está afiliado al Instituto de Astrobiología de Colombia y a la International partnership. NASA Astrobiology Institute.

Palabras clave: Actitudes; alfabetización científica; astrobiología; divulgación; extremófilos.



**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

Producción de H₂ y nanotubos de carbono a partir de catalizadores con estructura laminar.

Mauricio Espitia-Sibaja, Luz Stella Nerio

^a Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 180001.

Email: h.espitia@udla.edu.co

Resumen

El hidrógeno es una fuente de energía ambientalmente amigable, sin embargo, algunos métodos utilizados para la producción de este recurso energético dependen de combustibles fósiles y de otros que no son económicamente viables. La producción de H₂ a partir de la reacción catalizada de reformado de etanol (RE) es una alternativa viable, debido a que la materia prima proviene generalmente de recursos renovables. Para esta reacción, los catalizadores laminares con cobalto como fase activa son muy promisorios debido a su alta selectividad y estabilidad.

Por otro lado, se encuentra que el empleo de H₂ como fuente de energía se ve limitado debido a problemas relacionados con su almacenamiento, sin embargo, se ha demostrado que los nanotubos de carbono (NTC's) poseen un excelente desempeño para almacenar el H₂, además son seguros y eficientes. Los métodos para producir nanotubos de carbono comúnmente utilizados son: el arco de descarga eléctrica, la erosión láser y la deposición en fase vapor, en todos los casos con costos de producción son muy altos. Se ha demostrado que mediante reacciones de reformado de hidrocarburos empleando catalizadores heterogéneos se pueden producir NTC's a bajo costo.

Con base en el contexto descrito, en este trabajo se evaluó la actividad y selectividad de un catalizador laminar, sobre la reacción de reformado de etanol para la producción de H₂ y nanotubos de carbono. La reacción se llevó a cabo durante 6 horas a 550 °C en un reactor de lecho fijo. Se encontró que el catalizador es altamente activo en la reacción, presentando conversión de etanol del 98% durante las 6 horas de reacción. La

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

selectividad a H_2 fue de 62.9%, mientras que la de subproductos no deseables fue de 13.6%, 16.2% y 2,9% para CO , CO_2 y CH_4 respectivamente. A su vez, mediante microscopia electrónica de transmisión (TEM) se pudo evidenciar la formación de NTC's de doble pared sobre la superficie de catalizador, con diámetros externos entre 14 - 16 nm.

Palabras clave: Hidrógeno; Nanotubos de carbono; Catalizador.



**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

Adsorción de productos farmacéuticos y de cuidado personal (PPCPs) en suelos agrícolas

N. Torres-Fuentes^{a,c}, C. Corada-Fernández^a, E. González-Mazo^a, D. Álvarez Muñoz^b, P. A. Lara-Martín^a

^aUniversidad de Cádiz, Campus de Excelencia Internacional (CEI-MAR), Departamento de Química-Física, Facultad de Ciencias Marinas y Ambientales, 11510, Puerto Real, Cádiz, España.

^bInstituto Catalán de Investigación del Agua (ICRA), Girona, 17003, España.

^cUniversidad de la Amazonia, Facultad de Ingeniería, Programa de Ingeniería de Alimentos Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 180001.

Email: niv.torres@udla.edu.co

Resumen

Una amplia variedad de productos farmacéuticos y de cuidado personal (PPCPs) se producen y, después de su uso, una fracción de estos productos químicos puede terminar en los ecosistemas terrestres, principalmente debido a la contaminación por vertidos de aguas residuales tratadas y no tratadas y/o mediante la aplicación de biosólidos en suelos agrícolas. Su transporte y destino en suelos y acuíferos depende de la estructura molecular del contaminante y las condiciones ambientales. En este estudio, hemos seleccionado varios PPCPs que han sido previamente detectados por nuestro grupo de investigación en suelos y/o aguas subterráneas del acuífero de Jerez de la Frontera (SW España): hidroclorotiazida (HCTZ), metoprolol (MTP), claritromicina (CLTM), ácido mefenámico (MEF), y triclocarban (TCC). Hemos realizado varios ensayos de adsorción a diferentes temperaturas (5, 15, 25 y 35 °C), para comparar la capacidad de adsorción de estos químicos en los suelos agrícolas de esa zona de muestreo. En primer lugar, las propiedades físico-químicas para las muestras de suelo fueron: pH, contenido de carbono orgánico, la capacidad de retención de agua y la textura. Los ensayos de adsorción se realizaron utilizando el método de equilibrio de lotes de acuerdo con las directrices de la OECD (TG 106). Brevemente, los tubos de polipropileno de 80 mL se llenaron con muestra de suelo (0,5 - 2 g) y agua de calidad HPLC (50 mL) dopada con el compuesto diana en concentraciones de 0,1 a 500 ng/L. Después de la agitación (48 horas después se alcanzó el estado estacionario), ambas fases fueron separadas por centrifugación y la determinación de la concentración de los analitos se realizó por cromatografía líquida - tiempo de vuelo - espectrometría de masas (LC-TOF-MS). Los datos para cada uno de los compuestos farmacéuticos se ajustó a un modelo de isoterma de Freundlich ($R^2 > 0.95$). Las constantes de las isotermas de adsorción de Freundlich (K_f) para los compuestos seleccionados osciló entre 10 y 158 L/kg para HCTZ, 31 y 104 L/kg para MTP, 783 y 6045 L/kg para la CLTM, 21 y 55 L/kg para el MEF, y 1014 y 5106 L/kg de TCC. La mayoría de estos PPCPs muestran relativamente un alto potencial de lixiviación, especialmente cuando se compara con la

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

mayoría de los compuestos hidrofóbico (es decir, los contaminantes orgánicos persistentes, el DDT). Sin embargo, su capacidad de adsorción puede cambiar dependiendo de las condiciones ambientales como la temperatura (que fue evaluado mediante el cálculo de los parámetros termodinámicos ΔH , ΔG y ΔS) y pH. Esto fue evidente para los compuestos como la CLTM, mostrando grupos cargados positivamente en sus estructuras moleculares (si el pH > 6) que mejoran su interacción con arcillas en suelos.

Palabras claves: PPCPs; Isotermas ; TCC; MEF



**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

Intemperismo de Petróleo: mecanismos de resiliencia en sistemas acuáticos marinos

Claudia Yolanda Reyes

^a Universidad de la Amazonia /Universidad Federal de la Bahía-Brasil, Facultad de Ciencias Básicas, programa de Química, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 180001.

Email: cl.reyes@udla.edu.co

Resumen

La investigación comprendió tópicos implícitos al intemperismo de los componentes del petróleo (alcanos normales n-C8 a n-C40, pristano, fitano, terpanos, esteranos y HPAs) en muestras de petróleos de las Cuencas Sedimentares de Campos, Potiguar, Recôncavo, Santos e Sergipe-Alagoas. Se aplicaron experimentos en mesocosmos, simulando derrame artificial de crudo en ambientes marinos, abarcando el monitoreo fisicoquímico de los mesocosmos y la evaluación de las muestras de petróleo intemperizadas, durante el tiempo en 0, 3, 5, 10, 20, 30, 60, 90, 120, 150 y 180 días. Para evaluar el proceso, fueron usados índices de depleción y de intemperismo del petróleo, con base en las abundancias moleculares de los compuestos determinados analíticamente. Se observó elevada degradación de los compuestos de bajo peso molecular, hasta el muestreo de petróleo del día 90, además, se detectó incremento de las concentraciones de los alcanos \geq n-C19, de los terpanos, de los HPAs, a partir del día 120. Los índices de depleción (IDT e ID), propuestos para evaluar el intemperismo de los alcanos lineales, con base en la relación de los isoprenoides, evidenció alta correlación con otros descritos en la literatura especializada. Fue observado que la normalización de los n-alcanos en función del H30 como estándar interno, debe ser aplicado, de preferencia, para petróleos altamente degradados y que preserven el H30.

La variación en la concentración de los componentes, a partir del día 90, fue relacionado con los procesos intempéricos simultáneos e implícitos a los petróleo evaluado, que propiciaron la degradación de las fracciones más pesadas, indicando intemperización elevada, y que en consecuencia, incrementaron las abundancias moleculares de los componentes de menor peso y complejidad. El petróleo de Campos, mostró poca alteración intempérica de la mancha, durante los 180 días de experimento, debido a que la muestra, ya presentaba biodegradación (incluso desde el reservorio). En contraste, los demás petróleos incluidos en el estudio, mostraron grandes alteraciones de la mancha, en tamaño y forma, factores físicos reflejados en los resultados de los análisis geoquímicos. En todos los experimentos, la relación HTP/UCM y los índices de degradación, de intemperismo y de depleción, indicaron el siguiente orden de degradación, para las muestras de petróleo estudiadas: Sergipe-Alagoas > Santos > Potiguar > Recôncavo > Campos. El 25-norhopano (NOR25H), fue detectado en los petróleos intemperizados, en los muestreos e los días 150 y 180, indicando niveles

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florenca - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

severos de degradación. En general, el análisis de componentes principales, calculado a partir de los parámetros de intemperización, mostró, tres grupos relacionados con los índices de mayor correlación, para cada tiempo de intemperismo estudiado y evaluado.

Palabras clave: Degradación; Biomarcadores; Depleción Alcanos; Índices Degradación.



**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

Nuevo método HILIC-ESI-MS/MS para el análisis simultáneo de metabolitos primarios nitrogenados.

Paula Galeano-García,^{a,b} Javier Meléndez,^c Gerson López,^b Chiara Carazzone.^b

^a Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, programa de Química, Bioprospección de los Productos Naturales Amazónicos (BPNA), Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 180001.

^b Universidad de los Andes, Laboratory of Advanced Analytical Techniques on Natural Products (LATNAP), Bogotá, Colombia.

^c Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Thomson Mass Spectrometry Laboratory, Campinas, Brasil.

Email: p.galeano@udla.edu.co

Resumen

Los nucleótidos son algunos de los metabolitos primarios nitrogenados más importantes en todos los organismos. Se producen a partir de diferentes rutas del metabolismo que incluyen (i) la síntesis *De Novo*, a partir de aminoácidos y otras moléculas pequeñas; (ii) degradación de nucleótidos, (iii) rutas de rescate que reciclan nucleósidos y bases libres, y (iv) reacciones de transferencia de grupos fosfato que convierten mono- y dinucleótidos en trifosfatos, para equilibrar los diferentes *pools* de nucleótidos vivos (Cordell, Hill, Ortori, & Barrett, 2008; Geigenberger et al., 2005; Schroder, Giermann, & Zrenner, 2005; Stasolla, Katahira, Thorpe, & Ashihara, 2003). Con el objetivo de analizar los metabolitos primarios nitrogenados involucrados en las rutas de producción de nucleótidos, se desarrolló un método analítico usando *Hydrophilic interaction liquid chromatography*-HILIC acoplada a Espectrometría de Masas tandem (MS/MS).

