

# Memorias del VII Seminario Internacional de Química aplicada para la Amazonia “Química y Sostenibilidad”



**Del 7 al 11 de Octubre 2019**  
**Florencia - Caquetá**

**Editor: Liceth Natalia Cuéllar Álvarez**

**Organizadores:**



**FACULTAD DE  
CIENCIAS  
BASICAS**



**GRUPO  
INVESTIGACIÓN  
BPNA**



## COMITÉ ORGANIZADOR

Liceth Natalia Cuéllar Álvarez (Presidente)  
Gloria Magally Paladines Beltrán

## COMITÉ LOGÍSTICO

Anderson Scarpetta Anacona  
Anderson Fabián Murcia Polania  
Brayan Alexis Flórez Calderón  
Cristian Buendía Nopan  
Harol Esneyder Benites Cuellar  
Juan David González Olarte

Juan Diego Ramírez Castro  
Leicy Restrepo Cuellar  
Yasmin Daniela López Torres  
Yessi Katherine Díaz Becerra  
Zayra Samara Bastidas Ortiz

## COMITÉ CIENTIFICO

Camilo López Alarcón (Pontificia Universidad  
Católica De Chile, Santiago Chile)

Liceth Natalia Cuéllar Álvarez (Universidad De  
La Amazonia, Caquetá Colombia)

Francis Sánchez Garzón (Universidad De La  
Amazonia, Caquetá Colombia)

Lis Manrique Losada (Universidad De La Ama-  
zonía, Caquetá Colombia)

Gilda Guimarães Leitao (Universidad Federal  
De Rio De Janeiro, Rio De Janeiro Brasil)

Lisette Ruiz Bravo (Universidad De La Amazo-  
nia, Caquetá Colombia)

Gloria Magally Paladines Beltrán (Universidad  
De La Amazonia, Caquetá Colombia)

Luz Stella Nerio Quintana (Universidad De La  
Amazonia, Caquetá Colombia)

Guillermo Raúl Schinella (Universidad Nacional  
De La Plata, Argentina)

Mauricio Espitia Sibaja (Universidad De La  
Amazonia, Caquetá Colombia)

Hernán García López (Universidad De La Ama-  
zonía, Caquetá Colombia)

Nicolás Rodríguez Riaño (Universidad De La  
Amazonia, Caquetá Colombia)

Jaime Fernando Martínez Suarez (Universidad  
De La Amazonia, Caquetá Colombia)

Paula Galeano García (Universidad De La Ama-  
zonía, Caquetá Colombia)

Jhon Ironzi Maldonado Rodríguez (Universidad  
De La Amazonia, Caquetá Colombia)

Wilson Rodríguez Pérez (Universidad De La  
Amazonia, Caquetá Colombia)

Jose Hipolito Isaza Martinez (Universidad Del  
Valle, Cali Colombia)

# APOYADO POR:



FACULTAD DE  
CIENCIAS  
BÁSICAS



GRUPO  
INVESTIGACIÓN  
BPNA

# PATROCINADORES:

granaventura.co<sup>®</sup>



Consejo Profesional de Química Colombia



## PRESENTACIÓN

La región amazónica colombiana, se caracteriza por su biodiversidad y por tanto por el potencial químico que pueda contener cada especie que la habita, proyectándola como fuente de productos con valor agregado, un escenario propicio para adelantar investigación en áreas de la Química, como la Química de Productos Naturales, eje temático principal para esta nueva versión del SEQUIAMAZ.

De acuerdo a lo anterior, y con el interés de integrar la comunidad científica, académica y sector externo, durante los días comprendidos entre el 7 y el 11 de Octubre de 2019 se llevó a cabo el VII SEMINARIO INTERNACIONAL DE QUÍMICA APLICADA PARA LA AMAZONIA (VII SEQUIAMAZ), "Química y Sostenibilidad", desarrollado en la sede principal de la Universidad de la Amazonia (Florencia, Caquetá, Colombia). Este evento académico, propuesto desde la Facultad de Ciencias Básicas, junto con el Programa de Química de la Universidad de la Amazonia, se realizó con el objetivo de divulgar los resultados de trabajos científicos que abarcan todas las áreas de la Química, asimismo el impacto hacia sectores productivos de la región, y la proyección de la investigación en Química a nivel mundial, se contó con la presencia de invitados nacionales e internacionales, quienes dieron a conocer los resultados relevantes de sus investigaciones, su experiencia en la respectiva línea de investigación; y la intención de posible conformación de alianzas entre los grupos de investigación adscritos a la Universidad de la Amazonia, y grupos de investigación reconocidos internacionalmente.

De igual manera, se realizó II ESCUELA ANDINO-AMAZÓNICA DE QUÍMICA (II EAAQ); espacio en el que estudiantes, profesionales y docentes de Colombia, interesados en profundizar en temas específicos de la Química como Síntesis de Productos Naturales, Metabolómica, Radicales libres y antioxidantes, Caracterización de Metabolitos Secundarios, Diseño de Fármacos y Síntesis de Compuestos de Coordinación; formaron parte de la escuela, que se desarrolló días previos al (VII SEQUIAMAZ), cursos orientados por los conferencistas invitados, quienes son reconocidos por su amplio manejo en diferentes áreas de la Química, en esta ocasión haciendo énfasis en la Química de Productos Naturales.

Es así que con más de 10 plenarias internacionales y conferencistas nacionales de reconocida trayectoria investigativa, con más de 40 trabajos presentados por investigadores de Universidades Nacionales e Internacionales, se proyecta al SEQUIAMAZ, como un espacio que promueve la relación entre la investigación, y el sector productivo, en la búsqueda de conocer las propiedades biológicas y químicas de recursos naturales de la región amazónica Colombiana, junto con la conservación de los mismos.

Finalmente, agradezco a cada uno de los conferencistas, participantes, patrocinadores, comité científico, y logístico, quienes con su compromiso e interés, lograron la realización del VII SEQUIAMAZ-II EAAQ.

**LICETH NATALIA CUELLAR ALVAREZ**

Presidente Comité Organizador

Grupo de Investigación en Productos Naturales Amazónicos  
Universidad de la Amazonia

# SEMINARIO INTERNACIONAL VII SEQUIAMAZ EAAQ 2019

VII SEMINARIO INTERNACIONAL DE QUÍMICA APLICADA PARA LA AMAZONIA Y II ESCUELA ANDINOAMAZÓNICA DE QUÍMICA

“Química y sostenibilidad”

 **Cursos de la escuela**  
**7 y 8 Octubre 2019**

 **VII SEQUIAMAZ**  
**9,10,11 de octubre 2019**

**7 al 11 de octubre**  
**Auditorio Angel Cuniberti**  
**Universidad de la Amazonia**  
Florenca (Caquetá), Colombia

## Ejes Temáticos

- Química de Productos Naturales
- Materiales y Estado Sólido
- Química Computacional
- Química de Alimentos
- Química Ambiental
- Química Agrícola
- Síntesis Química
- Bioquímica

**MAYOR INFORMACIÓN:**  
Programa de química - Universidad de la Amazonia

Correo electrónico:  
sequiamaz@uniamazonia.edu.co  
<https://bit.ly/2Fr9mAv>

ESCANÉAME



Contacto: Natalia Cuéllar Álvarez / Teléfono de contacto 321 414 5675

## Ponentes invitados



**Edwin G. Pérez Hernández**  
Doctor en Química, Universidad de Chile.  
Docente Pontificia Universidad Católica de Chile



**Camilo López Alarcón**  
Doctor en Química, Universidad de Chile.  
Docente Pontificia Universidad Católica de Chile



**Fabián Harvey López Vallejo**  
Doctor en Ciencias, UNAM  
Docente Universidad Nacional de Colombia



**Cledir Santos**  
Doctor en Química Universidad de Oporto.  
Docente Universidad de la Frontera (Chile).



**Edwin Arley Baquero Velasco**  
Doctor en Química, Universidad de Alcalá.  
Docente Universidad Nacional de Colombia



**Yenny Patricia Avila Torres**  
Doctora en Ciencia e Ingeniería de Materiales, UNAM  
Docente Universidad Santiago de Cali



**Jose Hipolito Isaza Martinez**  
Doctor en Química de Productos Naturales,  
Universidad de Okayama  
Docente Universidad del Valle



**Gilda Guimaraes Leitão**  
Doctora en Química de Productos Naturales,  
Universidad Federal de Río de Janeiro.  
Docente Universidad Federal Río de Janeiro.

### PATROCINA:

 **Lab Instruments s.a.s.**  
Soluciones para la Ciencia

 **granaventura.co**

 **CPQCOL**  
Consejo Profesional de Química Colombia

 **PAF**  
Purificación y Análisis de Flujos Ltda.

 **SOCIEDAD  
COLOMBIANA  
DE CIENCIAS  
QUÍMICAS**

 **ElicoQuímica**  
EQI SAS  
Integral S.A.S.

 **Universidad de la  
Amazonia**  
Vigilada Mineducación

 **FACULTAD DE  
CIENCIAS  
BÁSICAS**

 **Programa de  
Química**

 **GRUPO  
INVESTIGACIÓN  
BPNA**

# CONTENIDO

## PLENARIAS

|   |           |
|---|-----------|
| Valorización de subproductos agroindustriales .....   | <b>11</b> |
| Hongos filamentosos y micotoxinas en ají merkén .....   | <b>12</b> |
| Las proteínas como blanco de especies reactivas: mecanismos de oxidación y consecuencias biológicas .....             | <b>13</b> |
| El Cobre como catalizador: Bueno, Bonito y Barato .....   | <b>14</b> |
| Estudios computacionales de diversidad estructural en la identificación de moléculas bioactivas .....                 | <b>15</b> |
| Complejos Metálicos Solubles en Agua con Ligandos Carbeno N-Heterocíclico: De la Catálisis a las Nanopartículas ..... | <b>16</b> |
| #CCC_Rocks! .....   | <b>17</b> |
| Bioinorgánica como herramienta para el diseño de materiales en el contexto energético y salud ambiental .....         | <b>18</b> |

## PRESENTACIONES ORALES

|   |           |
|---|-----------|
| Acumulación de fitoalexinas isoflavonoide en frijol común ( <i>Phaseolus vulgaris</i> L.) por aplicación de potenciales elicitores sintéticos ..... | <b>20</b> |
| Aislamiento, Identificación y evaluación biológica de lipooligosacáridos de origen natural .....  | <b>21</b> |
| Aprovechamiento de biomasa proveniente de semillas de <i>Hevea brasiliensis</i> (caucho) en la producción biodiesel .....                           | <b>22</b> |
| Control biológico in vitro de <i>Monilliophthora roreri</i> Cif & Par con el extracto etanólico de <i>Piper peltatum</i> .....                      | <b>23</b> |

|  |           |
|--|-----------|
| Determinación de la calidad físico-química de la Quebrada el Dedo (Floresca-Caquetá), en relación con los uso del suelo .....  | <b>24</b> |
| Diseño de un modelo QSAR para predecir nuevos derivados de Quinoxalinas 2,3 disustituidas con posible actividad Leishmanicida .....  | <b>25</b> |
| Estudio de las Interacciones de Derivados de Tipifarnib con el Sitio de Unión de la Enzima CYP51.....  | <b>26</b> |
| Estudio y observación de propiedades fisicoquímicas de lulo de castilla ( <i>Solanum quitoense Lam</i> ) en el sur del departamento del huila-colombia .....                         | <b>27</b> |
| Evaluación comparativa de riego sistematizados de una solución nutritiva vs agua, en forraje verde hidropónico de maíz ( <i>Zea mays</i> ). .....                                    | <b>28</b> |
| Evaluación computacional de la remoción de iones de metales contaminantes por derivados de terpiridinas mono-sustituidas.....  | <b>29</b> |
| Evaluación de componentes bioactivos de mucílago de café y extractos de pita-haya ( <i>Hylocereus megalanthus</i> ) con potencialidad funcional en industria alimentaria .....       | <b>30</b> |
| Evaluación de un extracto de copoazú (COPE) para mejorar la reacción foto Fenton solar a pH natural y degradar fármacos presentes en aguas residuales municipales. ....              | <b>31</b> |
| Evaluación teórica del mecanismo de reacción Diels-Alder para la síntesis de dibenzofuranos sustituidos. ....  | <b>32</b> |
| Evaluación teórica de metabolitos aislados de la especie <i>Casearia Sylvestris SW</i> para comprender su reactividad como fármacos potenciales para el tratamiento del cáncer ..... | <b>33</b> |
| Foto-Electro-Fenton solar para la degradación de fármacos presentes en aguas residuales municipales. ....  | <b>34</b> |
| LC-MS and MALDI-MS untargeted metabolomics of tomato ( <i>Solanum lycopersicum</i> ) infected by <i>Phytophthora infestans</i> .....   | <b>35</b> |
| Liberación Controlada de Herbicidas MCPA y Paraquat Utilizando Silicatos Laminares de Alta Carga Funcionalizados .....   | <b>36</b> |