El análisis fue desarrollado en un cromatógrafo líquido Dionex UltiMate 3000 (Thermo Electron Corporation, San Jose, CA) acoplado a un espectrómetro de masas LCQ Fleet™ Ion Trap Mass Spectrometer (Thermo Electron Corporation, San Jose, CA), equipado con ionización por electrospray (ESI), operado en modo positivo y negativo. La cromatográfica de interacción hidrofílica se realizó usando la columna ZIC-HILIC 3.5 µm, 2.1*150 mm (Merck SeQuant, Umeå Sweden), a un flujo de 0.2mL/min. Usando gradiente de elución con acetonitrilo (solvente A) y agua (solvente B), ambos con acetato

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florenia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

de amonio. El análisis se realizó con diferentes niveles de temperatura y concentración de sal en la fase móvil. Para los análisis se prepararon soluciones stock de los estándares de cada metabolito, y posteriormente se preparó una solución de trabajo de 10 µg/mL haciendo las diluciones con acetonitrilo.

Tabla 1. Área de pico de los metabolitos primarios nitrogenados.

Temp. (°C)	Aditive conc. (mM)	Área de pico de cada compuesto										
		Uracil	Uridine	Ororate	DHO	Glutamine	UDP-Glucose	Carbamoyl aspartic acid	Aspartic acid	UMP	ATP	UTP
0	0	666.1	176.1	1037	1716.5	88.1	344.4	2150	234.6	139.3	8961	1950
-1	-1	518.3	147.5	557.7	1311.9	369.6	961.8	1385	213.2	474.2	2701	1042
0	0	598.4	202.0	786.0	1521.7	32.8	349.0	1607	308.4	109.8	8753	1978

Como parámetro para establecer el método de análisis que permita detectar los metabolitos nitrogenados, se tuvo en cuenta el área de pico cromatográfico. Algunos resultados se resumen en la tabla 1. Las variaciones en sus áreas se relacionarían con la capacidad de ionización-detección de cada compuesto. Así mismo, se puede establecer que las condiciones de análisis intervienen en la interacción de los metabolitos con la fase estacionaria HILIC, y de esta forma mejoran la separación de los compuestos de acuerdo a la estructura y características químicas de cada uno. En conclusión, el método HILIC-ESI-MS/MS desarrollado es útil para el análisis de los metabolitos nitrogenados en matrices biológicas complejas, lo cual permitiría entender diferentes procesos bioquímicos relacionados con la variación de los nucleótidos.

Palabras clave: HILIC; LC-MS/MS; metabolitos primarios; nucleótidos.

Referencias.

- Cordell, R. L., Hill, S. J., Ortori, C. A., & Barrett, D. A. (2008). Quantitative profiling of nucleotides and related phosphate-containing metabolites in cultured mammalian cells by liquid chromatography tandem electrospray mass spectrometry. *Journal of Chromatography B-Analytical Technologies in the Biomedical and Life Sciences*, 871(1), 115-124.
- Schroder, M., Giermann, N., & Zrenner, R. (2005). Functional analysis of the pyrimidine de novo synthesis pathway in solanaceous species. *Plant Physiology*, 138(4), 1926-1938.
- Stasolla, C., Katahira, R., Thorpe, T. A., & Ashihara, H. (2003). Purine and pyrimidine nucleotide metabolism in higher plants. *Journal of Plant Physiology*, 160(11), 1271-1295.

Caracterización bioquímica y evaluación del potencial antimicrobiano del veneno de serpiente *Lachesis muta* del departamento del Caquetá

Silva Yudy L^a, Rodríguez Wilson^b, Ortíz Fernando I^c, Castaño Jhon C^d, Giraldo María I^d, Téllez German A^d, Rodríguez Carlos A^d, Maldonado Jhon I^a.

^a Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, programa de Química, Bioprospección de los Productos Naturales Amazónicos (BPNA), Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 180001

^b Universidad de la Amazonia, grupo Biotecnología y control de calidad microbiológica Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 180001

^c Universidad de la Amazonia, grupo Fauna Silvestre, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 180001

^d Universidad del Quindío, grupo de inmunología (GYMOL), Centro de investigaciones de la, Armenia-Quindío, Colombia, Código Postal 630004 .

Email: yu.silva@udla.edu.co

Resumen

Frecuentemente los péptidos y enzimas derivados del veneno Viperidae, han atraído mucho la atención por sus importantes propiedades antimicrobianas (Bregge et al., 2012), frente a la resistencia que han venido presentando los antibióticos tradicionales (World Health Organization (WHO), 2014). El departamento del Caquetá al encontrarse ubicado en la región Amazónica Colombiana, cuenta con la presencia de serpientes del género *Lachesis* (Viperidae) (Rincón et al., 2015). El accidente *Lachésico* presenta diversos efectos fisiopatológicos que dan prueba de la riqueza en moléculas bio-activas que presentan los venenos en: péptidos, proteínas y enzimas con importantes propiedades biológicas, especialmente propiedades antimicrobianas. En el presente trabajo se exponen los resultados obtenidos de la caracterización bioquímica y actividad antimicrobiana llevado a cabo en cuatro muestras de veneno de serpiente de la especie *Lachesis muta* en diferentes estados de

desarrollo y género, denominados *L. muta* juvenil hembra (LmJH), *L. muta* juvenil macho (LmJM), *L. muta* adulto hembra (LmAH), y *L. muta* adulto macho (LmAM) mantenidas en cautiverio en el serpentario de la Universidad de la Amazonia. El estudio consistió en la descripción morfométrica de los animales, cuantificación de proteína (Lowry), perfil electroforético PAGE-SDS, caracterización de la actividad gelatinolítica y la determinación de las propiedades antimicrobianas de un pool del veneno sobre aislados clínicos de *E.Coli*, *Staphylococcus epidermidis*, *Salmonela*, *Enterobacter cloacal*, *Pseudomonas aeruginosa* y *Candida albicans*, por el método de reducción de resazurina.

El veneno *L.muta* mostró un contenido protéico medio de 99,80 % base seca para LmJH y 89,12 % base seca para LmJM. El perfil protéico mostró bandas entre los 60-65 kDa y 21-23 kDa (excepto LmJM) asociada probablemente a enzimas de tipo metaloproteinasas. Se determinó la actividad gelatinolítica de las proteasas presentes en las muestras de veneno LmAH, LmAM, LmJH y LmJM, mostrando bandas proteolíticas predominantes en el rango de 10-23kDa (excepto LmJM), 32-39 kDa y 60-70kDa. Se evidenció actividad antibacteriana del pool de veneno de la especie *Lachesis muta* frente a los aislados clínicos de *Enterobacter Cloacal*, *Salmonela sp* y *E.coli*, con CIM entre los valores de 125 - 250 µg/ml, 250-500 µg/ml y 250-500 µg/ml respectivamente. Se evidenció actividad citotóxica del pool de veneno evaluado de la especie *Lachesis muta* frente a células Vero con un rango de CI₅₀ $4,1 \times 10^{-7}$ - $8,2 \times 10^{-8}$ µg/ml.

Palabras clave: *Lachesis muta*; citotoxicidad; actividad antimicrobiana; células vero; zimograma.

Evaluación de Métodos de Derivatización de Fosfolípidos presentes en *Mycobacterium tuberculosis* empleando GC-MS.

Camila Peñaloza^a, Gerson López-Muñoz^{a,b*}, Nicolás Morato-Gutiérrez^a, Paula Galeano-García^a, Edgar Rodríguez^{a,b}, Martha Murcia^b, Chiara Carazzone^a.

^a *Laboratory of Advanced Analytical Techniques in Natural Products (LATNAP), Departamento de Química, Universidad de Los Andes, Bogotá D.C., Colombia, 12340.*

^b *MycobacUN Group, Departamento de Microbiología, Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Medicina, Bogotá D.C., Colombia, 111321.*

Email: gd.lopez@uniandes.edu.co

Resumen

Mycobacterium tuberculosis (Mtb) es el principal causante de Tuberculosis en humanos, presentado alta incidencia en comunidades indígenas de la Amazonía Colombiana. Este microorganismo posee una pared celular compuesta de una densa capa de lípidos, algunos de los cuales funcionan como primera barrera de protección frente al tratamiento con antibióticos. Para analizar la composición de lípidos de la membrana del Mtb se puede emplear GC-MS realizando una previa esterificación para generar esteres volátiles. El objetivo del este estudio fue evaluar diferentes procesos de esterificación de los fosfolípidos de tres cepas de Mtb: una cepa control, una susceptible y otra resistente a la rifampicina, así como estudiar su posible diferencia. En las metodologías empleadas se variaron las condiciones de concentración, tiempo y temperatura de reacción. De los derivatizantes empleados: Hidróxido de Tetrabutilamonio (TBH)/Hexano, Hidróxido de Trimetil Sulfonio (TMSH)/Metil terbutil éter (MTBE) y CH₃COCl/MeOH, solo los dos últimos generaron los esteres deseados. En correlación a estudios previos en nuestro laboratorio, realizados mediante HPLC-MS se logró determinar que los metil esteres de ácidos grasos (FAME's) analizados en GC-MS fueron generados a partir de las Fosfatidiletanolaminas (PE) C₂₁₋₄₁H₄₀₋₈₀O₇₋₈P₁ presentes en el Mtb. De los FAME's se determinó que no existe una diferencia apreciable entre las cepas rifampicina resistente y susceptible, y su confirmación se logró con la cepa control.

Palabras clave: *Mycobacterium tuberculosis*; Esterificación; Fosfolípidos; GC-MS.

Análisis Lipidómico Comparativo en Cepas de *Mycobacterium tuberculosis* Susceptible y Resistente a Rifampicina por HPLC-HRMS

Gerson López-Muñoz^{a,b*}, Paula Galeano-García^a, Edgar Rodríguez^b, Martha Murcia^b, Chiara Carazzone^a.

^a Universidad de Los Andes, Departamento de Química, Laboratory of Advanced Analytical Techniques in Natural Products (LATNAP), Bogotá D.C., Colombia, 12340.