Atributo sensorial del café y su relación con las características químicas del suelo ..... **37**

Comportamiento electroquímico de colorantes antraquinónicos en solución de solventes no-acuosos ..... **38**

Remoción de fármacos presentes en aguas residuales municipales mediante tratamiento biológico: efecto del medio de reacción y de la estructura química ..... **39**

## **PRESENTACIONES FORMATO POSTER**

Determinación de la capacidad de adsorción de  $\text{Co}^{2+}$  sobre una Arcilla Natural del Caquetá modificada con Cisteína ..... **41**

Evaluación computacional del efecto sustituyente en la reacción de protección entre benzaldehídos sustituidos y glicerol ..... **42**

Derivados halogenados y nitrados de fenantro[9,10-c][1,2,5] tiadiazol 1,1-dióxido. Síntesis, caracterización y radicales aniones..... **43**

Empleo de TGA para la elección de condiciones de reacción en síntesis orgánica ..... **44**

Comparación de tres compuestos como coagulantes para la obtención de caucho a partir de látex del árbol *Hevea brasiliensis*. ..... **45**

Glutelinas de chachafruto (*Erythrina edulis*) como fuente proteica alternativa . **46**

Efecto del trolox y ácido ascórbico sobre el comportamiento electroquímico de ABTS..... **47**

Efecto del nivel de radiación solar sobre el sistema de defensa antioxidante enzimático de *Theobroma cacao* ..... **48**

Docking molecular de la chalcona 1-(p-nitrofenil)-3-(1,3,5-trimetoxifenil)-2-propenona con la enzima CYP51 de *Candida krusei* ..... **49**

Desarrollo de un nuevo sensor electroquímico basado en un electrodo de pasta de carbono decorado con  $\text{Nd}_2\text{O}_3$  para la detección simultánea de TZ y SY ..... **50**

|  |           |
|--|-----------|
| Oxidación biológica aerobia y anaerobia de fármacos presentes en aguas residuales municipales de Florencia Caquetá .....                                 | <b>51</b> |
| Aislamiento, Caracterización y Evaluación Biológica de las Resinas Glicosídicas de <i>Ipomoea purpurea</i> .....   | <b>52</b> |
| Determinación de un método para la extracción y cuantificación de DMT por Cromatografía de gases masas (CG-MS) en pócimas de Yagé .....                  | <b>53</b> |
| Perfil de ácidos grasos de lípidos totales de semilla de <i>Theobroma cacao</i> provenientes del departamento del Huila, usando prensado artesanal ..... | <b>54</b> |
| Evaluación teórica de las interacciones moleculares del glifosato presentes en solución acuosa .....   | <b>55</b> |
| Síntesis de una serie de bases de Schiff del tipo N,N'bis(benciliden) etanamina, potencialmente activas frente a bacterias patógenas .....               | <b>56</b> |
| Extracción, purificación y caracterización de arcilla natural del Departamento de Caquetá y su potencial Aplicación en la adsorción de Cobre. ....       | <b>57</b> |
| Determinación de las propiedades Antiofídicas del extracto metanólico de <i>Petiveria alliacea</i> frente al veneno de <i>Bothrops atrox</i> . ....      | <b>58</b> |
| Estudio de fitorremediación de metales pesados utilizando macrófitos flotantes: Lemna minor.....   | <b>59</b> |
| Estudio antibacteriano de los compuestos sintetizados de benzimidazol y derivado de 1,3-dihidropirimidinona .....  | <b>60</b> |
| Prototipo de sistematización de riego para un cultivo de forraje verde hidropónico .....   | <b>61</b> |
| Grupos de investigación .....  | <b>62</b> |
| Reconocimiento .....   | <b>63</b> |

# PLENARIAS

## Valorización de subproductos agroindustriales

**Andrea del Pilar Sánchez-Camargo<sup>a</sup>, Diego Ballesteros-Vivas<sup>a</sup>, Elena Ibáñez-Ezequiel<sup>b</sup>, Alejandro Cifuentes-Gallego<sup>b</sup>, Fabián Parada-Alfonso<sup>a,\*</sup>**

<sup>a</sup>Grupo de Investigación en Química de Alimentos-GICA de la Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia-UN, Bogotá, Colombia, 111321

<sup>b</sup>Grupo de Alimentómica (Foodomics) del Instituto de Investigación en Ciencias de la Alimentación-CIAL, Universidad Autónoma de Madrid-UAM/Consejo Superior de Investigaciones Científicas-CSIC, Madrid, España, 28049

\*Email: fparadaa@unal.edu.co

### Resumen

Implementar procesos químicos sustentables y sostenibles es una estrategia en pro de cumplir los objetivos de desarrollo sostenible-ODS, un ejemplo de ello consiste en aplicar técnicas de extracción amigables con el medio ambiente a residuos agroindustriales. De tal forma, la integración, secuenciación e intensificación de los procesos de extracción, empleando disolventes tipo GRAS (Generally Recognized as Safe), son herramientas que fortalecen la economía circular y la generación de biorefinerías. Dada la vocación agrícola de nuestro país, las técnicas verdes de extracción pueden aportar a la generación de valor agregado; bajo este horizonte, las cadenas de valor que logren abordar este modelo de desarrollo, alcanzarán mejores resultados socio-económicos y ambientales, posicionando un sector agroindustrial más competitivo.

Al someter residuos agroindustriales a técnicas de extracción que emplean fluidos presurizados (fluidos supercríticos o líquidos presurizados), es posible obtener extractos promisorios dada su bioactividad, su composición o su rendimiento; los respectivos resultados se contrastan con los obtenidos al emplear técnicas de extracción clásicas.

El GICA de la UN ha planteado rutas que podrían generar valor agregado para algunos productos agrícolas (p.e. cacao, cannabis, o frutas como guayaba, mora, papaya, tomate de árbol), las cuales consisten en someter cada biomasa a extracción con fluidos supercríticos-SFE (con CO<sub>2</sub> o con CO<sub>2</sub> modificado con cosolventes), o a extracción con líquidos presurizados-PLE. Mas recientemente, estudios colaborativos entre el GICA con el grupo Foodomics del CIAL-UAM/CSIC ha aportado a las posibles biorefinerías del mango y de la uchuva. A los extractos obtenidos se les ha determinado su potencial uso como antioxidantes, larvicidas o como agentes antiproliferativos frente a determinadas líneas celulares de cáncer. Con el panorama anterior, se aporta a un mejor aprovechamiento de residuos agrícolas, proponiendo procesos que pretenden obtener extractos bioactivos con potenciales aplicaciones en otros sectores como son la industria alimentaria, cosmética o farmacéutica, bajo la visión de un desarrollo sostenible.

**Palabras clave:** Química verde; ODS; valorización de residuos agrícolas; extracción con fluidos presurizados, supercritical fluids extraction, pressurized liquids extraction.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Hongos filamentosos y micotoxinas en ají merkén

**Jéssica Costa<sup>a</sup>, Rodrigo Rodríguez<sup>a, b</sup>, Carla Santos<sup>b</sup>, Célia Soares<sup>b</sup>, Nelson Lima<sup>b</sup>, Cledir Santos<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Laboratorio de Química de Hongos, Departamento de Ciencias Químicas y Recursos Naturales, Universidad de La Frontera, Temuco 4811-230, Chile

<sup>b</sup>CEB-Centre of Biological Engineering, Micoteca da Universidade do Minho (MUM), University of Minho, Campus de Gualtar, 4710-057 Braga, Portugal

### Resumen

Las micotoxinas son metabolitos secundarios producidos por hongos filamentosos. La Ocratoxina A (OTA) y las Aflatoxinas (AFs) son micotoxinas altamente tóxicas y carcinógenas que se encuentran como contaminantes en alimentos para humanos y animales. El *Capsicum* (ají o pimiento) es un género de plantas, dicotiledóneas nativo de las regiones tropicales y subtropicales de América, pertenecientes a la familia de las solanáceas. En Chile, el cultivo de *Capsicum annuum* L. cv. "Cacho de Cabra" se extiende desde la Región de Arica y Parinacota hasta la Región de La Araucanía, correspondiendo a 9 de las 16 Regiones del país y cubriendo aproximadamente 522 hectáreas de área plantada. Las bayas del ají Cacho de Cabra se utilizan para la producción de un polvo rojo tradicional conocido como Merkén, que es un aliño picante con sabor ahumado. El Merkén es un producto intrínsecamente asociado con el grupo étnico ancestral Mapuche. Al igual que con cualquier otro producto agroalimentario, las bayas del ají Cacho de Cabra y el Merkén procesado también son susceptibles a la infección por hongos que pueden generar contaminación con micotoxinas. Cepas de *Alternaria*, *Aspergillus*, *Cladosporium*, *Fusarium*, *Penicillium* y *Rhizopus* son contaminantes comúnmente halladas en bayas de *Capsicum* y en sus productos derivados. Entre éstas, cepas de los géneros *Aspergillus*, *Fusarium* y *Penicillium* son las más importantes en términos de capacidad de producción de micotoxinas en dicha matriz alimenticia. En 2017, el Ministerio de Salud de Chile reportó dos casos de contaminación por Merkén con micotoxinas, principalmente OTA. Conocer los puntos de infección por hongos y de contaminación con micotoxinas en la cadena de producción del ají Cacho de Cabra y Merkén, sería una contribución para la implementación de buenas prácticas agroalimentarias, conduciendo a la solución de ese problema. Sin embargo, esa información no está todavía disponible. En ese contexto, el presente trabajo presentará los resultados del potencial micotoxigénico de la microbiota perteneciente a los géneros *Aspergillus* y *Penicillium* aislada en los diferentes puntos de la cadena de producción tradicional del ají Cacho de Cabra y del Merkén y posibles puntos de contaminación con OTA y AFs. Además, se discutirán las interacciones ecológicas entre los hongos micotoxigénicos y las bayas de *Capsicum annuum* L. cv. "Cacho de Cabra" y del Merkén.