^b Universidad Nacional de Colombia, Departamento de Microbiología Facultad de Medicina, MycobacUN Group, Bogotá D.C., Colombia, 111321.

Email: gd.lopez@uniandes.edu.co

Resumen

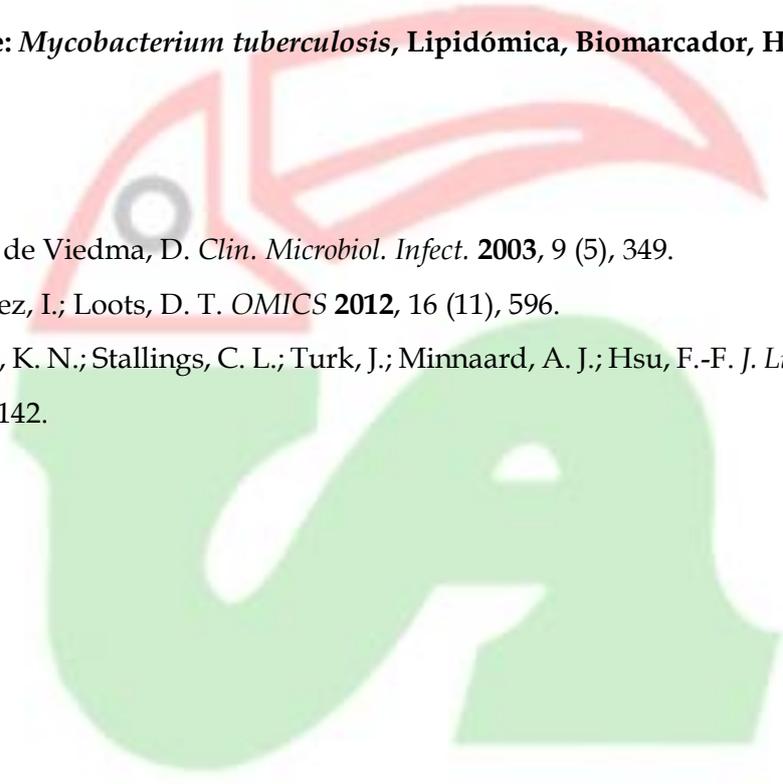
La Tuberculosis (TB) es una infección producida por *Mycobacterium tuberculosis* (Mtb), que presenta alta incidencia en comunidades indígenas que habitan la Amazonía Colombiana. El Mtb posee una compleja pared celular constituida principalmente de lípidos, los cuales están asociados a características fisiológicas como la resistencia a los antibióticos y a mecanismos de defensa frente al hospedero. Uno de los antibióticos de primera línea empleados en el tratamiento de la TB es la Rifampicina. Sin embargo, se ha encontrado cepas resistentes a este medicamento, causando infección hasta por dos años en los pacientes que la padecen. Por eso, este trabajo pretende identificar posibles lípidos que sirvieran como biomarcador para diferenciar entre cepas resistentes y sensibles al tratamiento con Rifampicina. Para ello se realizó el crecimiento en medio Löwenstein-Jensen y MGIT de tres cepas de Mtb: una cepa control, una susceptible y otra resistente a la Rifampicina. La posterior extracción de los lípidos del Mtb se realizó con CH₃Cl:MeOH (2:1) y se secaron con nitrógeno gaseoso. Los extractos lipídicos secos fueron solubilizados en Hexano/ACN 0.1% ácido fórmico (1:9) y posteriormente inyectados en un cromatógrafo líquido Infinity 1260 acoplado a un espectrómetro de masas de alta resolución 6520 Q-TOF cuadrupolo-tiempo de vuelo (Agilent Technologies), equipado con ESI. Siendo posible identificar la presencia de diferentes

lípidos de Mtb, entre los que se destacan: los Alfa-, Metoxi- y Ceto- Micolatos, Monomicolatos de glucosa y trehalosa, Fosfatidilinositolmanosides mono- y di-acetilado así como las Fosfatidiletanolaminas. Al encontrarse una sobreexpresión de ácidos micolicos en la cepa rifampicino resistente se propone la posibilidad de seguir estudiando dicha familia de lípidos como un potencial biomarcador que pueda la explicar la resistencia al antibiótico.

Palabras clave: *Mycobacterium tuberculosis*, Lipidómica, Biomarcador, HPLC-HRMS.

Referencias:

1. García de Viedma, D. *Clin. Microbiol. Infect.* **2003**, 9 (5), 349.
2. du Preez, I.; Loots, D. T. *OMICS* **2012**, 16 (11), 596.
3. Flentie, K. N.; Stallings, C. L.; Turk, J.; Minnaard, A. J.; Hsu, F.-F. J. *Lipid Res.* **2016**, 57 (1), 142.



UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA

Desarrollo de nuevas matrices de transferencia electrónica para su uso en espectrometría de Masas MALDI.

Brian Castro Agudelo,^a y César Sierra Ávila.^b

^aUniversidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Grupo de Investigación Estrategias Computacionales en Química, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

^b Universidad Nacional de Colombia, Departamento de Química, sede Bogotá, Carrera 30 45 03, Bogotá, Colombia)

Email: br.castro@udla.edu.co

Resumen

Fueron sintetizados 3 sistemas fenilenvinileno empleando la reacción de Mizoroki-Heck y sus propiedades optoelectrónicas fueron determinadas. Pudo ser establecido que tienen características ideales para ser probadas como matrices MALDI. Se realizaron experimentos empleando 4 péptidos como analitos y los fenilenvinileno como matrices MALDI de transferencia protónica. Se determinó que los péptidos no podían ser ionizados por los fenilenvinileno, debido a que los fenilenvinileno no formaban cationes protonados sino que formaban cationes radicales y por tanto no cumplían el objetivo de servir como matrices de transferencia protónica. Debido a su tendencia a formar cationes radicales, los fenilenvinileno se establecieron como potenciales matrices de transferencia electrónica y se probaron con 4 analitos modelo de hidrocarburos policíclicos aromáticos. Los resultados mostraron que los fenilenvinileno se comportaban como excelentes matrices de transferencia electrónica, aumentando la señal del ion molecular y disminuyendo la fragmentación de cada analito..

Palabras clave: matriz; Mald; fenilenvinileno; hidrocarburos; ionización.

Efecto de la zona de cultivo del copoazú (*Theobroma grandiflorum*), frente a dos especies reactivas del oxígeno.

Natalia Cuellar Álvarez^{a*}, Paula Galeano García, Guillermo Raúl Schinella^b

^a *Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Grupo de Investigación Bioprospección de los Productos Naturales Amazónicos. Barrio el Porvenir Cra 17, Cl 17, Diagonal 3F., A.A. 192. Florencia, Caquetá, Colombia*

^b *Universidad Nacional de La Plata, Facultad de Ciencias Médicas, Cátedra de Farmacología Básica. CIC Provincia de Buenos Aires, La Plata, Argentina.*

Email: li.cuellar@udla.edu.co

Resumen

Un radical libre es una especie química definida, una molécula o fragmento de molécula, que contiene uno o más electrones desapareados en su orbital externo lo que lo convierte en un compuesto altamente inestable y fugaz con gran capacidad de formar otros radicales libres por reacciones químicas en cadena (HALLIWELL, 1994). Para determinar la actividad antioxidante de los extractos, se evaluó la capacidad atrapadora de especies reactivas de oxígeno (superóxido y peroxinitrito), de los diferentes extractos de copoazú, usando los ensayos Hipoxantina oxidasa y el blanqueamiento del pirogalol rojo, respectivamente.

El radical superóxido ($O_2 \bullet^-$) interfiere con la actividad de enzimas del sistema de defensa antioxidante tales como la catalasa y la glutatión peroxidasa (FRANCESCHUTTI et al., 1996; TABATABAIE y FLOYD, 1994; RADI et al., 1991; KONO y FRIDOVICH, 1982). Para medir la actividad atrapadora de esta especie reactiva del oxígeno por parte de las muestras evaluadas se usó el sistema Hipoxantina/Xantina oxidasa. La disminución de la absorbancia a 560 nm provocada por el antioxidante, implica consumo del radical superóxido (YAMAGUCHI et al., 2000), esto se debe a que los compuestos fenólicos del extracto evitan la reducción del compuesto azul de nitrozolío (NBT), que da lugar a la formación del cromóforo formazán. Los resultados determinan que las muestras que presentaron mayor actividad captadora de este radical,

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

son los extractos de los granos fermentados del relieve montaña ($108,9 \pm 67,1$), siguiendo los extractos de los granos fermentados ($44,4 \pm 13,2$) y secos ($31,0 \pm 18,9$) del relieve vega. Por otro lado, los extractos obtenidos de los granos secos ($4,4 \pm 11,9$) y tostados ($2,6 \pm 2,9$) del relieve lomerío mostraron una baja actividad de atrapamiento de este radical.

La generación del anión ONOO^- causa la oxidación de lípidos, la fractura de las cadenas del DNA por nitración y desaminación de bases (especialmente de guanina), nitración de residuos de aminoácidos aromáticos y la destrucción de restos tioles activos ($-\text{SH}$). También inhibe la síntesis de DNA y libera hierro de los depósitos intracelulares de ferritina promoviendo reacciones tipo Fenton (DAWSON Y DAWSON, 1996; HEALES et al., 1999; SINGH Y DIKSHIT, 2007). Este último efecto ha sido implicado directamente en la etiopatogénesis del mal de Parkinson (MICHELL, 1998). Para determinar la actividad de atrapamiento del anión peroxinitrito se usó el ensayo del blanqueamiento del pirogalol rojo. Los resultados se expresan como mg Ácido ascórbico/g extracto seco.

Se observó que el extracto con mayor actividad de protección de la decoloración del pirogalol rojo consecuencia de la acción oxidativa de la especie reactiva ONOO^- ; es el extracto de los granos fermentados ($44,1 \pm 2,8$) del relieve montaña, seguido de los extractos de los granos fermentados ($36,5 \pm 1,4$) del relieve Vega. En cuanto a los extractos de los granos secos, se determinó que el de mayor actividad atrapadora de este radical es el perteneciente al relieve vega ($29,5 \pm 4,0$). Con respecto a los extractos de los granos tostados, el de mayor acción atrapadora, fue el del relieve vega ($28,7 \pm 3,9$), a diferencia del relieve lomerío que mostró ser poco efectivo ($19,6 \pm 2,9$).

Estos resultados observados en las muestras fermentadas de los tres tipos de relieve, en particular en el relieve montaña se deben a su contenido fenólico, ya que muchos de estos compuestos tienen la capacidad de interrumpir la cadena de peroxidación lipídica. Según (FREI y HIGDON, 2003; HALLIWELL y GUTTERIDGE, 1999), los compuestos que presentan grupos $-\text{OH}$ adyacentes tienen la capacidad de quelar metales dando lugar a especies con baja tendencia a promover reacciones de generación de radicales libres. Además pueden neutralizar especies reactivas del oxígeno como $\text{O}_2^{\cdot-}$, OH^{\cdot} , ONOO^- y HOCl . Ejemplos característicos son el ácido cafeico, antocianinas, catequinas, epicatequina, resveratrol, sesamol e isovitexina.

Palabras clave: antioxidante; copoazú; peroxinitrito; superóxido.

Distribución espacial y temporal del mercurio en sus fracciones biodisponibles producto de la actividad minera en la cuenca media alta del río Caquetá

Hernán García López, Elkin Tilvez Marrugo

*Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Florencia-Caquetá,
Colombia, Código postal 18007*

h.garcia@udla.edu.co

Resumen

Con el propósito de conocer el grado de contaminación por Hg, producto de la minería de oro sobre el río Caquetá en su cuenca media Alta y sus posibles acciones de manejo y control ambiental; se realizará estudio comparativo de las concentraciones de mercurio en sus fracciones biodisponibles y residual, presentes en sedimentos y agua, su relación con la materia orgánica, el pH y potencial redox, como los factores dominantes de los procesos de transformación del Hg de la forma inorgánica a la orgánica, identificando además las posibles plantas acuáticas propias de las áreas inundables del bosque con posible efecto biomorremediador del mercurio. El estudio se llevará a cabo en ocho (8) estaciones localizadas sobre las márgenes del río entre la inspección de la Tagua Departamento del Putumayo y en el municipio de Curillo - departamento de Caquetá, en sitios reconocidos como los de mayor actividad de minería de aluvión durante los últimos 15 años. Con los resultados del estudio, se pretende construir un mapa georeferenciado de la zona, en el que se identificarán los puntos de mayor riesgo por la presencia de mercurio biodisponible para la biota acuática y su incorporación a la cadena trófica; con objeto de establecer posteriormente en una segunda etapa del proyecto, alternativas de manejo y planes de acción a través de sistemas de biorremediación, tendientes a reducir los riesgos que puede acarrear a la salud de las poblaciones humanas asentadas en las riveras de dicho río y comunidad en general, que fundamentan su dieta alimenticia en peces procedentes de dicha cuenca.

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

Se llevaran a cabo en un periodo de 18 meses, seis (8) campañas de muestreo considerando los meses de máxima y mínima pluviosidad, al igual que los meses de transición de descenso y ascenso del periodo de lluvias; momentos en los que se colectaran muestras de sedimentos, agua y plantas acuáticas en áreas de la llanura aluvial caracterizadas como Terrazas y Várzeas, dada su capacidad de retención de sedimentos asociadas al pulso de inundación del río.

Palabras clave: Cuenca; Mercurio; biodisponible; espaciotemporal.



**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**



Contribuciones en la Modalidad Póster

**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

Estudio computacional del espectro UV-vis de derivados del ácido acrílico para su posible aplicación en MALDI.

Yesica Yulieth Bolívar Cantillo, Felix Santiago Moncada Arias

Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básica, Programa de Química, Grupo de Investigación Estrategias Computacionales en Química, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

Email: ye.bolivar@udla.edu.co

Resumen

MALDI (ionización laser asistida por matriz) es una técnica espectrometría de masas que mantiene al analito intacto desde su ionización hasta su conversión a fase gaseosa. Para llevar a cabo este análisis es necesario cocrystalizar la muestra con un compuesto orgánico (matriz), que se encarga de absorber la energía irradiada por un láser, por lo general de 355nm. La excitación de moléculas de la matriz permite que el sistema pase de fase sólida a fase gaseosa y que se generen iones del analito. En este proyecto de investigación se espera encontrar moléculas orgánicas las cuales se puedan aplicar como matrices en MALDI, teniendo en cuenta que uno de los parámetros fundamentales es que estas moléculas absorban la radiación emitida por el láser.

Las moléculas a las cuales se les calculó el espectro UV-vis son 10 derivados del ácido acrílico. Se empleó el funcional B3LYP con la base 631g(d) con el programa GAMESS para estos cálculos. Los resultados obtenidos muestran buena correlación con los reportes experimentales. Teniendo en cuenta los espectros obtenidos vemos que algunas moléculas tienen una absorbancia cercana a 355nm. Con los resultados obtenidos podemos complementar otro estudio realizado sobre la afinidad protónica de dichas moléculas y así proponer nuevas moléculas para su aplicación como matrices en MALDI.

Palabras clave: MALDI; UV-vis; cocrystalizar

Desarrollo de sensores potenciométricos basados en pasta de carbono dopada con la 4'-(4-bromofenil)-2,2':6',2''-terpiridina (TPYBr) y su potencial uso en detección de mercurio en aguas.

Yeraldin López Guzmán,^a Tatiana Bolaños Carvajal,^a Sergio Silva Campos,^a César Sierra Ávila^b y Brian Castro Agudelo^a

^aUniversidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Grupo de Investigación Estrategias Computacionales en Química, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

^b Universidad Nacional de Colombia, Departamento de Química, sede Bogotá, Carrera 30 45 03, Bogotá, Colombia)

Email: br.castro@udla.edu.co

Resumen

La contaminación de las fuentes hídricas producidas por la presencia de mercurio, es una problemática global debido que representa un riesgo para la salud humana, en consecuencia el control de calidad de las fuentes de agua es imperativo por lo que el hombre debe encontrar maneras mas eficaces para monitorearlas. Aunque ya existen distintas metodologías para el análisis de mercurio, la mayoría de ellas resultan engorrosas y requieren una instrumentación poco accesible. En la literatura se ha podido apreciar que las terpiridinas representan una serie de moléculas interesantes para realizar el acomplejamiento de mercurio. En el presente trabajo se evaluaron parámetros (composición, sensibilidad, selectividad y reproducibilidad) de la molécula 4'-(4-bromofenil)-2,2':6',2''-terpiridina (Tpy-Br) como agente dopante dispersa en pasta de carbono para generar un electrodo indicador. La respuesta del electrodo fue determinada a través de mediciones potenciométricas de soluciones de mercurio y otros metales en rangos de concentración entre 1.3×10^{-2} a 1×10^{-8} M. En el sistema potenciométrico se usó un electrodo de cloruro de plata, como electrodo de referencia. Se observó que el electrodo de pasta de carbono

modificado con Tpy-Br al 10% p/p presenta comportamiento Nernstiano en presencia de iones de mercurio (II). También se estableció que el electrodo obtenido presenta buena selectividad al mercurio con respecto a otros metales, límites de detección cercanos a $1,67 \times 10^{-7}$ M y la sensibilidad representada por una pendiente 49,42 mV/decada.

Palabras clave: Sensor potenciométrico; pasta de carbono; terpiridina; mercurio; selectividad; sensibilidad.



**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

Análisis de los efectos electrónicos en las energías de transición en derivados de diestirilbenceno.

Gisella Díaz Cortés^{a*}, José Medina Alvear^a, Félix Santiago Moncada Arias^{a,b}

^aUniversidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Grupo de Investigación Estrategias Computacionales en Química, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

^b Universidad Nacional de Colombia, Departamento de Química, sede Bogotá, Carrera 30 45 03, Bogotá, Colombia)

Email: t.diaz@udla.edu.co

Resumen

Las energías de transición de los derivados de diestirilbenceno (DSB) fueron calculados empleando la teoría del funcional de la densidad tiempo dependiente, con los funcionales B3LYP, PBE0, CAM-B3LYP y la base 6-31*G+. En la figura 1, se ilustran las posiciones en las cuales se pueden realizar sustituciones con grupos electro-donores y electro-aceptores. Se llevó a cabo un análisis teórico de las energías de transición de 70 moléculas derivadas del DSB con respecto a longitudes de máxima absorción reportadas en la literatura. Se construyó un modelo estadístico en el cual se obtuvo una buena correlación ($R^2=0.90$), validando con ello el método empleado. Nuestros resultados demuestran que el impedimento estérico afecta significativamente la geometría molecular, distorsionando la planaridad del grupo vinil y reduciendo la conjugación, lo cual disminuye la longitud de máxima absorción de la molécula; por otro lado, el incorporar grupos electro-donor o electro-aceptor incrementa la longitud de absorción.

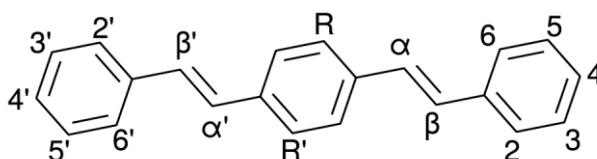


Figura 1. Posiciones de grupos sustituyentes en una molécula de DSB.

Palabras clave: Dicianoestirilbenceno; energías de transición; TDDFT.



**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

Análisis de la relación estructura actividad (QSAR) de compuestos derivados de amida potencialmente activos frente a la enfermedad de Chagas

Kevin Granados-Tavea, Jenny Melo Ospina, Elkin Tilvez Marrugo

Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básica, Programa de Química, Grupo de Investigación Estrategias Computacionales en Química, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

Email: k.granados@udla.edu.co

Resumen

La enfermedad de Chagas es una infección parásita ampliamente distribuida en toda América Latina, con consecuencias devastadoras en términos de mortalidad y morbilidad humana. Según datos de la OMS se estima que en Latinoamérica existen alrededor de 16 millones de personas infectadas con este patógeno.

En la última década ha existido la necesidad de buscar nuevas moléculas que tengan actividad anti Chagas que en un futuro logren ser sintetizadas como fármacos. Por ello ha aumentado el interés de la comunidad científica en la búsqueda de nuevos medicamentos para la enfermedad; Un método que ha despertado mucho interés son los estudios QSAR (Quantitative structure-activity relationship), este estudio ha cambiado el enfoque de diseño de compuestos bioactivos, ya que se pueden determinar las propiedades constitucionales, geométricas, topológicas, electrostáticas y la energía de moléculas por medio de descriptores moleculares de la reactividad.

Para este estudio se ha realizado hasta el momento un análisis conformacional de 39 moléculas al nivel de teoría B3LYP/6-31G (d) con el software ORCA.