**Palabras clave:** Ocratoxina, Aflatoxina, cáncer.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Las proteínas como blanco de especies reactivas: mecanismos de oxidación y consecuencias biológicas

**Camilo López Alarcón<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Pontificia Universidad Católica de Chile, Facultad de Química y de Farmacia, Departamento de Físicoquímica, Santiago, Chile, C.P. 7820436

\*Email: clopezr@uc.cl

### Resumen

Debido a su alta concentración en fluidos, células y tejidos, las proteínas son uno de los principales blancos de especies reactivas en medios biológicos. Su oxidación se ha relacionado con la etiología de diferentes procesos fisisiológicos, como también al deterioro oxidativo de algunos alimentos. La reacción de una especie reactiva con proteínas lleva inicialmente a la formación de radicales libres secundarios (en la proteína) desde los que, a través de diferentes rutas mediadas por O<sub>2</sub>, se forman productos finales de oxidación. Entre éstos últimos destacan hidroperóxidos, grupos carbonilo y alcoholes. Adicionalmente, reacciones radical-radical llevan a la formación de dímeros, trímeros y agregados proteicos de alta masa molecular, los que se han asociado con enfermedades degenerativas (destacando algunas patologías neurológicas). La multiplicidad de procesos, la interconexión entre ellos, y la diversidad química de los productos de oxidación, reflejan la complejidad de la investigación en el área. En particular, aquella enfocada a establecer los mecanismos químicos involucrados en la oxidación de proteínas y sus consecuencias funcionales y biológicas. En las proteínas los residuos de triptófano (Trp) y tirosina (Tyr) son unos de los blancos principales de oxidación; inicialmente se genera un radical libre en la posición 3 del anillo indólico de Trp (Trp•), y en la posición orto o para del fenilo de Tyr (Tyr•). Tanto Trp• como Tyr• pueden reaccionar consigo mismo para formar dímeros (Trp-Trp, o Tyr-Tyr) o entre ellos para formar aductos Trp-Tyr. Por ejemplo, se ha documentado que aductos Trp-Trp generados durante la oxidación del único residuo de Trp de la enzima superóxido dismutasa humana (hSOD-1), participan en la dimerización de la enzima lo que se ha asociado a la etiología de Esclerosis Lateral Amiotrófica. Este, y otros hallazgos, han impulsado el interés en la investigación acerca de los factores que median la formación de Trp-Trp, Tyr-Tyr o Trp-Tyr en diferentes proteínas expuestas a especies reactivas. Resultados obtenidos recientemente han mostrado que la oxidación de lisozima mediada por procesos fotosensibilizados inducidos por riboflavina (vitamina B<sub>2</sub>), o rosa de Bengala, deriva en la formación de dímeros lisozima-lisozima los que en parte se explican por la formación de Trp-Tyr. Dichas modificaciones son irreversibles y afectan fuertemente la funcionalidad (actividad catalítica) de lisozima. Por otra parte, contrariamente a lo esperado para proteínas con un alto grado de flexibilidad, el entrecruzamiento oxidativo de caseínas ( $\alpha$ - y  $\beta$ -) mediado por radicales peroxilo, no mostró relación con la formación de Trp-Trp, Tyr-Tyr o Trp-Tyr. Estos estudios reflejan la complejidad del área y la necesidad de estudiar los mecanismos químicos involucrados en cada sistema (especie reactiva – proteína) y las consecuencias biológicas de manera particular.

**Palabras clave:** Proteínas; Especies reactivas; Triptófano; Tirosina; Radicales libres.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## El Cobre como catalizador: Bueno, Bonito y Barato

**Edwin G. Pérez Hernández<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile.  
Santiago, Chile.

### Resumen

El cobre es un elemento químico conocido por la humanidad desde sus inicios. Existe evidencia que desde hace más de 10.000 años los humanos hemos utilizado este elemento en su forma pura, principalmente para la preparación de utensilios para la vida diaria y la guerra. Posteriormente, el cobre se mezcló con estaño para producir la aleación conocida como bronce. Esta aleación contiene principalmente cobre y estaño en menor proporción (3-20%). Esta aleación fue la primera de gran importancia ya que presenta mayor dureza que los metales puros por separado. Su uso en la agricultura, la caza y la guerra fue de gran importancia en los inicios de la humanidad y este período se conoce como la "Edad del Bronce". Otra aleación, aunque menos importante, es la obtenida al mezclar cobre y zinc: El latón. Chile posee las mayores reservas de cobre del mundo y también es el mayor productor del mundo en la actualidad. Sus principales clientes para la comercialización del cobre son China y USA. El cobre es muy usado actualmente gracias a que es muy dúctil, resistente a la oxidación, buen conductor del calor y la electricidad, propiedades antibacterianas, entre otras propiedades. Por otro lado, el cobre ha estado presente en la tierra desde los inicios de la vida, por lo que este elemento ha sido incorporado en procesos fisiológicos desde bacterias hasta seres superiores. La principal actividad en los organismos vivos está relacionada con la actividad catalítica de las enzimas, donde actúa como agente oxidante de especies orgánicas. En química orgánica, el cobre es utilizado como ácido de Lewis y en una gran variedad de reacciones catalizadas. Nuestro grupo de investigación se ha interesado en los últimos años en buscar nuevas reacciones catalizadas por sales de cobre, utilizando oxidantes interesantes como el NFSI y derivados de yodo hipervalente. En este proceso hemos reportado reacciones de aminofluoración, aminocloración, aminooxigenación y reacciones tipo "click". También hemos utilizado los productos obtenidos para utilizarlos como bloques de construcción o intermediarios en la síntesis de nuevos compuestos que bloquean la recaptura de monoaminas cerebrales que actúan como neurotransmisores. Este tipo de compuestos han sido tan activos como compuestos comercializados actualmente como antidepresivos.

**Palabras clave:** Cobre; Catálisis; Síntesis; Química Medicinal; Antidepresivos.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

# Estudios computacionales de diversidad estructural en la identificación de moléculas bioactivas

**Fabian López-Vallejo<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Universidad Nacional de Colombia, Bogotá D.C., Colombia, 11001  
Email: fhlopezv@unal.edu.co

## Resumen

El cribado virtual de grandes bibliotecas de moléculas es una de las principales herramientas en el proceso de descubrimiento de fármacos. En la actualidad es necesario identificar nuevas entidades químicas (New Chemical Entities, NCE) con el objetivo de expandir el espacio químico actual de los fármacos. En este sentido los estudios computacionales de diversidad química son de vital importancia antes de realizar un estudio de cribado virtual. En el presente trabajo se analizó computacionalmente la diversidad estructural, mediante el uso de huellas digitales moleculares, de 30 librerías combinatoriales y se compararon 2 librerías de productos naturales y 2 librerías de compuestos sintéticos, tomando como referencia la librería de fármacos del DrugBank. Adicionalmente se utilizaron las medidas de las fracciones de carbonos sp<sup>3</sup> y de carbonos quirales para evaluar la complejidad molecular.

Los resultados del análisis del espacio químico basado en la estructura indican que las librerías combinatoriales y las de productos naturales (Natural products, NP y Traditional Chinese Medicine, TCM) exploran áreas del espacio químico no explorado por las moléculas del DrugBank. El espacio químico basado en propiedades moleculares relacionadas a los parámetros farmacocinéticos (absorción, distribución, metabolismo y excreción, ADME) muestra que alrededor del 90 % de los compuestos de todas las librerías están dentro del espacio químico del DrugBank, mostrando que todas tienen un buen perfil farmacocinético. En términos de la complejidad molecular el estudio reveló que las librerías combinatoriales y de productos naturales presentan mayor complejidad sobre las librerías de compuestos sintéticos, mostrando que estas últimas tienden a tener estructuras con mayor cantidad de anillos aromáticos (estructuras más planas) y menor flexibilidad conformacional.

El estudio quimioinformático permite concluir que solo las librerías combinatoriales y de productos naturales contienen estructuras novedosas y poseen propiedades moleculares similares en comparación con las moléculas del DrugBank. La complejidad molecular, de las moléculas de estas librerías, permite inferir que se comportarán con mayor especificidad al momento de interactuar con un blanco molecular, haciéndolas más selectivas y probablemente con menor efectos secundarios. En términos generales, las librerías combinatoriales y de productos naturales representan una mejor alternativa para realizar estudios de cribado con el objeto de identificar moléculas bioactivas con estructuras novedosas y que puedan pasar a procesos posteriores del desarrollo de fármacos; estas moléculas tendrán una mayor posibilidad de convertirse fármacos de administración oral.

**Palabras clave:** Diversidad estructural; moléculas bioactivas; espacio químico; huellas digitales moleculares; cribado virtual

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Complejos Metálicos Solubles en Agua con Ligandos Carbeno N-Heterocíclico: De la Catálisis a las Nanopartículas

Edwin A. Baquero<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup>Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, Sede Bogotá, Colombia 111321

\*Email: eabaquero@unal.edu.co

### Resumen

Los ligandos Carbenos N-Heterocíclicos (NHC), han resultado ser de gran interés debido a que su alta capacidad dadora  $\sigma$  genera enlaces M-NHC más robustos, estabilizando especies organometálicas. En consecuencia, los complejos metálicos con esta clase de ligandos han mostrado ser buenos catalizadores para diferentes transformaciones químicas en fase orgánica y acuosa.<sup>1</sup> De hecho, gracias a estas propiedades únicas, una de las más recientes aplicaciones de los NHC es en la estabilización de nanopartículas.<sup>2</sup> Sin embargo, muchas de estas aplicaciones se han llevado a cabo en disolventes orgánicos. En contraste, el uso de agua como disolvente, es de alta relevancia debido a sus propiedades únicas que presenta en cuanto a reactividad, baja toxicidad y bajo costo.

Por otro lado, la activación de enlaces  $C(sp^3)-H$  es de gran interés para la comunidad científica debido a que es una herramienta poderosa para la funcionalización de moléculas orgánicas. La formación de enlaces C-D usando esta estrategia, permite el acceso a moléculas marcadas isotópicamente con deuterio, las cuales son ampliamente usadas en la industria farmacéutica y para estudios mecanísticos en química orgánica y organometálica.<sup>3</sup> A pesar de que el intercambio H/D ha sido desarrollado principalmente en condiciones homogéneas y heterogéneas, el uso de nanopartículas metálicas como catalizadores de esta reacción sigue siendo un reto en la química.

En esta charla, se mostrarán los principales avances que hemos desarrollado en la obtención de complejos organometálicos hidrosolubles de Pt y Fe con ligandos NHC y como este conocimiento se ha extendido en la obtención de nanopartículas de Pt y Ru, estabilizadas por la misma clase de ligandos. Adicionalmente, la aplicación de estos sistemas en la activación catalítica enantioespecífica de enlaces C-H sobre Lisina en agua serán también presentados. Los resultados muestran que estos nanocatalizadores, presentan altas actividades y regioselectividades en los metilenos alfa y épsilon al grupo carboxilo. Estudios sobre el mecanismo de interacción lisina/nanopartícula serán también discutidos.<sup>4</sup>

**Palabras clave:** Platino; Hierro; Rutenio; Carbeno N-Heterocíclico; Nanopartículas; Intercambio H/D.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

---

**1** M. N. Hopkinson, C. Richter, M. Schedler and F. Glorius, *Nature*, 2014, 510, 485.

**2** a) A. V. Zhukhovitskiy, M. J. MacLeod and J. A. Johnson, *Chem. Rev.*, 2015, 115, 11503; b) Y.Y. An, J.-G. Yu and Y.-F. Han, *Chin. J. Chem.*, 2019, 37, 76.

**3** J. Atzrodt, V. Derdau, T. Fey, J. Zimmermann, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2007, 46, 7744.

**4** L. M. Martínez-Prieto, E. A. Baquero, G. Pieters, J. C. Flores, E. de Jesús, C. Nayral, F. Delpech, P. W. N. M. van Leeuwen, G. Lippens and B. Chaudret, *Chem. Commun.*, 2017, 53, 5850.