Palabras claves: chagas; QSAR; B3LYP

Cálculo de la afinidad protónica de moléculas conjugadas para su uso como matrices en MALDI.

Luis F. Gutiérrez Torres, Brian Castro Agudelo, Félix Moncada Arias

Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básica, Programa de Química, Grupo de Investigación Estrategias Computacionales en Química, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

Email: lf.gutierrez@udla.edu.co

Resumen.

En este trabajo se determinó la afinidad protónica de 3 diferentes sistemas conjugados: Ácido 3-(2-furil)acrílico; Ácido 3-(2-pirrolil)acrílico; Ácido 3-(2-tienil)acrílico. La figura 1 presenta las estructuras de estos compuestos. Experimentalmente se ha determinado que estas moléculas pueden ser empleadas como matrices en la espectrometría de masas con desorción/ionización láser asistida por matriz (MALDI), debido a que tienen la capacidad de aceptar protones de un ácido y donarlos a un analito (1). La afinidad protónica se calculó como la diferencia de entalpía de la especie protonada y neutra, empleando el funcional B3LYP con la base 6-31*G+ y empleando el programa GAMESS de estructura electrónica. Al comparar diferentes lugares de protonación se encontró que la posición más estable energéticamente se encuentra en el oxígeno del ácido carboxílico. Al comparar los tres sistemas se encontró que el sistema con furano presenta la menor afinidad protónica. Además se evaluó el efecto de sustituir el hidrógeno alfa del heterociclo en la afinidad protónica. Se encontró que incluir grupos electroattractores disminuye esta propiedad, mientras que los grupos electrodonores la aumentan.

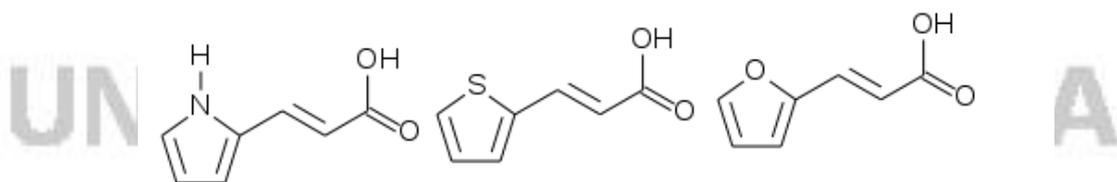


Figura 1. Estructuras del Ácido 3-(2-pirrolil)acrílico (izquierda), Ácido 3-(2-tienil)acrílico (centro), Ácido 3-(2-furil)acrílico; (derecha)

Keywords. MALDI; afinidad protónica; sistemas conjugados.

References.

[1] Castro Agudelo B. Síntesis de sistemas basados en fenilenvinileno con potencial de donar o aceptar protones, y su posible aplicación como matrices para MALDI. Tesis de Maestría. Universidad Nacional de Colombia, 2015

Nuevos aportes a la reactividad de aminas en disolventes polihalogenados

^aLuz Stella Nerio, ^bAugusto Rivera

^a Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básica, Programa de Química, Carrera 17 Diagonal 3F, Florencia, Colombia.

^b Universidad Nacional de Colombia, Departamento de Química, sede Bogotá, Carrera 30 45 03, Bogotá, Colombia)

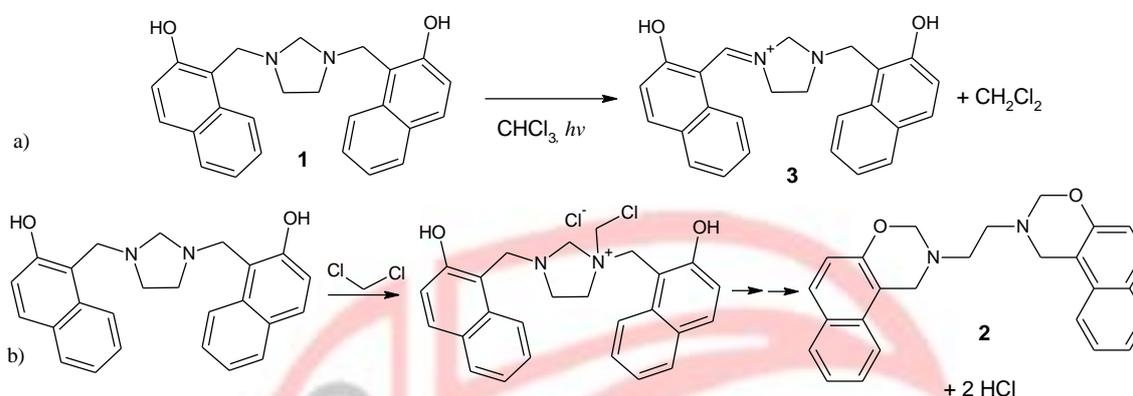
Email: Lnerio@udla.edu.co

Resumen

Durante el desarrollo de trabajos enfocados hacia el estudio de las interacciones tipo puente de hidrógeno intramolecular de compuestos del tipo 1,3-bis(2'-hidroxiarilmetil)imidazolidina, se encontró que el compuesto 1,1'-(imidazolidin-1,3-diildi(metilen))di(2-naftol) **1** se transforma en 3,3'-etilen-bis (3,4-dihidrobenzo[h]-2H-1,3-benzoxazina) **2**, al reaccionar con cloroformo en presencia de luz. A pesar de que la síntesis de compuestos del tipo 3,3'-etilen-bis(3,4-dihidro-2H-1,3-benzoxazina) ha sido anteriormente desarrollada a partir de la reacción entre la 1,3-bis(2'-hidroxiarilmetil)imidazolidina correspondiente y formaldehído,¹ es evidente que en este caso la conversión de **1** a **2** en la disolución clorofórmica, se lleva a cabo a través de una ruta hasta el momento desconocida. Para esta transformación, de acuerdo con los resultados publicados en la literatura,²⁻⁵ se propone la formación inicial de un complejo de transferencia de carga $1 \cdots \text{CHCl}_3$ y posterior transferencia de electrones en presencia de luz que genera el anión radical $\text{CHCl}_3^{\cdot-}$ y el catión radical $1^{\cdot+}$. La especie $\text{CHCl}_3^{\cdot-}$, al descomponerse en presencia de $1^{\cdot+}$ forma una molécula de diclorometano (CH_2Cl_2) y la imina **3** (Esquema 1a). En una reacción en competencia, la molécula de diclorometano puede alquilar uno de los grupos amino en **1**, formando una sal de amonio que al sufrir ataques nucleofílicos intramoleculares por parte de los grupos hidroxilo hacia grupos metileno fuertemente activados por la presencia de grupos amonio y los átomos de cloro, hace posible la formación de la benzoxazina **2** (Esquema 1b). Para corroborar esta

VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017

hipótesis, se efectuó la reacción entre la imidazolidina **1** y diclorometano, obteniéndose efectivamente el compuesto **2**.



Esquema 1, a) Formación de diclorometano por descomposición de cloroformo en presencia de luz b) Alquilación de **1** por parte de diclorometano

Palabras clave: cloroformo, diclorometano, aminas.

Referencias

1. A. Rivera, G.I. Gallo, M.E. Gayón, P. Joseph-Nathan. Synth commun, 24, 2081 (1994)
2. S.H. Hansen, L.J. Nordholm. J Chromatogr. A, 204, 97 (1981)
3. M.F. Budyka, M.V. Alfimov Russ. Chem. Rev, 64, 705 (1995)
4. Lautenberger, W. J.; Jones, E. N.; Miller, J. G. J. Am. Chem. Soc., 90, 1110 (1968)
5. Stevenson, D. P.; Coppinger, G. M. J. Am. Chem. Soc, 84, 149 (1962)

Oxidación de rojo Congo con catalizadores de TiO₂ inmovilizado sobre un mineral arcilloso natural.

Ederson A. Osorio Restrepo^a, Maurin Salamanca^b, Lis Manrique Losada^{a*}

^a Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básica, Programa de Química, Grupo de Investigación Materiales, Ambiente y Desarrollo MADE. Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

*Email: ed.osorio@udla.edu.co

Resumen

Frente a la problemática de la dificultad para degradar y mineralizar de compuestos recalcitrantes, los procesos avanzados de oxidación (PAOx) resultan ser una alternativa adecuada para el tratamiento de este tipo de sustancias, sin embargo, muchas de estas tecnologías tienen como desventaja la separación del catalizador del medio de reacción, encareciendo y dificultando la aplicación de éstos. Para superar las trabajosas y costosas técnicas de separación se han propuesto diversos tipos de soportes que permiten reutilizar el catalizador tales como materiales carbonosos, sílice, alúminas, minerales arcillosos entre otros. Las arcillas debido a sus propiedades fisicoquímicas como alta área superficial, capacidad de intercambio, acidez y basicidad, además de su abundancia y fácil adquisición son una alternativa de interés científico actual.

En esta investigación se prepararon una serie de catalizadores a partir de un material arcilloso natural proveniente de la región andino - amazónica del departamento de Caquetá, purificado por el método de los cilindros de Attemberg y homoionizado con una solución de NaCl. La inmovilización de TiO₂ se realizó empleando el método de impregnación incipiente y el método de autocombustión modificada, se utilizó como precursor de TiO₂ el alcóxido isopropóxido de titanio (IV) en una concentración del 14 % en masa. El material impregnado luego se moldeó junto con arcilla homoionizada y arena en forma de anillo y finalmente se calcinaron a 450 °C y 700 °C. Los catalizadores obtenidos se nombraron como catalizadores de Ar - TiO₂, seguidamente se caracterizaron mediante las técnicas de difracción de rayos X (DRX) y espectroscopia Raman, corroborando la presencia de TiO₂ en su fase activa anatasa. La evaluación

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florenia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

fotocatalítica se llevó a cabo con una solución de 25 mL de rojo Congo (RC) como contaminante orgánico modelo en una concentración de 20 mg.L⁻¹, una dosis de 1 mL.L⁻¹ de H₂O₂ y dos anillos de los catalizadores de Ar - TiO₂, el seguimiento del avance de la reacción se determinó por espectroscopia UV-vis a una longitud de onda de 498 nm.

Se demostró que el material arcilloso por sí solo no presentó actividad catalítica y ésta solo se dio cuando se adicionó el H₂O₂, logrando el 20 % de decoloración. Para los catalizadores preparados por el método de autocombustión modificada se observó que no superaron el 43 % de degradación de RC, mientras los catalizadores sintetizados por impregnación incipiente exhibieron mayor actividad alcanzando porcentajes superiores al 70%. La reutilización del catalizador de Ar - TiO₂ se realizó utilizando los catalizadores calcinados a 700 °C y elaborados por el método de impregnación incipiente. Los mismos catalizadores fueron utilizados para el seguimiento espectroscópico y la determinación de la demanda química de oxígeno (DQO) consiguiendo el 35 % de oxidación de materia orgánica.

Palabras clave: contaminante orgánico, inmovilización, mineral arcilloso, dióxido de titanio.

**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

Clasificación de muestras de café por medio de espectroscopía UV-Vis

Dairo Melo Montealegre, Daniel Peña Bohórquez, Miguel Villarreal Parra, Jenny Melo Ospina

Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básica, Programa de Química, Grupo de Investigación Estrategias Computacionales en Química, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

Email: j.melo@udla.edu.co

Resumen

El café regional de Colombia posee diferentes características únicas que pueden identificarse fácilmente y su calidad depende del sitio donde es cultivado. Por tanto, se busca la determinación del origen de una muestra de café por medio de análisis estadístico de su espectro de ultravioleta visible.

El análisis estadístico consiste en la proposición y validación de modelos PCA, PLS-DA y K-NN tomando un conjunto de datos de 25 espectros UV-Vis de muestras de café, 14 provenientes del departamento del Huila y 11 del departamento del Caquetá.

Análisis de componentes principales (PCA)

El objetivo de esta técnica es crear un conjunto de variables latentes menor al conjunto de variables original, pero que aún explique toda la varianza en la matriz de variables original. En términos matemáticos, el análisis de principales componentes transforma el número de variables correlacionadas en un número menor de variables no correlacionadas, a las que se llaman principales componentes. Se obtuvo la matrix de correlación lo que permitirá analizar la colinealidad entre las variables, también lambda donde se puede observar los componentes principales que describen la mayor variabilidad de los datos.

Mínimos cuadrados parciales con análisis discriminante (PLS-DA)

Se presentan modelos de clasificación de calibración y validación basados en mínimos cuadrados parciales con análisis discriminante PLS-DA. La evaluación durante el entrenamiento y la validación del modelo se llevó a cabo mediante el uso de rutinas MatLab, por medio del tutorial "Clasificación de herramientas en química. Parte 1: Modelos lineales. PLS-DA". Mediante el

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

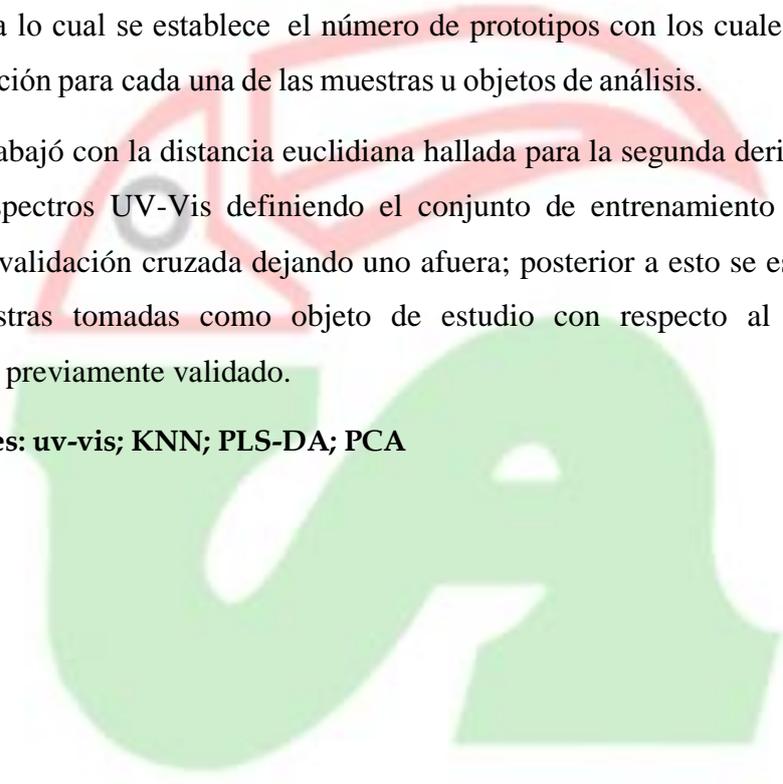
método Leaving Many Out (LMO) se validó el modelo el cual consiste en tomar unos para entrenamiento y dejar otros por fuera. Se validó el modelo con LMO=3 dejando tres por fuera y clasificó el 52% de las muestras correctamente. Se trabaja en la validación del modelo con LMO=1,2,4,5,6,7,8,9, y 10.

Análisis vecinos más cercanos (KNN)

Este consiste en hallar la relación existente entre los valores de la distancia euclidiana presentados por un conjunto de datos de estudio y un conjunto de prototipos previamente definidos, para lo cual se establece el número de prototipos con los cuales se llevara a cabo la evaluación para cada una de las muestras u objetos de análisis.

Para este se trabajó con la distancia euclidiana hallada para la segunda derivada de cada uno de los espectros UV-Vis definiendo el conjunto de entrenamiento y evaluando mediante una validación cruzada dejando uno afuera; posterior a esto se espera evaluar aquellas muestras tomadas como objeto de estudio con respecto al conjunto de entrenamiento previamente validado.

Palabras claves: uv-vis; KNN; PLS-DA; PCA



**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

Determinación de dopamina usando electrodos serigrafados de carbono modificados con complejos de cobalto

Johisner Penagos Llanos^a, John Jady Hurtado^b, Olimpo García-Beltran^c, Edgar Orlando Nagles Vidal^{c*}

^a Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básica, Programa de Química, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

^b Universidad de los Andes, Departamento de Química, Carrera 1 No. 18A-12, Bogotá, Colombia.

^c Universidad de Ibagué Facultad de Ciencias Naturales y Matemáticas, Carrera 22 Calle 67 Ibagué Colombia.

Email: jo.penagos@udla.edu.co

Resumen

La dopamina (DA) causan algunas enfermedades neurodegenerativas como el Alzheimer y el Parkinson producto de niveles anormales. Por otro lado, la concentración de (DA) en muestras biológicas como orina y sangre es muy baja y está en la presencia de ácido ascórbico (AA) y ácido úrico (AU), los cuales son fácilmente oxidados a potenciales muy cercanos de la (DA) usando electrodos convencionales. Esta es la razón primordial para determinar (DA) en la presencia de (AA) y (AU). Este trabajo presenta un método sensible para la determinación de dopamina sobre un electrodo modificado con el complejo Co-bdpmz disperso en nanotubos de carbono con nafion. La presencia del complejo de cobalto sobre superficie del electrodo modificado aumentó la corriente de oxidación en casi un 60% y facilita la reducción de dopamina oxidada, permitiendo que el proceso se vuelva reversible en comparación con el electrodo modificado únicamente con nanotubos de carbono, donde el proceso es irreversible. Voltamperometría cíclica e impedancia electroquímica fueron usadas para caracterizar la superficie del electrodo modificado. Voltamperometría de onda cuadrada junto con el pH y otros parámetros; potencial de adsorción, tiempo de adsorción se optimizaron para la cuantificación de dopamina: pH 2,0; Eads, 0.10 V; tads, 60 s. El límite de detección fue de 9.5×10^{-8} mol L⁻¹ y la RDS fue del 2.0%. El nuevo método se utilizó para cuantificar la dopamina en muestras de orina con resultados aceptables. (AA) y (AU) no interfieren con el análisis de dopamina.

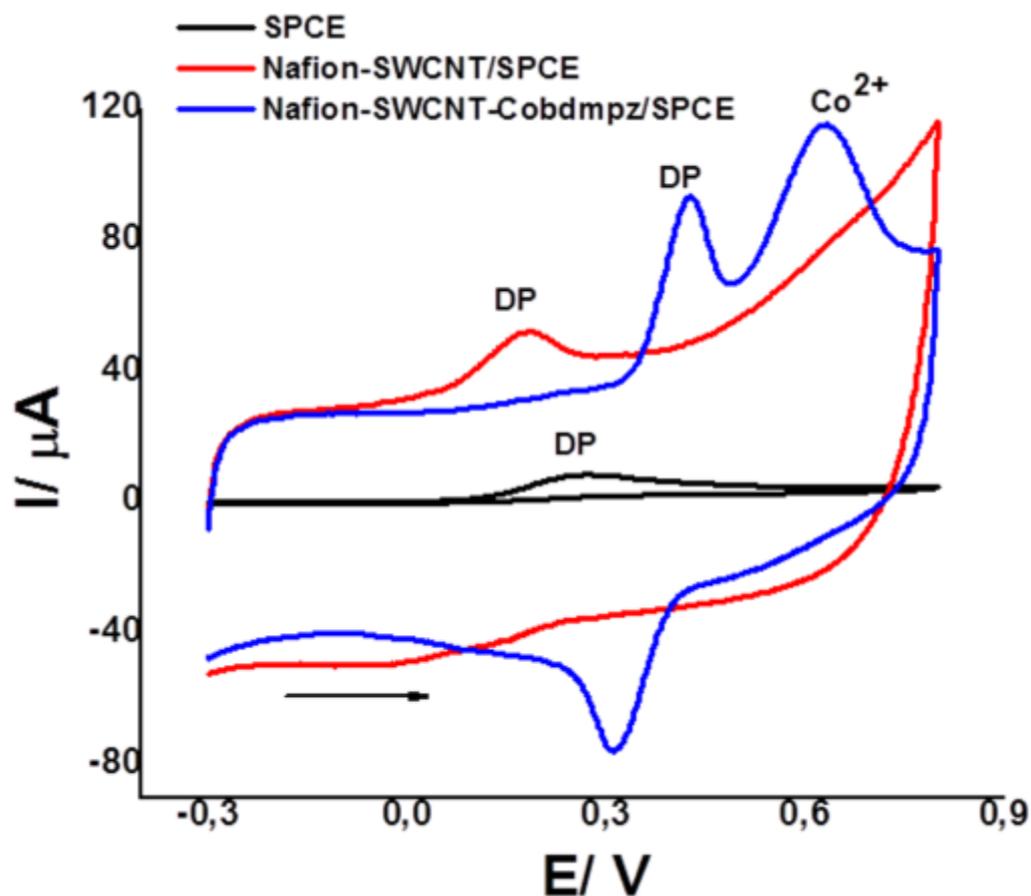


Figura1. Voltamperogramas cíclicos de 0.5 mmol L⁻¹ de (DP), pH 2.0 y 100 mVs⁻¹ usando diferentes electrodos.