## #CCC\_Rocks!

**Gilda Guimarães Leitão<sup>a\*</sup>**

<sup>a</sup>Instituto de Pesquisas de Produtos Naturais, Centro de Ciências da Saúde, Bloco H, Ilha do Fundão, Rio de Janeiro, RJ. 21.941-902  
ggleitao@ippn.ufrj.br, ggleitao@yahoo.com.br

### Resumen

A cromatografia contracorrente (CCC) é uma forma de cromatografia de partição líquido-líquido, na qual a fase líquida estacionária é retida em uma coluna sem o uso de suportes sólidos. O princípio fundamental da técnica é a partição do analito entre duas fases líquidas imiscíveis, onde a proporção relativa que passa para cada uma das fases (móvel e estacionária) é determinada pelo seu coeficiente de partição (K). Dessa forma, os sistemas de solventes são necessariamente bifásicos. As técnicas de CCC podem ser divididas entre aquelas que utilizam apenas o campo de força gravitacional para retenção da fase estacionária dentro da coluna (técnicas antigas, com equipamentos fora do mercado), e as que utilizam um campo de força centrífuga para retenção da fase estacionária. Nessas últimas, o equilíbrio entre as fases líquidas pode ser hidrostático ou hidrodinâmico, dependendo do número de eixos de rotação (um ou dois, respectivamente).

Uma das principais vantagens da CCC, por conta da natureza de sua fase estacionária inteiramente líquida, é o alto carregamento de amostra, tornando-a ferramenta valiosa em separações preparativas (**#CCC\_Rocks1**). A técnica é particularmente útil para substâncias polares e lábeis (**#CCC\_Rocks2**), onde a cromatografia com suportes sólidos é totalmente desaconselhada. Entretanto, substâncias de média a baixa polaridades também podem ser separadas (**#CCC\_Rocks3**), já que sistemas aquosos e não aquosos podem ser empregados. Nesse sentido, nosso grupo tem trabalhado no isolamento de substâncias-alvo de diversas fontes vegetais. Serão abordados exemplos de purificações de substâncias de interesse em óleos essenciais, tanto com sistemas aquosos, como no caso do isolamento do chavibetol e do metileugenol de *Pimenta pseudocaryophyllus*, quanto com sistemas não-aquosos, no caso do isolamento de diterpenos bioativos do óleo de copaíba. A versatilidade da técnica é ainda outra vantagem importante que será abordada em exemplos de alternância tanto de sistemas de solventes quanto de modos de eluição (isocrático x gradiente). Se levarmos em conta a infinidade de diferentes sistemas de solventes que podem ser usados em CCC, bem como os diferentes modos de operação do equipamento, as possibilidades são quase ilimitadas (**#CCC\_Rocks∞**)!

Essas estratégias de utilização do equipamento de forma racional e direcionada à obtenção dos melhores resultados nos fracionamentos por CCC serão apresentados de forma a evidenciar a arte das separações por essa técnica e mostrar porque **#CCC\_Rocks!**

### Palabras clave:

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

*Agradecimientos:* a la Comisión organizadora del VII SEQUIAMAZ por la invitación, a mis estudiantes y ex-estudiantes que han tornado posible este trabajo y a las agencias financiadoras CNPq, FAPERJ y CAPES.

## Bioinorgánica como herramienta para el diseño de materiales en el contexto energético y salud ambiental

**Yenny Patricia Avila- Torres<sup>a\*</sup>**

<sup>a</sup>Grupo de Investigación QUIBIO, Universidad de la Amazonía, Pampalinda, Santiago de Cali, Colombia.

<sup>a\*</sup>Email: yennytorres@usc.edu.co

### Resumen

La química bioinorgánica es una ciencia interdisciplinaria en desarrollo, la cual nos permite diseñar, proponer y sintetizar modelos funcionales o estructurales de procesos biológicos que se extrapolan a diversas aplicaciones o necesidades ambientales. En este contexto, la búsqueda de nuevos sistemas que mejoren nuestras condiciones de vida a nivel energético y salud ambiental, se consolidan a partir del análisis sistemático de la naturaleza que nos rodea. Metaloenzimas con centros metálicos de hierro, manganeso y cobre tipo oxidasas, participan en procesos de transporte, almacenamiento de oxígeno molecular, transferencia de electrones y fijación de nitrógeno. Estos mecanismos electrónicos permiten proponer a escala macro, nuevos materiales bio-inspirados con propiedades físicas emulables. Es el caso de metaloenzimas del grupo HEMO con estructuras asociadas a materiales fotosensibilizados, las cuales se aplican a nuevos desarrollos en celdas solares. Nuestro grupo de investigación se ha centrado en macrociclos derivados de benzoditiofenos a los cuales se les ha evaluado parámetros ópticos, electrónicos y fotovoltaicos a nivel teórico y experimental en función de proponer nuevos sistemas metal- orgánicos con ventajas tecnológicas. Otro tipo de aplicación de este tipo de metaloenzimas, es el diseño estratégico de nuevos materiales antimicrobianos. En este sentido, el papel del metal adquiere importancia ya que desencadenan procesos de oxidación activados fotoquímicamente y su facilidad de coordinación a matrices poliméricas da lugar a nuevos desarrollos como superficies autolimpiantes. Dentro de las matrices poliméricas exitosas que se han usado, se encuentran quitosano, polietileno y poliuretano en las cuales es embebido el ion metálico de cobre(II), cobalto(II) y manganeso(II) como nanopartícula o compuesto de coordinación. Los resultados contra microorganismos como *Staphylococcus aureus* y *Escherichia coli* fueron comparados con antibióticos clásicos, mostrando mejores condiciones y ciclos de reuso reproducibles. Finalmente, cabe resaltar que propuestas a problemas ambientales han surgido de la asociación de ciencias como la biología y la química. Continuar con esta comprensión es y seguirá siendo un reto.

**Palabras clave:** Metaloenzimas; modelos biomiméticos; bioinorgánica.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

# PRESENTACIONES ORALES

## Acumulación de fitoalexinas isoflavonoide en frijol común (*Phaseolus vulgaris* L.) por aplicación de potenciales elicitores sintéticos

**Leidy Dayanna Botero Buitrago<sup>a\*</sup>, Diego Luis Durango Restrepo<sup>a\*</sup>, Jesus Gil Gonzalez<sup>a\*\*</sup>, Winston Quiñones<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>Universidad Nacional de Colombia sede Medellín, Medellín, Colombia. Código Postal 050022

<sup>b</sup>Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia. Código Postal 050022

Email: <sup>a\*</sup>ldbotoberobu@unal.edu.co, <sup>a\*</sup>dldurango@unal.edu.co, <sup>a\*\*</sup>jhgil@unal.edu.co, <sup>b</sup>winston.quinones@udea.edu.co

### Resumen

La coronalona, un conjugado sintético de la 6-etil indanoil isoleucina, ha sido reconocido como un potente elicitador asociado a la producción de metabolitos que intervienen en la resistencia a insectos y enfermedades en las plantas. Esta sustancia ha sido ampliamente utilizada en la agricultura como agente de control biológico natural, para mejorar la salud de las plantas y aumentar el rendimiento de los cultivos. Debido al interés de proteger las plantas de enfermedades sin la necesidad de la aplicación de sustancias de naturaleza biocida, se planteó la síntesis de una serie de nuevos **elicitores** sintéticos, que están estructuralmente relacionados con la coronalona. La investigación se llevó a cabo en algunas variedades de frijol mediante la evaluación de la acumulación de contenido de isoflavonoides. Esta clase de metabolitos secundarios han sido catalogados como importantes compuestos antimicrobianos que son biosintetizados por un gran número de leguminosas, como es el caso del frijol. Estas sustancias antimicrobianas han demostrado sintetizarse y acumularse en los tejidos de algunas plantas en altas concentraciones, como resultado de infecciones bacterianas o fúngicas, y ayudan a limitar la dispersión del patógeno.

Por lo anterior, se sintetizó una serie de derivados del ácido 1-oxo-indano-4-carboxílico con permutación en la posición carboxilo (acoplamiento de aminoácidos, esterificación y sustitución nucleofílica), reducción del grupo carbonilo y condensación aldólica. Cada compuesto sintetizado se purificó por técnicas cromatográficas (TLC CC y HPLC) y se identificó por técnicas espectroscópicas y espectrométricas (<sup>1</sup>H y <sup>13</sup>C NMR 1D 2D, UV GC-MS). La cuantificación de la acumulación de isoflavonoides (genisteína, daidzeína, 2'-hidroxigenisteína, dalbergioidina, faseolina, faseollidina y coumestrol) se realizó mediante cromatografía líquida de alta eficiencia (HPLC) utilizando curvas de calibración estándar. Cada isoflavonoide fue previamente aislado, purificado e identificado por diferentes técnicas cromatográficas y métodos espectrométricos. El estudio se llevó a cabo en diferentes variedades de frijol (Cargamanto blanco, ICA quimbaya), diferentes tejidos de la planta (cotiledones e hipocotilo / raíz) y se evaluó la actividad estructural de los compuestos sintetizados.

Los resultados mostraron que la acumulación de fitoalexinas depende del tipo de frijol (la variedad resistente produjo mayores contenidos que la variedad susceptible); del tejido de la planta (los cotiledones acumularon mayor contenido de pterocarpanos que el hipocótilo/raíz), del tiempo de respuesta (máxima acumulación entre las 72 y 96 h post inducción) y del elicitador (1-oxo-indanoil-isoleucina metil éster indujo los mayores contenidos). Estos resultados podrían ser útiles para los programas de protección de cultivos de frijol mediante la selección de los mejores agentes de control.

**Palabras clave:** elicitores, fitoalexinas, frijol

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Aislamiento, Identificación y evaluación biológica de lipooligosacáridos de origen natural

**Jhon Fredy Castañeda Gómez<sup>a\*</sup>, Rogelio Pereda Miranda<sup>b</sup>, Mabel Fragoso Serrano<sup>c</sup>**

<sup>a</sup>Universidad Surcolombiana, Neiva, Colombia, 410001

<sup>b</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México, 04510

Email: <sup>a</sup>Jhon.castaneda@usco.edu.co, <sup>b</sup>Rogelio.pereda@googlemail.com, mabelfragoso@unam.mx

### Resumen

La familia *Convolvulaceae* pertenece al grupo de las angiospermas que posee alrededor de 55 géneros y 1650 especies en el mundo. El género *Ipomoea* se encuentra ampliamente distribuido a nivel mundial, en especial en las regiones tropicales, subtropicales y templadas de ambos hemisferios. La mayoría de las plantas del género *Ipomoea* son reconocidas por poseer células secretoras de lipooligosacáridos como sustancias que proporcionan protección contra hongos, herbívoros, bacterias y daño mecánico; participan en las interacciones planta-planta y actúan como inhibidoras de bombas de eflujo que son desarrolladas por las bacterias Gram-positivas, Gram-negativas y por las Células cancerígenas. En este Contexto, se han aislado lipooligosacáridos del ácido palmítico o esteárico de las especies *Ipomoea purga*, *Ipomoea alba*, *Ipomoea wolcottiana*, *Ipomoea tricolor* e *Ipomoea hederifolia* mediante Cromatografía de alta resolución en fase reversa y se han identificado sus estructuras mediante técnicas de espectrometría de masas, FAB, ESI, MALDI-TOF y Resonancia Magnética Nuclear de <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, COSY, TOCSY, HSQC y HMBC. Los purginosidos I-IV y las purginas I-III fueron obtenidos de *Ipomoea purga* como pentasacáridos y dímeros de pentasacáridos, respectivamente. Entre tanto, los albinosidos I-XI fueron aislados de *Ipomoea alba* como tetrasacáridos; el wolcottinosido I (tetrasacárido) y los wolcotinosidos II-IV (pentasacáridos) y la wolcotina I (dímero de pentasacáridos) de *Ipomoea wolcottiana*. De las semillas de *Ipomoea tricolor* se obtuvieron las tricolorinas A, K y M como tetrasacáridos, mientras que de la especie *Ipomoea hederifolia* se caracterizaron dos ácidos hexaglicosídicos y dos heptaglicosídicos. Todos los compuestos fueron evaluados para determinar su potencial como inhibidores en células resistentes a diversos fármacos empleados en la quimioterapia contra el cáncer. Los resultados permitieron determinar que la mayoría de los lipooligosacáridos inhiben o modulan la resistencia de células de cáncer de mama a la Vinblastina, presentándose mayor inhibición en la tricolorina A (FR MCF-7/Vin+cells 2164-fold a 25 µg/mL; murucoidina V (RFMCF-7/Vin+>255-veces), jalapinosidos I and II, purgina II, y el albinosido III, todos con RFMCF-7/Vin+>2000).