Palabra clave: Voltamperometría de adsorción, nanotubos de carbono, nafion, ácido ascórbico, ácido úrico.

UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA

Determinación de resistencia o susceptibilidad a insecticidas en el mosquito *Aedes aegypti* en Florencia-Caquetá

Laura Camila Polania, Clemencia Serrato Hurtado, Elkin Tilvez Marrugo

Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Grupo de Investigación
Estrategias Computacionales en Química, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

Email: lau.polania@udla.edu.co

Resumen

La actividad de los vectores transmisores de enfermedades ha sido controlada desde el siglo XIX mediante el uso de insecticidas, pero su uso prolongado e indiscriminado ha generado problemáticas ambientales y tolerancia en los vectores a las dosis mortales. El control de *Aedes Aegypti* en la Ciudad de Florencia, radica principalmente en la aplicación de insecticidas como dimilín, deltametrina, malatión y temefós para erradicar tanto las fases inmaduras como adultas del insecto y disminuir la incidencia de enfermedades transmitidas por la especie. Sin embargo, estas medidas podrían no ser suficientes para reducir las poblaciones del vector, dado que se desconoce su estado de susceptibilidad a los insecticidas utilizados para su control. Por lo anterior, se ha encaminado un estudio para evaluar y determinar la susceptibilidad a los insecticidas dimilín, deltametrina, malatión y temefós del mosquito *Aedes aegypti* colectado en la zona urbana de Florencia (Caquetá), mediante ensayos biológicos establecidos por la OMS [1], el cual puede brindar información clave para la vigilancia de la resistencia en el Departamento de Caquetá.

Se emplearon tres réplicas (20 larvas por cada réplica) para cada dosis diagnóstica establecida por el Instituto Nacional de Salud de Colombia. Se realizaron bioensayos preliminares con los larvicidas temefós y dimilín, suministrados por la Secretaría Departamental de Salud del Caquetá y la Secretaría Municipal de Salud de Florencia, en la cepa Rockefeller, utilizada como referente por no haber sido expuesta a ningún producto químico, y en la generación F2 de la colonia *Aedes Aegypti* establecida en el

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

laboratorio, que fue colectada en el Barrio Juan XXIII (1° 36'28.7"N y 75°36'40.02"O) en una zona que presenta condiciones epidemiológicas favorables para la proliferación del vector, en la ciudad de Florencia, Departamento de Caquetá, e identificada en el laboratorio de biología de la Universidad de la Amazonia, utilizando las claves de mosquitos propuestas por Rossi & Almirón (2004)[2].

Las réplicas de la población larval de estudio evaluada a las concentraciones de 0.1 y 0.125ppm de temefós presentaron una mortalidad entre 80 y 100%. Teniendo en cuenta el criterio de la OMS, las larvas son susceptibles al insecticida a las concentraciones. Mientras que la población larval evaluada a las concentraciones 100, 200, 300, 400 y 500ppm de dimilin presentaron una mortalidad entre el 0-17%, tanto en la cepa silvestre como en la Rockefeller.

A pesar de estos importantes resultados, queda por establecer la concentración letal para cada insecticida mediante la línea base con la cepa Rockefeller para determinar la resistencia o susceptibilidad a los insecticidas en la población silvestre.

Palabras clave: *Aedes aegypti*; control químico; resistencia a insecticidas; vectores de enfermedades.

Referencias

[1] Organization, W.H. 2012. Global Strategy for dengue prevention and control, 2012–2020. En línea. Consultado en: diciembre 11 de 2016. Disponible en: <http://www.who.int/denguecontrol/9789241504034/en>.

[2] Rossi, R. and Almirón, W. 2004. Clave ilustrada para la identificación de larvas de mosquitos de interés sanitario encontradas en criaderos artificiales en la Argentina. Serie Enfermedades transmisibles. Fundación Mundo Sano, Buenos Aires (Argentina). 49p.

Degradación de la Fluoxetina vía Foto Fenton solar

Carolina Quimbaya Ñañez, Lis Manrique Losada

Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básica, Programa de Química, Grupo de Investigación Materiales, Ambiente y Desarrollo MADE, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

Email: lismanrique@gmail.com

Resumen

La presencia de compuestos farmacéuticos en ambientes acuáticos, incluso a concentraciones relativamente bajas (ng L^{-1} de $\mu\text{g L}^{-1}$), plantea peligros potenciales para la salud humana y el medio ambiente. La mayoría de estos contaminantes no se degradan por completo en las aguas residuales y plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR) [1]. La Fluoxetina (FLX), es un fármaco conocido como Prozac®, que se utiliza para el tratamiento de la depresión y ansiedad generalizada y ha sido encontrado en aguas residuales y catalogado como contaminante emergente, es decir una sustancia recalcitrante y tóxica en concentraciones al nivel de trazas. Para la degradación, oxidación y mineralización de FLX deben considerarse procesos de oxidación fuerte.

En este trabajo de investigación se evaluó la degradación de 100 mL de una solución de FLX (40 mg.L^{-1}) en solución acuosa, mediante un proceso de oxidación avanzada conocido como foto-Fenton solar (FFS). Se determinaron los porcentajes de degradación (seguimiento de la concentración de FLX por HPLC) y mineralización (seguimiento del COT) a tres concentraciones de Fe^{2+} (1.8, 9 y $90 \mu\text{M}$) con una concentración de $1000 \mu\text{M}$ de H_2O_2 , manteniendo una agitación constante durante 2 h. Los experimentos se realizaron a pH ácido (3.08) y pH natural (cerca de 6) para comparar la influencia del pH en el alcance de la degradación y mineralización. Para obtener la energía promotora del proceso FFS se trabajó en días soleados y se midió la energía acumulada con un radiómetro Solar Light® PMA2100 Data Logging con sensores para UV y luz visible acoplados.

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

Cuando se usó la concentración de 9 μM de Fe^{2+} , no se encontraron diferencias significativas entre los porcentajes de degradación a pH ácido o pH natural (80% y 73% respectivamente). A esta concentración de Fe^{2+} se logró un 44% de mineralización a pH ácido y un 25% a pH natural, con energías acumuladas de 835 y 1.269 $\text{kJ L}^{-1} \text{m}^{-2}$ respectivamente, con un alcance de la oxidación (% de remoción de DQO) de 66% y 12.8% respectivamente. Se observó que, a pesar de alcanzar la degradación de la FLX en las dos condiciones de pH, la mayor oxidación y mineralización de la FLX se da a pH ácido con menor cantidad de energía acumulada. Es claro que el Fe^{2+} , que alcanza a estar en solución por un tiempo corto, logra el rompimiento de enlaces que obligan a la aparición de subproductos de degradación, sin embargo, ellos no se oxidan o mineralizan aún con más energía. Éste comportamiento se atribuye a la formación de los complejos de hidróxidos que se presentan a pH por encima de 3. Con 90 μM de Fe^{2+} se observó una influencia del pH en la mineralización, alcanzando un 83% a pH ácido y un 65% a pH natural con energías acumuladas de 1.220 y 1.081 $\text{kJ L}^{-1} \text{m}^{-2}$, respectivamente, con una oxidación hasta de 50% y 44%, respectivamente. Finalmente, a 1.8 μM de Fe^{2+} la degradación de la FLX fue menor en comparación a las otras dosis de Fe^{2+} utilizadas, no se evidenció una diferencia significativa cuando se realizó a pH ácido y natural, con un 44% y 40% de degradación con energías acumuladas de 1.249 y 981 $\text{kJ L}^{-1} \text{m}^{-2}$, respectivamente. A esta dosis de Fe^{2+} se obtuvo un 24% (pH ácido) y un 10% (pH natural) de mineralización, con una DQO de 74% y 33%, respectivamente.

La degradación vía FFS de la FLX con 90 μM de Fe^{2+} presenta mayor eficiencia de mineralización a pH ácido alcanzando un valor del 83%. A pH natural se alcanza degradación mas no mineralización de FLX.

Palabras clave: fluoxetina; Foto Fenton solar; degradación de fármacos; mineralización de fármacos, radiación solar.

Diseño de pilares de Al y AlFe a partir del ión *Keggin*, para catalizadores heterogéneos con estructura laminar

Cesar Ramos Sanabria, Lis Manrique Losada, Mauricio Espitia-Sibaja

Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básica, Programa de Química, Grupo de Investigación Materiales, Ambiente y Desarrollo MADE, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

Email: h.espitia@udla.edu.co

Resumen

El diseño de catalizadores heterogéneos se enfoca en obtener materiales que presenten alta actividad y selectividad en una reacción, mediante el control de las propiedades fisicoquímicas, estructurales, texturales, morfológicas y térmicas del catalizador.

El control de la textura y la morfología de un catalizador, permite obtener materiales con buenas propiedades difusionales (adecuada área superficial y distribución de poros) para el transporte de las moléculas reactantes. Una de las metodologías de síntesis de catalizadores altamente porosos es la modificación vía pilarización o delaminación de estructuras laminares, donde adicionalmente se confiere una mayor estabilidad térmica y/o mecánica al material, además de mayor exposición de sitios activos.

Los procesos de pilarización o delaminación se basan en un mecanismo de intercambio catiónico, en donde se introducen moléculas inorgánicas (policationes) en el espacio interlaminar. El polication $\text{AlO}_4\text{Al}_{12}(\text{OH})_{24}(\text{H}_2\text{O})_{12}^{7+}$ (Ión *Keggin*) es una especie que posee una estructura simétrica, constituida de un átomo de Al central en coordinación tetraédrica, rodeado de 12 átomos de Al en coordinación octaédrica. Esta estructura permite la sustitución isomórfica del Al por otras especies con actividad catalítica.

**VI Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia
Florencia - Caquetá, mayo 10-12, 2017**

Con base en el contexto descrito, en este trabajo se sintetizaron agentes pilarizantes de Al y AlFe a partir de la modificación del ión *Keggin* y se emplearon en la modificación vía pilarización y delaminación de una arcilla natural. Mediante análisis espectroscopia de energía dispersiva de rayos X se cuantificó el contenido de Al y Fe en sólidos sintetizados; se evidenció la formación del ión *keggin* mediante análisis estructural por difracción de rayos X y se confirmó la morfología mediante microscopía de barrido electrónico.

Palabras claves: Pilarización; ión Keggin; Catalizador.



**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

Estudio teórico del mecanismo de la reacción Diels-Alder de euparin y ésteres acetilénicos activados.

Cesar Serrato Hurtado, Elkin Tilvez Marrugo, Francis Sanchez Garzón.

Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Grupo de Investigación Estrategias Computacionales en Química, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

Email: Ce.serrato@udla.edu.co

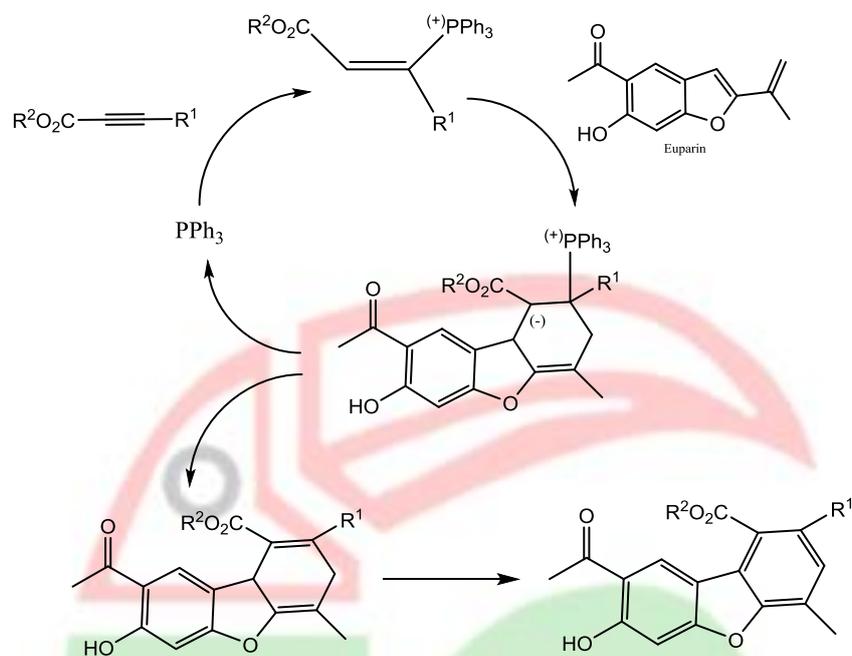
Resumen

En el presente trabajo, se ha explorado el mecanismo teórico de reacción para la síntesis de un dibenzofurano sustituido a partir de euparin con ésteres acetilénicos por medio de una reacción de Diels-Alder (Esquema 1.), la cual se basa en una publicación de P. Dastoorani, et Al. (*synthesis of a new dibenzofuran derivatives via Diels-Alder reaction of euparin with activated acetylenic esters*. P. Daastorani, et al. 3, zahedan : Teraedron Letters, 2016, Vol. 57.). Los cuales han propuesto un mecanismo de reacción que consiste en la activación del ester acétilénico por parte de un catalizador de trifenilfosfina, los cuales reaccionan con euparin por medio de la reacción Diels-alder, que produce un intermediario con un carbono con hibridación sp^3 en el anillo del dibenzofurano, el cual se estabiliza con la eliminación del catalizador y recupera la aromaticidad por una oxidación con O_2 del medio.

Actualmente se han realizado simulaciones de algunos intermedios con el funcional B3LYP con un nivel de teoría de 6-31G**, utilizando el programa ORCA. Al realizar la simulación del intermediario en fase gas, evaluando el efecto solvente con agua y tolueno, se logra apreciar que el intermediario de reacción no puede estabilizarse, ya que forma un carbono con una configuración sp^3 el cual está unido al catalizador de trifenilfosfina, uno de los grupos R y a los dos carbonos con los cuales se formó el ciclo.

Por lo cual, se propuso un mecanismo, a pesar de no ser completo, se confirmó teóricamente la presencia de un posible intermediario de reacción con un anillo de 5

miembros entre el centro de reacción de las dos moléculas, un grupo funcional carbonilo presente en el euparin y el fósforo del catalizador de trifenilfosfina.



Esquema 1. Mecanismo de reacción propuesto experimentalmente.

Palabras clave: Dibenzofurano; Estudio teórico de reacción; PPh_3 ; Reacción Diels-Alder.

UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA

Caracterización Fitoquímica Del Extracto Hidroalcohólico Del Fruto De *Bromelia pinguin* Y Evaluación De Su Actividad Antifúngica Frente A un Hongo Aislado del Fruto de Cacao (*Theobroma cacao L.*) en Estado de Pudrición.

Andrés Felipe Lugo Vargas^a, Daniela Tarrá Jaramillo^a, María Natali Nieto Guzmán^b y * Jhon Ironzi Maldonado Rodríguez^a

^a Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Grupo de Investigación Bioprospección de los Productos Naturales Amazónicos. Barrio el Porvenir Cra 17, Cl 17, Diagonal 3F., A.A. 192. Florencia, Caquetá, Colombia

^b Laboratorio de Fitopatología del centro de investigaciones Amazónicas SINCHI, Florencia-Caquetá, Colombia, COP. 180001-180009

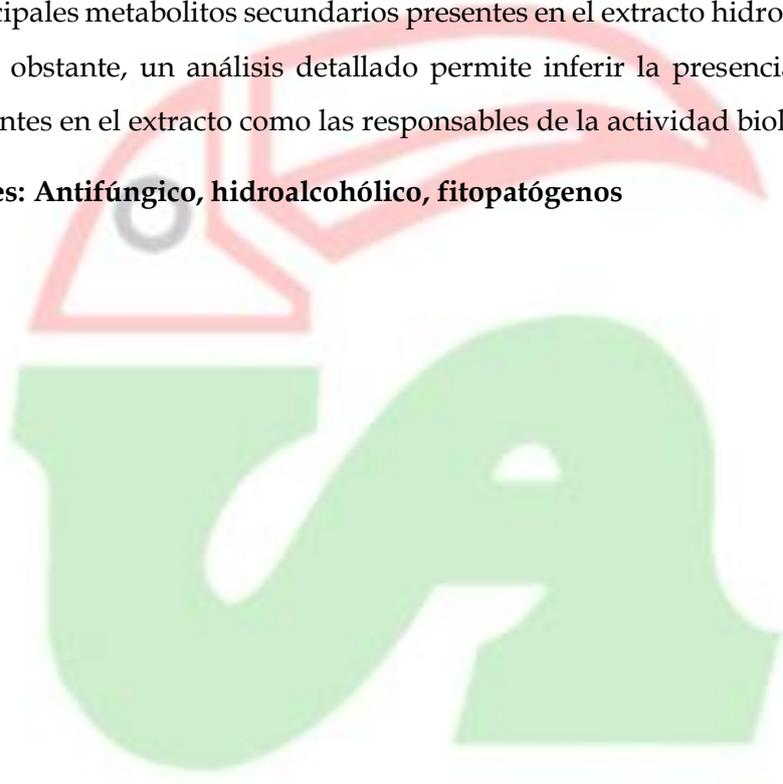
Email: j.maldonado@udla.edu.co

RESUMEN

Las enfermedades causadas por hongos fitopatógenos son uno de los mayores problemas que afrontan los cultivadores de cacao en el mundo que pueden generar pérdidas enormes pérdidas económicas. En Colombia el hongo fitopatógeno *Moniliophthora roreri* es causante de la enfermedad denominada *Moniliasis* o pudrición acuosa que puede causar pérdidas hasta del 90 % de la producción de Cacao. Los fungicidas de síntesis química para el control de este tipo de patógenos no son del todo satisfactorios y su alta frecuencia de uso está asociado a la contaminación ambiental y a mayores costos de producción que resulta antieconómico para el cacaotero. Como una alternativa, los plaguicidas naturales han sido usados en la agricultura para el manejo de problemas fitosanitarios ya que muestran algunas ventajas como su poder biodegradable y bajos efectos nocivos para la salud del hombre y el medio ambiente. Esto sin duda ha despertado un interés creciente en la búsqueda de nuevos fungicidas naturales, siendo las plantas una fuente potencial de este tipo de plaguicidas dada su amplia diversidad de metabolitos secundarios.

En este sentido, se evaluó en este trabajo el extracto hidroalcohólico de fruto de *B. pinguin* frente a un hongo aislado a partir de frutos enfermos en estado de pudrición de Cacao (*Theobroma cacao* L.) mediante un ensayo de inhibición de crecimiento micelial empleando el método de dilución en agar. El extracto tuvo un efecto antifúngico bastante notorio en un rango de concentraciones entre 2,5 y 10 % (V/V) y se pudo evidenciar además una fuerte relación dosis-respuesta. Un análisis fitoquímico preliminar, permitió identificar flavonoides, antraquinonas, taninos, saponinas y glucósidos cardiotónicos como los principales metabolitos secundarios presentes en el extracto hidroalcohólico de *B. pinguin*, no obstante, un análisis detallado permite inferir la presencia de algunas enzimas presentes en el extracto como las responsables de la actividad biológica.

Palabras claves: Antifúngico, hidroalcohólico, fitopatógenos



**UNIVERSIDAD DE LA
AMAZONIA**

Estudio de la Reactividad de las Moléculas *Casearvestrin* (A, B, C) Mediante la Función Fukui.

Michael Zambrano Angulo, Elkin Tilvez Marrugo

Universidad de la Amazonia, Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Grupo de Investigación Estrategias Computacionales en Química, Florencia-Caquetá, Colombia, Código postal 18007

Email: m.zambrano@udla.edu.co

Resumen

El cáncer es una enfermedad que afecta a miles de personas en el mundo por lo cual se hace necesario buscar alternativas para su tratamiento y control, en la región amazónica se encuentran una gran diversidad de plantas que son usadas por los habitantes y gente del común para el tratamiento de distintas enfermedades, una de ellas el cáncer. Una planta encontrada en la región amazónica y que según otros autores tiene actividad citotóxica es la especie *Casearia Sylvestris* Sw de la cual a partir de sus extractos se obtuvieron 3 componentes, casearvestrin A, B y C, siendo el objeto de estudio en el presente trabajo el casearvestrin A, con esta molécula se llevó a cabo la simulación computación para obtener los valores de las cargas de Mulliken y así obtener finalmente la función de Fukui la cual nos da a conocer los sitios reactivos de la molécula frente a los distintos ataques en una reacción química, según el método HF y la base 6-31G los sitios más reactivos fueron los átomos de carbono más cercanos a los átomos de oxígeno debido a la baja densidad electrónica de los mismos, también algunos átomos de oxígeno fueron encontrados como sitios reactivos de la molécula debido al par de electrones libres que este posee y que lo hace susceptible a reaccionar con otras moléculas

Palabras clave: Función de Fukui, HF, *Casearvestrin*