**Palabras clave:** Convolvuláceas; Lipooligosacáridos; Multifarmacorresistencia; Cáncer

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Aprovechamiento de biomasa proveniente de semillas de *Hevea brasiliensis* (caucho) en la producción biodiesel

**Mauricio Espitia-Sibaja<sup>a\*</sup>, Luz Stella Nerio<sup>a</sup>, Luz Marina Peña<sup>a</sup>, Erika Cortés Lamprea<sup>a</sup>.**

<sup>a</sup>Universidad de la Amazonía, Florencia, Colombia, 18001.

Email: <sup>a\*</sup>[h.espitia@udla.edu.co](mailto:h.espitia@udla.edu.co), [bl.nerio@udla.edu.co](mailto:bl.nerio@udla.edu.co), [cl.pena@udla.edu.co](mailto:cl.pena@udla.edu.co), [de.cortes@udla.edu.co](mailto:de.cortes@udla.edu.co)

### Resumen

El departamento del Caquetá es uno de los principales cultivadores de caucho del país, el producto principal obtenido del sangrado del árbol es el látex. En esta actividad comercial se produce una cantidad considerable de semillas, las cuales presentan alto contenido de ésteres de ácidos grasos que pueden ser utilizados como materia prima en la producción de biodiesel, un combustible más amigable con el medio ambiente, con respecto a los de origen fósil.

En esta investigación se caracterizó el aceite presente en las semillas de *Hevea brasiliensis* a través de parámetros fisicoquímicos como densidad, índice acidez, saponificación y yodo; identificación de ácidos grasos por medio de cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. Posteriormente se llevaron a cabo reacciones de transesterificación, para producir ésteres metílicos de ácidos grasos (biodiesel), catalizadas mediante arcillas laminares modificadas.

El aceite de semillas de caucho obtenido mediante extrusión por prensado presentó densidad de 0,915 g/cm<sup>3</sup> a temperatura de 25 °C, similar a la densidad de otros aceites vegetales como el de oliva; presentó un índice de saponificación de 190.5 y un índice de acidez de 0,257 mg KOH/g aceite, valores que indican poca presencia de ácidos grasos libres y aún menos cantidad de ácidos de bajo peso molecular. El índice de yodo del aceite fue de 89,3 g I<sub>2</sub>/g, este valor se encuentra dentro del rango establecido en las normas CODEX reglamentados para aceites en la industria alimenticia. Se identificó la presencia de los ácidos grasos oleico, palmítico, esteárico, linoleico y pelargónico en el aceite de semilla de caucho.

La utilización de arcillas laminares aniónicas tipo hidrotalcita como catalizadores de la reacción de transesterificación conllevó a rendimientos de 73,9 % en la producción de biodiesel; adicionalmente, los resultados mostraron una correlación positiva entre el contenido de Mg del catalizador y el rendimiento de la reacción. A su vez, la reacción de transesterificación catalizada con arcillas laminares catiónicas, modificadas mediante delaminación con Fe-Co-Al presentó rendimientos hasta del 82,0 %.

**Palabras clave:** Biodiesel; Biomasa; Caucho; Arcillas laminares; Transesterificación.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Control biológico in vitro de *Moniliophthora roreri* Cif & Par con el extracto etanólico de *Piper peltatum*

**Norma Constanza Bonilla-Ríos<sup>a\*</sup>, Edgar Martínez-Moyano<sup>b</sup>, Lyda Constanza Galindo-Rodríguez<sup>c</sup>**

<sup>a</sup>Docente Programa de Química, Universidad de la Amazonia, Florencia, Caquetá, 180001.

<sup>b</sup>Laboratorio de Micología y Fitoprotección, Universidad de la Amazonia, Florencia, Caquetá, 180001.

<sup>c</sup>Docente Programa de Biología, Universidad de la Amazonia, Florencia, Caquetá, 180001.

Email: <sup>a\*</sup> n.bonilla@udla.edu.co, <sup>b</sup>e.martines@udla.edu.co, <sup>c</sup>ly.galindo@udla.edu.co

### Resumen

El hongo basidiomycete *Moniliophthora roreri* (Cif & Par), ocasiona la enfermedad denominada Moniliasis; la cual constituye una de las principales limitantes fitosanitarias para el establecimiento de nuevas plantaciones de cacao (*Theobroma cacao* L) en Colombia. El objetivo de este estudio fue evaluar la actividad antifúngica del extracto etanólico de raíz y hojas de *Piper peltatum* sobre el hongo *Moniliophthora roreri* presente en frutos de T. cacao. El material vegetal de *P. peltatum* se colectó en el Centro de Investigaciones Amazónicas Macagual "Cesar Augusto Estrada González", se separó en los diferentes órganos colectados: hojas y raíces, se limpió y secó en el horno a 40°C. El material seco y molido se sometió a extracción por percolación con etanol del 96% a temperatura ambiente durante 20 días. El extracto etanólico resultante se concentró eliminando el solvente por destilación a presión reducida (rotavapor) (Sanabria, 1983). Para la evaluación de la actividad biológica de los extractos etanólicos de *P. peltatum*, se prepararon medios de cultivos en cajas de Petri con agar extracto de malta-AEM, a las cuales se les adicionó los extractos de raíz y hojas de *P. peltatum* en diferentes concentraciones (500 ppm, 1000 ppm y 2000 ppm) con cinco repeticiones cada una, donde se dejó un control positivo (hongo con extracto) y un control negativo (antifúngica, antracol 70) para su comparación (Amadi et al., 2010). Seguidamente, fueron inoculadas con *M. roreri* y llevadas a un periodo de incubación de doce días (12 h luz/12 h oscuridad). Finalmente, los bioensayos se evaluaron mediante la medición de los diámetros del área de crecimiento del micelio para la determinación de la concentración mínima inhibitoria (CMI) expresada en  $\mu\text{L}/\text{mL}$  de los extractos frente al microorganismo (Adewusi y Afolayan, 2009 y Salas et al., 2010). Los resultados permitieron evidenciar que hubo diferencias estadísticas significativas ( $P < 0,05$ ) para los tratamientos (extracto de raíz, extracto de hoja, control positivo y control negativo), donde la mayor inhibición se presentó con el extracto de hoja (media=0,89). Para las concentraciones (500, 1000 y 2000 ppm), también se presentaron diferencias estadísticas significativas ( $P < 0,05$ ), donde la mayor inhibición la presentó la concentración de 2000 ppm con crecimiento nulo del hongo. De igual forma, en el control negativo (fungicida) no se presentó crecimiento micelial. Este estudio permitió observar que el extracto de *P. peltatum* a partir de hojas, presenta efecto inhibitor frente al hongo fitopatógeno *M. roreri* con una concentración de 2000 ppm.

**Palabras clave:** *P. peltatum*; actividad antifúngica; *M. roreri*.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Determinación de la calidad físico-química de la Quebrada el Dedo (Florencia-Caquetá), en relación con los usos del suelo

**Adrian Posada Velandia, Lis Manrique Losada, Clemencia Serrato Hurtado**

*Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia.*

*Email: <sup>a</sup> l.manrique@udla.edu.co, <sup>b</sup> adriánposada2010@hotmail.com, <sup>c</sup> c.serrato@udla.edu.co*

### Resumen

El crecimiento poblacional hacia áreas rurales en busca de nuevas fuentes y tierras que satisfagan la demanda de agua y alimento en una población, ocasiona cambios en los usos del suelo que repercuten sobre los ecosistemas acuáticos. Esta dinámica se presenta en el Municipio de Florencia (Caquetá), ubicado en la Región Amazónica Colombiana, donde la expansión del casco urbano en los últimos años ha sido dramática y ha generado impactos que no han sido documentados y evaluados hasta el momento. Con el fin de evaluar la calidad del agua de la Quebrada El Dedo en términos físico-químicos, microbiológicos e hidrológicos y la influencia de los usos del suelo, se realizaron dos muestreos durante los meses de septiembre de 2018 y Julio de 2019 en cinco localidades, seleccionados bajo el criterio evidencia de tensores antrópicos a lo largo de su recorrido, según observación directa y los definidos en el Plan de Ordenación y Manejo de la Cuenca del Río Hacha, entre ellos presencia de bosque nativo, uso recreativo, extracción de agua, cultivos de pancoger y asentamientos urbanos. Las variables fisicoquímicas incluidas en el análisis de las aguas fueron pH, ortofosfatos, conductividad, nitratos, oxígeno disuelto, porcentaje de saturación de oxígeno, sólidos suspendidos totales, nitrógeno amoniacal, DBO, temperatura, hierro, turbiedad, cloruros, color, coliformes fecales, ancho y profundidad máxima de la fuente. Para conocer el estado de conservación de la fuente hídrica, se calculó el Índice de Calidad de Agua IFSN. Los resultados se correlacionaron entre los puntos de muestreo y los periodo lluvioso y transición lluvioso-seco, a través de un análisis multivariado (Análisis de Componentes Principales y Cluster a partir del método de promedio mediante la distancia euclídea). Los resultados obtenidos demostraron que el vertimiento de aguas residuales domésticas, se constituye en el factor determinante sobre la calidad del agua de la fuente hídrica, a medida que se aproxima a su desembocadura en el Río Hacha, por el aporte de vertimientos difusos y localizados, sin tener tratamientos previos para su depuración.

El ICA INSF permitió clasificar dos localidades de la cuenca alta (durante el periodo de transición de lluvias), como de buena calidad; entre los factores que pueden influir en los resultados, se destacó la presencia de bosque ripario, altas pendientes y reducida colonización, contrario a las localidades restantes, que fueron catalogadas con calidad media, por fuertes presiones antrópicas como descarga de vertimientos domésticos, procesos erosivos severos y desviación del cauce. No obstante, durante el mes de Julio todos los puntos de muestreo clasificaron con calidad media, posiblemente por incremento en la precipitación, arrastre de partículas del suelo y aumento en la deforestación en las localidades próximas al nacimiento de la quebrada.

**Palabras claves:** calidad, agua, quebrada, usos, suelo.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Diseño de un modelo QSAR para predecir nuevos derivados de Quinoxalinas 2,3 disustituidas con posible actividad Leishmanicida

<sup>a</sup>**Dairo Fabián Melo-Montealegre**, <sup>a</sup>**Elkin A Tilvez**

<sup>a</sup>Universidad de la Amazonia, Programa de Química, Florencia-Caquetá, Colombia 180002

Email: da.melo@udla.edu.co, e.tilvez@udla.edu.co

### Resumen

La Leishmaniasis es una enfermedad endémica de 98 países en todo el mundo, con aproximadamente 350 millones de personas en riesgo de infección, de cuales, según la OMS se reportan 12 millones de personas infectadas. Para el tratamiento de la Leishmania tradicionalmente se utilizan fármacos antimoniales pentavalentes de meglumina y el estibogluconato de sodio, cuyo tratamiento requiere largos periodos de administración, conllevando a un aumento de los costos durante el tratamiento.

Como posibles fármacos alternativos para el tratamiento de la Leishmaniasis se han reportado una serie de derivados de Quinoxalinas, que son compuestos heterocíclicos que presentan átomos de nitrógeno en su estructura molecular favoreciendo las interacciones con la enzima Tripanotión reductasa, quienes presentaron una actividad biológica favorable frente a la enfermedad de Leishmaniasis.

Para el diseño de un modelo a partir de la relación cuantitativa estructura-actividad (QSAR) se utilizaron 28 derivados de Quinoxalina que previamente fueron sometidas a un análisis conformacional y optimizadas al nivel de teoría B3LYP/6-31+g\*(d). Posteriormente se realizó la evaluación de 1600 descriptores en la plataforma E-Dragon online, donde los descriptores GETAWAY, 3D-MorSen y Connectivity Indices se utilizaron para construir un modelo QSAR que presentó valores estadísticamente aceptables para los parámetros  $R^2 = 0.87$  y  $Q^2 = 0.76$ .

**Palabras clave:** QSAR; Leishmaniasis; Fármacos; Descriptores Moleculares.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Estudio de las Interacciones de Derivados de Tipifarnib con el Sitio de Unión de la Enzima CYP51

**Laura Polania-Varón<sup>a\*</sup>, Maicol Ahumado-Monterrosa<sup>b</sup>, Elkin A Tilvez<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Universidad de la Amazonia, Programa de Química, Florencia, Caquetá, Colombia 180002

<sup>b</sup> Universidad de Cartagena, Programa de Química, Cartagena, Bolívar, Colombia 130001

Email: <sup>a</sup> lau.polania@udla.edu.co, <sup>b</sup> mahumedom@unicartagena.edu.co

### Resumen

La Tripanosomiasis americana o “enfermedad de chagas”, es una enfermedad tropical desatendida potencialmente mortal, causada por el parásito *Trypanosoma cruzi*. Se ha reportado que los derivados de Tipifarnib presentan actividades biológicas favorables para combatir esta enfermedad. Mediante el uso de un modelo QSAR, se logró proponer un conjunto de nuevos derivados de Tipifarnib con valores aceptables de posible actividad inhibitoria frente a *T. cruzi*. El presente trabajo ha propuesto investigar las interacciones entre la enzima diana lanosterol 14 $\alpha$ -demetilasa (CYP51) y moléculas derivadas de Tipifarnib, a través de la herramienta computacional Docking molecular (acoplamiento molecular), con el fin de validar las nuevas moléculas promisorias para combatir la enfermedad de Chagas.

A través del acoplamiento se identificó las interacciones involucradas en el proceso de inhibición, las cuales consisten en la coordinación del átomo de nitrógeno del anillo imidazol con el átomo de Fe<sup>3+</sup> del cofactor (grupo hemo), la ocupación del sustituyente fenilo del carbono quiral en el bolsillo hidrofílico y la ocupación del anillo quinolona en la región del lanosterol (ligando nativo) en el sitio de unión. Se evidenció que la afinidad teórica por la enzima y la actividad biológica es favorecida en los enantiómeros R de los derivados sustituidos por halógenos en los grupos fenilos.

**Palabras clave:** Chagas; Docking; *Trypanosoma*; CYP51; Tipifarnib.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

# ESTUDIO Y OBSERVACIÓN DE PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS DE LULO DE CASTILLA (*Solanum quitoense* Lam) EN EL SUR DEL DEPARTAMENTO DEL HUILA-COLOMBIA

**Katherine Ojeda<sup>a</sup> Dayhana Benavides<sup>a</sup>, Magaly Paladines<sup>b</sup>, Linsdey Agudelo<sup>a</sup>, Rubén González<sup>c</sup> y Jeffrey León-Pulido<sup>c</sup>**

<sup>a</sup>Centro de Gestión y Desarrollo Sostenible Surcolombiano SENA Regional Huila; Colombia

<sup>b</sup>Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia,

<sup>c</sup>Universidad EAN. Bogotá, Colombia.

Email: <sup>a</sup>ckojeda@misena.edu.co, <sup>a</sup>dcbenavides@sena.edu.co, <sup>b</sup>g.paladines@udla.edu.co, <sup>c</sup>alinsdey.agudelo@gmail.com

## Resumen

El lulo (*Solanum quitoense*) es un fruto tropical que representa el cuarto lugar en el sector frutícola nacional con el 10,2% de participación. Para el departamento del Huila la búsqueda de opciones para aprovechar el potencial de producción de la región, es una prioridad, además de potenciar las propiedades antioxidantes de carotenoides que se encuentran en rangos de  $33,3 \pm 0,63 \mu\text{g/g}$  en el fruto fresco entero y  $7,2 \pm 0,3 \mu\text{g/g}$  en la pulpa fresca. El presente estudio se centra en la observación de las propiedades fisicoquímicas de carotenoides mayoritarios como el  $\beta$ -caroteno, la luteína y zeaxantina, a partir de la recolección de frutos maduros de manera aleatoria y al azar con una estructura factorial de  $6 \times 6$ , siendo las repeticiones los frutos y el factor a comparar las fincas; y comprobar las diferencias en los frutos de una finca a otra. La recolección fue realizada en los municipios de Pitalito, San Agustín, Isnos y Palestina, en fincas productoras de lulo asociadas a la Agencia para la Reincorporación y la Normalización (ARN) entidad adscrita a la Presidencia de la República de Colombia. El paquete estadístico SAS University Edition fue usando en el rango estudentizado de Tukey (HSD) para los parámetros de peso, temperatura, pH, acidez, densidad, porcentaje de humedad, actividad acuosa en cáscara estableciendo una hipótesis experimental de 95% de confianza. Como resultado de los estudios experimentales fueron observadas variaciones en las propiedades fisicoquímicas de las muestras analizadas, principalmente en el peso alcanzado en los frutos frescos, variando entre 93,70g y 220,90g; el porcentaje de humedad alcanzó un 90,4978% por deshidratación convencional, acidez en pulpa 2,9025% ácido cítrico, propiedades fisicoquímicas en cáscara y pulpa de la siguiente manera pH (3,9456, - 2,8558), sólidos solubles ( $15,14556^\circ\text{Brix}$  -  $9,19277^\circ\text{Brix}$ ) encontrando así que los frutos tienen un comportamiento que estadísticamente no es significativo en su variabilidad fisicoquímica ( $\text{Pr} < 0,05$ ). Finalmente, las diferencias más significativas en las propiedades físicas se atribuyen a las fincas 2 en Palestina y 5 en Pitalito con un peso PFF=139,0797g ( $\text{Pr}=0,5738$ ), en consecuencia, a las características geofísicas y del clima del Huila.

**Palabras claves:** Lulo; cáscara de lulo; Propiedades Fisicoquímicas; Rango Estudentizado Tukey.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Evaluación comparativa de riego sistematizados de una solución nutritiva vs agua, en forraje verde hidropónico de maíz (*Zea mays*).

**Yudy Vanessa Pérez-Galindo,<sup>a</sup> Daniel Toquica-Agudelo,<sup>b</sup> y Sugey M. Martínez-Gómez<sup>c</sup>**

<sup>ab</sup> Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia 18001 Facultad de Ingeniería, Ingeniería de Sistemas

<sup>c</sup>Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia 18001 Facultad Ciencias Básicas, Química

Email: yudy.perez@udla.edu.co, j.toquica@udla.edu.co, di.pastrana@udla.edu.co, y su.martinez@udla.edu.co

### Resumen

El éxito de un cultivo hidropónico radica en la captación de los nutrientes contenidos en la solución nutritiva por parte de las plantas, en este trabajo, se evalúa la tasa de crecimiento de dos lotes de forraje verde hidropónico de maíz, cada uno con 4 parcelas experimentales, un lote alimentado con agua potable de la ciudad de Florencia Caquetá, y el otro con un sistema de riego que consiste en la aplicación de agua los primeros 4 días, seguidos de 7 días de solución nutritivas y finalmente dos días más con agua, para el día 15 obtener un forraje verde hidropónico con una altura de 25 cm, como alimento para animales de granja. La solución nutritiva empleada, fue preparada en el laboratorio de investigaciones de la Universidad de la Amazonia con base a los requerimientos del maíz según reportes en literatura científica. Esta solución entrega los nutrientes vía foliar, por lo cual se suministra al cultivo mediante un sistema automatizado de aspersión, en dosis de 5 mL cada hora en tiempo de verano. Este sistema es el resultado de las mejoras de un trabajo previo, el cual consiste en el uso de un Arduino UNO R3, el cual contiene el código diseñado por los autores de este resumen, que cumple la función de coordinar el sistema y activar al Relay que transmite el impulso para activar el funcionamiento de la bomba, que a su vez activa los aspersores permitiendo la entrada de agua o de solución nutritiva a las plantas, según sea el requerimiento y la instrucción codificada. Como resultado se espera evaluar la tasa de crecimiento, el contenido de biomasa de las hojas, y de la raíz, en fresco y seco, además del rendimiento en peso por área, empleando el análisis de Anova de un factor.

### Palabras clave:

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Evaluación computacional de la remoción de iones de metales contaminantes por derivados de terpiridinas mono-sustituidas

**Miguel Ricardo Villarreal Parra<sup>a</sup>, Elkin A Tilvez<sup>a</sup>, Francis S Sánchez<sup>a</sup>.**

<sup>a</sup>Universidad de la Amazonia, Programa de Química, Florencia-Caquetá, Colombia, 180002

Email: m.villarreal@udla.edu.co,

### Resumen

La evaluación teórica de la capacidad de adsorción tanto fase gas como en fase acuosa fue llevada a cabo con 17 derivados de terpiridinas mono sustituidas frente a 6 metales contaminantes ( $\text{Co}^{3+}$ ,  $\text{Fe}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Zn}^{2+}$ ,  $\text{Hg}^{2+}$ ). Las simulaciones fueron realizadas aplicando la teoría del funcional de la densidad (DFT) a un nivel de teoría B3LYP/6-311G\*\* para átomos de C, N, H, O, S, Cl, Br, F, Co, Fe, Ni, Zn junto con un pseudo potencial LANL2DZ para los átomos Pb, Hg, I

A partir de la ruta mecanística para la activación de la terpiridina, se encontró dos intermediarios y dos estados de transición. El primer intermediario, presenta una configuración Trans respecto a la orientación de los átomos de nitrógeno laterales y el átomo de nitrógeno central, tras un giro en cada uno de los anillos laterales de aproximadamente  $150^\circ$  los átomos de nitrógeno se ubican en posición Cis, correspondiente al segundo intermediario, una especie con una alta densidad electrónica en los átomos de nitrógenos susceptibles a la interacción con un ácido de Lewis. Se encontró que la fase lenta de la activación corresponde al segundo estado de transición con un  $\Delta G$  de 15,6 kcal/mol en fase gas y de 12,5 kcal/mol en fase acuosa. La funcionalización de las terpiridinas mostró sólo una variación entre -1,7 y 2 kcal/mol. Nuestros resultados mostraron que el complejo del metal cobalto presentó la mayor energía de adsorción, lo cual puede ser debido a su alto nivel de oxidación.

**Palabras clave:** DFT; adsorción; Terpiridina; Complejos

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Evaluación de componentes bioactivos de mucílago de café y extractos de pitahaya (*Hylocereus megalanthus*) con potencialidad funcional en industria alimentaria

**Katherine Ojeda<sup>1</sup>, Jaime Jiménez<sup>2</sup>, Dennis Ordóñez<sup>3</sup>, Jensen Guilombó<sup>4</sup>, Diana Barrera<sup>5</sup>, Dayhana Benavides<sup>6</sup>**

<sup>1</sup>Ingeniera Química, Gestora Línea Biotecnología y Nanotecnología Tecnoparque Nodo Pitalito, Grupo de Investigación Yamboró SENA Regional Huila;

<sup>2</sup>Ingeniero Agroindustrial, Especialista en Gerencia de Proyectos, Instructor del Centro de Gestión y Desarrollo Sostenible Surcolombiano,

<sup>3</sup>Aprendiz Tecnología en Gestión de Empresas Agropecuarias, Semillero de Investigación Sistemas Sostenibles Agropecuarios, Centro de Gestión y Desarrollo Sostenible Surcolombiano SENA Regional Huila, <sup>4</sup>Aprendiz Programa SER del CGDSS Asociación Agropales de Palestina Huila,

<sup>5</sup>Ingeniera Ambiental, Aprendiz Programa SER del CGDSS Asociación Agropales de Palestina Huila,

<sup>6</sup>Magíster en Ciencias Agrarias con énfasis Fitopatología Centro de Gestión y Desarrollo Sostenible Surcolombiano SENA, Dinamizadora Tecnoparque Nodo Pitalito.

Email: <sup>1</sup>ckojeda@misena.edu.co, <sup>2</sup>oswaldojimenez@misena.edu.co, <sup>3</sup>dcbenavides@sena.edu.co

### Resumen

Colombia es el tercer productor de café en el mundo y el principal productor de café arábica lavado ha contribuido al desarrollo de las regiones cafeteras y del país en general. Palestina un municipio al sur del Huila, ha identificado una problemática económica social con los productores de café y pitahaya (*Hylocereus megalanthus*); que refiere altos residuos agrícolas generados a raíz de las afectaciones fitológicas y sanitarias que bajan el costo de la pitahaya que no alcanza un tamaño apropiado para comercialización, llevándose a perderla sin tener alternativas de transformación; de igual manera el café, producto principal en la economía del municipio; dentro de procesos de beneficio, genera altas cantidades de mucílago, que al no ser tratados tienen afectaciones ambientales directamente a fuentes hídricas y suelos; desconociendo su alto potencial nutricional. En razón de lo expuesto, se estableció un proyecto que busca el aprovechamiento de estos dos residuos agrícolas para generar una bebida funcional con la Unidad Productiva SER (SENA Empresa Rural) del Centro de Gestión y Desarrollo Sostenible Surcolombiano (CGDSS), de Agropales, en apoyo de Tecnoparque nodo Pitalito, basados en la Resolución 3929 del 2013 expedida por el Ministerio de Salud y Protección Social, desarrollando un producto que reincorpora el Mucilago de café y extracto de Pitahaya en un refresco de fruta por contener más de 8% de la pulpa, permitiendo evaluar sus características de acuerdo a los Requisitos fisicoquímicos para refrescos de fruta que establece unos toques mínimos de pH=4, °Brix=13 y Acidez=0,2. Las formulaciones obtenidas F1, F2 y F3 cumplieron con los parámetros de pH menor a 4 y acidez calculada por volumetría expresada como porcentaje de ácido cítrico, a excepción de F3 que no alcanzó el mínimo requerido de 0,2%. En cuanto a los sólidos suspendidos totales se obtuvo un máximo alcanzado de 1,7 ° Brix; resultado esperado por cuanto es una bebida sin adición de azúcar; pero que para efectos del presente estudio no se considera un factor eliminatorio; así como también determinar metabolitos secundarios y cuantificar mediante espectrofotometría UV- VIS contenido de vitamina C, reportando una concentración mayoritaria en el mucílago 0,32949686 mg/g, frente a la pitahaya que contiene 0,13043454 mg/g; resultados que permiten confirmar su aporte de potencialidad funcional en industria alimentaria.

**Palabras claves:** componentes bioactivos, extractos de mucílago, metabolitos secundarios.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

# Evaluación de un extracto de copoazú (COPE) para mejorar la reacción foto Fenton solar a pH natural y degradar fármacos presentes en aguas residuales municipales.

**Heidy L Santanilla Calderon<sup>a\*</sup>, Lis Manrique Losada<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Universidad de la Amazonia, Florencia- Caquetá, Colombia 57

Email: <sup>a</sup>h.santanilla@udla.edu.co, <sup>b</sup>lismanrique@gmail.com.

## Resumen

Los procesos de oxidación avanzada están siendo utilizados para la degradación y mineralización de contaminantes emergente; uno de estos procesos es el de la reacción foto Fenton, la cual no se ve favorecido a pH natural, ya que se observa precipitación de complejos de hierro, lo que dificulta la disponibilidad de hierro en la solución. Por lo tanto, en algunos estudios se están utilizando compuestos de tipo polifenólicos y ácidos orgánicos como el EDDS, ácido cítrico, ácido oxálico, ácido maleico entre otros, que logran mantener el hierro en solución, estos compuestos forman complejos solubles a pH natural.

Este tipo de compuestos se logran encontrar en algunos frutos provenientes de la región amazónica del Caquetá; como el copoazú (COPE) con un contenido de compuestos polifenólicos de 481.42 mg GAE/L).

El objetivo de esta investigación fue evaluar un extracto de copoazú (COPE) para determinar qué proporción molar es adecuada y mantiene el hierro en solución para lograr una buena degradación de los fármacos, mediante foto Fenton solar a pH natural.

Los fármacos utilizados fueron acetaminofén (AMF), diclofenaco (DFC), carbamazepina (CBZ) y sulfametoxazol (SMX) con una concentración de 0.0066mM, en agua destilada a pH 6, con  $\text{Fe}^{3+}$  5mg.L<sup>-1</sup> y 68 mg.L<sup>-1</sup> con diferentes proporciones molares de COPE 0.07, 0.1, 0.13 y 0.22; también se utilizó agua residual municipal simulada (TOC 20 y 30 mg.L<sup>-1</sup>), las reacciones se llevaron a cabo en un simulador de luz solar cps + (Altas).

El aumento en la proporción molar de COPE (0.07, 0.1, 0.13 y 0.22) produce alta solubilidad de los iones de hierro, lo que beneficia el proceso de degradación de los fármacos ya que se producen más radicales hidroxilos y otras especies oxidantes. Con agua residual la disponibilidad de hierro en la solución se observa durante toda la reacción y el consumo  $\text{H}_2\text{O}_2$  es alto, esto se debe a la cantidad de MO, la concentración del TOC no logra disminuir ya que existe alta cantidad de MO de COPE y agua residual y esta MO captura especies oxidantes.

El alto contenido de ácidos orgánicos de COPE aumenta la complejación del  $\text{Fe}^{3+}$ , esto mejora la solubilidad del hierro en la reacción foto Fenton a pH natural y existe una mayor degradación de fármacos en aguas residuales con alto contenido de TOC.

**Palabras clave:** Foto Fenton; copoazú, polifenoles, ácidos orgánicos.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Evaluación teórica del mecanismo de reacción Diels-Alder para la síntesis de dibenzofuranos sustituidos.

**Cesar Augusto Serrato Hurtado, Elkin A Tilvez**

*Universidad de la Amazonia, Programa de Química, Florencia-Caquetá, Colombia 180002*

*Email: ce.serrato@udla.edu.co, e.tilvez@udla.edu.co*

### Resumen

En el presente trabajo se realizó la exploración computacional del mecanismo de reacción para la síntesis de dibenzofuranos sustituidos a partir de la reacción modelo entre Euparin (1-(6-hidroxi-2-isopropenil-1-benzofuran-5-il)-1-etanona) y acetilendicarboxilato de dimetilo (DMAD) activado con trimetilfosfina por medio de la reacción de Diels-Alder, ya que esta reacción se reportó con porcentajes de rendimiento de hasta el 98% en tolueno, aunque no se demostró información acerca de la cinética de la reacción.

Las simulaciones de las geometrías estructurales tanto de reactivos, productos e intermediarios de reacción se calcularon utilizando el nivel de teoría B3LYP/6-31+G(d); al realizar la simulación del intermediario descrito experimentalmente (fase gas, evaluando el efecto solvente con agua y tolueno) se encontró que la estructura reportada no corresponde a un mínimo local, por lo que se propuso explicar este mecanismo de reacción con base en la reacción Morita-Baylis-Hillman, además, se propuso la formación de un anillo de 5 miembros entre el fosforo de la trimetilfosfina y un oxígeno de un grupo carboxilo cercano (conocido como 1,2-oxafosfoles) para estabilizar esta especie. Al simular el intermediario de reacción propuesto, se encontró que corresponde a un mínimo local, por lo cual, se evaluó el mecanismo de reacción a partir de este intermediario proponiendo 3 rutas que pueden brindar información la cinética de la reacción.

**Palabras clave:** Dibenzofuranos sustituidos; DFT; Euparin, Morita-Baylis-Hillman.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

# Evaluación teórica de metabolitos aislados de la especie *Casearia Sylvestris SW* para comprender su reactividad como fármacos potenciales para el tratamiento del cáncer

**Elkin A Tilvez<sup>a</sup>, Michael Zambrano-Angulo<sup>a</sup>, Sol M. Mejía<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Universidad de la Amazonia, Programa de Química, Florencia-Caquetá, Colombia 180002

<sup>b</sup> Pontificia Universidad Javeriana, Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Bogotá, Colombia, 110231

Email: <sup>a</sup> e.tilvez@udla.edu.co, <sup>b</sup> sol.mejia@javeriana.edu.co

## Resumen

Aunque hasta la fecha existe una gran variedad de tratamientos para el cáncer, muchos de ellos no totalmente efectivos debido a los efectos secundarios que se producen durante periodos de tiempo prolongado conllevando a elevados costos. Por tal motivo, la obtención de nuevos compuestos químicos anticancerígenos obtenidos de extractos naturales se ha convertido en una alternativa estratégica a los tratamientos curativos y paliativos para el cáncer. Esto ha potenciado el aislamiento, la purificación y la caracterización de sustancias potencialmente bioactivas de ciertas especies de plantas, entre las que encontramos la *Casearia Sylvestris SW*; de la cual se han aislado los metabolitos Casearvestrin A, B y C. A pesar de que la Casearvestrin presenta un promisorio potencial anticancerígeno, aun no se ha reportado información sobre su reactividad química, lo que sería crucial para aportar en subsecuentes estudios de diseño de fármacos asistido por computador.

Por lo tanto, esta investigación revela los sitios susceptibles para ataques nucleofílicos y electrofílicos (los dobles enlaces de la molécula) y revela los tipos y fortalezas de enlaces e interacciones intramoleculares empleando métodos de estructura electrónica, específicamente DFT (B3LYP/6-311+G(d,p)). Esto se logró a través del análisis de índices de reactividad local y global basados en el análisis de la Función de Fukui y del análisis topológico de la densidad electrónica de acuerdo a la Teoría de Átomos en Moléculas. Además de encontró que la Casearvestrin A es el más reactivo de la serie ya que es el metabolito con menor dureza, menor band gap y con mayores sitios susceptibles a los diferentes ataques en una reacción química. Sin embargo, no se encontró una correlación directa entre la longitud de la cadena R y la abundancia de interacciones intermoleculares, de modo que en Casearvestrin A se forman 10 interacciones débiles pero en Casearvestrin B y C, 8 y 11 interacciones, respectivamente.

**Palabras clave:** Cáncer; Casearvestrin A, B y C; DFT; Función de Fukui

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Foto-Electro-Fenton solar para la degradación de fármacos presentes en aguas residuales municipales.

**Carolina Quimbaya Ñañez<sup>a</sup>, Ricardo Antonio Torres Palma<sup>b</sup>, Lis Manrique<sup>a,b</sup>**

<sup>a</sup>Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia y 180001.

<sup>b</sup>Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia y 050010.

Email: <sup>a</sup>l.manrique@udla.edu.co, <sup>b</sup>c.quimbaya@udla.edu.co,

### Resumen

Los procesos electroquímicos de oxidación avanzada (EAOP) constituyen una subclase de tecnologías alternativas de tratamiento de aguas. Dada la eficacia comprobada de los EAOP para la oxidación de contaminantes, su aplicación se ha dirigido al tratamiento de aguas residuales municipales (ARM), como textiles, productos farmacéuticos, entre otros. Dentro de los EAOP se encuentran los electroquímicos indirectos caracterizados por generar radicales \*OH por otros medios diferentes a la oxidación anódica. El proceso foto electro Fenton solar (SFEF) resulta del acople de la oxidación electroquímica y la ya demostrada eficiencia del proceso foto Fenton para la degradación de contaminantes emergentes (CEs). La aplicación de FEF a la degradación de CEs presentes en ARM fue evaluada en este trabajo, haciendo énfasis en la influencia del electrolito soporte y del tipo de ánodo, en la degradación y mineralización de cuatro fármacos adicionados a las ARM. Los experimentos de oxidación anódica (OA) y foto-electro-Fenton solar (FEFS), se llevaron a cabo a pH natural utilizando 0.0066 mM de cada fármaco (sulfametoxazol - SMZ, diclofenaco - DCF, carbamacepina -CBZ y acetaminofén - ACT) en agua destilada y agua residual real, con 5 mg L<sup>-1</sup> Fe (III). Se usaron Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> o NaCl 0.05 M como electrolitos soporte y ánodos de BDD o DSA (Ti / IrO<sub>2</sub> dopado con RuO<sub>2</sub>) en cualquier caso con cátodo de difusión de aire con fieltro de carbono (GDE) para la generación in situ de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. El sistema funcionaba en modo de corriente constante (3,25 mA / cm<sup>2</sup>). Para los experimentos FEFS se utilizó radiación solar cuya intensidad se midió con radiómetro.

La OA de los 4 fármacos añadidos se vio afectada por el tipo de ánodo y el electrolito soporte. El electrodo DSA en presencia de NaCl demostró una mayor capacidad de eliminación total de fármacos que el electrodo BDD, alcanzando hasta el 70,3% de remoción. En presencia de ánodo de DSA y NaSO<sub>4</sub>, la degradación farmacéutica total no supera el 14%, un valor inferior al porcentaje alcanzado con el electrodo BDD con los dos electrolitos. El uso de NaCl y con el ánodo DSA es factible que durante el proceso se formen especies oxidantes de cloro (HOCl-/OCI-) cuyo alto poder oxidante permite la eliminación de los fármacos. En el FEF, se observa que el sistema DSA-Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub> presenta una mayor eliminación que el BDD-Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, contrario a lo observado en el AO. Este comportamiento demuestra la contribución del FEFS en el sistema DSA-Na<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>.

La aplicación de FEFS para el tratamiento de fármacos añadidos en aguas residuales crudas demostró una alta eficiencia en la degradación de estos contaminantes. El NaCl como un electrolito de soporte junto con el ánodo DSA, genera altos porcentajes de eliminación de los medicamentos. Este comportamiento está asociado con las especies oxidantes del cloro. El ánodo BDD no promueve la formación de estas especies, pero facilita la formación de radical hidroxilo. En general, el ACT exhibe alta reactividad hacia especies oxidantes de cloro y hacia radicales OH. El orden ascendente de reactividad hacia las especies de cloro fue CBZ <SMX <DCF. En contraste, SMX y DCF mostraron una reactividad importante hacia los radicales OH.

**Palabras clave:** ánodo DSA, ánodo BDD; degradación de fármacos; electrolito soporte, foto Fenton solar, oxidación anódica.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## LC-MS and MALDI-MS untargeted metabolomics of tomato (*Solanum lycopersicum*) infected by *Phytophthora infestans*

**Paula Galeano García<sup>a,b,c\*</sup>, Fábio Neves dos Santos<sup>b</sup> Marcos Nogueira Eberlin<sup>b</sup>, Chiara Carazzone<sup>c</sup>.**

<sup>a</sup>*Bioprospección de Productos Naturales Amazónicos; Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia*

<sup>b</sup>*ThoMSon Mass Spectrometry Laboratory, University of Campinas, Institute of Chemistry, Campinas, São Paulo, Brazil*

<sup>c</sup>*Laboratory of Advanced Analytical Techniques in Natural Products. Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia*

Email: <sup>a</sup>p.galeano@udla.edu.co,

### Resumen

Tomato is one of the most important vegetables worldwide, with more than 160 million tons produced in 2013 (Ballester et al. 2016). Tomato crops suffer attacks of various pathogens that cause great production loss. Late blight, caused by *Phytophthora infestans*, is one of the most devastating pathogens to tomato because of its difficult control (Fry 2008; Laurindo et al. 2018; Vargas et al. 2009). Our aim was discriminate infection times and identifies major metabolites biomarker candidates in the Late blight of tomato plants. We applied metabolomics based on LC-MS and metabolic profiling by MALDI-MS associated with multivariate data analysis to analyze tomato plants of Santa Cruz Kada cultivar infected by *P. infestans* at 4, 12, 24, 36, 48, 60, 72 and 96 h. The discriminant features of LC-MS analysis were annotated according to the exact mass (m/z) of the precursor ions and their corresponding fragments.

Even though no necrosis was observed at tomato plants, there is an infection with biochemical alterations, but without apparent symptoms. MALDIMS profiles of metabolites and multivariate data analysis can detect late blight in infected tomato plants.

Multivariate analysis of PLS-DA was then applied and revealed significant differences between control and infected plants, as well as significant differences due to infection times and also some potentials biomarkers of infection. The discriminant metabolites were putatively identified by databases. Some of the annotated metabolites include triterpene and steroidal saponins, glycoalkaloids, phytoalexins, organic acids, macrolides, alkaloids, and gibberellins. Some of the annotated metabolites have been studied in detail concerning their potential role in defense of plants against phytopathogenic fungi (Bouarab et al. 2002; Osbourn 1996).

MALDI(±)-MS seems to offer a rapid and effective method to detect late blight in asymptomatic tomato plants and therefore could function as a suitable guide for correct the management and application of sanitary defense approaches. Metabolite profiles revealed by LC-MS discriminate infection times in asymptotically infected tomato plants and identify metabolites that are altered in late blight. The differentiation of infection time in two clusters reveals that there are pathogen-host interactions with metabolic alteration in the infection process.

**Palabras clave:** *Solanum lycopersicum*; *Phytophthora infestans*; Late blight, LC-MS, metabolomics, MALDIMS.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Liberación Controlada de Herbicidas MCPA y Paraquat Utilizando Silicatos Laminares de Alta Carga Funcionalizados

**Lisette Ruiz - Bravo<sup>a\*</sup>, Sebastián Ramos Jimenez<sup>b</sup>, Carolina Pazos Zarama<sup>b</sup>**

<sup>a</sup> Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia.

<sup>b</sup> Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia.

\*Email: lis.ruiz@udla.edu.co

### Resumen

Los productos fitosanitarios o agroquímicos son compuestos clave en la agricultura moderna para mejorar el rendimiento de los cultivos y aumentar los niveles de producción del suelo; sin embargo, la cantidad aplicada de herbicidas en el suelo no solo se limita a la cantidad recomendada para generar su efecto biocida, sino también, a la adición de cantidades en exceso para compensar las pérdidas que se producen cuando estas sustancias son arrastradas por las lluvias o por el agua de riego, que inevitablemente causarán contaminación en el suelo y aguas subterráneas generando un problema que se está incrementando gradualmente y en especial si los herbicidas son muy solubles y móviles. En este contexto y con el fin de minimizar los efectos contaminantes ocasionados por el aumento en la cantidad de agroinsumos y mejorar la efectividad durante la aplicación, se han desarrollado tecnologías que reducen la movilidad del ingrediente activo de los herbicidas en el suelo liberándolo de forma gradual desde una matriz o soporte que mantienen la concentración efectiva local del ingrediente activo en sistemas de liberación controlada. El principal objetivo de este tipo de formulaciones está centrado en proteger el suministro del biocida, permitir la liberación automática del componente activo controlando su velocidad y mantener la concentración del biocida dentro de los límites óptimos sobre un periodo de tiempo específico. En este trabajo se ha modificado una mica sintética de alta carga (Na-2-Mica) a través de la intercalación y pilarización con cationes de Keggin de Al y posterior funcionalización con grupos tiol y silanol, caracterizándolos por IR y DRX; posteriormente se pusieron en contacto con soluciones acuosas de MCPA y Paraquat medidas en un rango de concentraciones de soluto entre 0,075 – 1,000 mM para determinar su capacidad de adsorción realizando un seguimiento de su concentración por cromatografía líquida de alta eficiencia, el estudio de adsorción reveló que la mica Al-pilareada y la mica funcionalizada con grupos tiol presentaron mayor afinidad para la adsorción del herbicida MCPA, mientras que la mica funcionalizada con grupos silanoles presentó mayor afinidad de adsorción por el herbicida Paraquat. El estudio de lixiviación en columnas de suelo demostró que las formulaciones obtenidas a través de la formación de los complejos material – herbicida permitieron la reducción de la lixiviación de los herbicidas MCPA y Paraquat sobre el perfil del suelo; es así como los complejos mica pilareada – MCPA y mica funcionalizada con grupos tiol – MCPA permitieron la reducción de la lixiviación en un 54,6 y 19,0 % respectivamente en comparación con una formulación comercial de MCPA y el complejo mica funcionalizada con silanoles – Paraquat permitió la reducción de un 21,8 % en comparación con la formulación comercial de Paraquat.

**Palabras clave:** Na-2-Mica; MCPA; Paraquat; lixiviación; columnas de suelo.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Atributo sensorial del café y su relación con las características químicas del suelo

**Juan Carlos Suárez Salazar<sup>a</sup>, Ervin Humprey Durán Bautista<sup>a</sup>, Engelberto Rodríguez<sup>b</sup>, Gustavo Vega Cano<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>Universidad de la Amazonia, Facultad de Ingeniería, Programa de Ingeniería Agroecológica, Florencia-Caquetá (Colombia)

<sup>b</sup>Centro de gestión y desarrollo sostenible surcolombiano Tecnoparque Yamboró. SENA regional, Pitalito-Huila (Colombia)

Email: <sup>a</sup>ju.suarez@udla.edu.co, <sup>b</sup>ervinduranb@gmail.com

### Resumen

La calidad de taza de café (*Coffea arabica* L.) es el resultado de los atributos sensoriales que dependen de factores como genotipo, variedad, tipo de suelo, condiciones agroecológicas, prácticas agronómicas, de cosecha y poscosecha, torrefacción, características propias del cultivo, y procesamiento, así como de las características del suelo. El objetivo de este estudio fue analizar las relaciones entre las características químicas del suelo, condiciones de manejo del cultivo, altura sobre el nivel del mar y nivel de sombra con los atributos sensoriales relacionados con la calidad de taza (Q) en café (*Coffea arabica* L.). Por lo anterior, fueron seleccionaron 55 lotes con diferentes rangos altitudinales, condiciones de manejo agronómico y beneficio en los municipios de Suaza y Timana para evaluar la relación entre características químicas del suelo y manejo con los atributos sensoriales en taza. El método estadístico utilizado fue Análisis de Correspondencias Múltiples (ACM) y un análisis de PLS para determinar la relación entre los atributos sensoriales y las variables agronómicas de manejo y parámetros de suelo. Se encontro diferencias significativas ( $P < 0,001$ ) para pH, Ca, Mg, Na, SB, Al, P, Zn, así mismo, se encontro diferencias significativas ( $P < 0,01$ ) para K, Mn, M.O y B entre los tipos de suelos. Las tazas encontradas fueron de cuerpo medio, algunas acidas e intermedias con atributos sensoriales representativos. Q3 se relacionó con atributos sensoriales como cuerpo, dulzor, balance, sabor, acidez y estos con variables de manejo del cultivo como densidad de siembra (Ds), edad, altura y elementos químicos con S. Q2 fue una taza afectada por el manejo en el proceso de la fermentación y por características químicas como el pH, SB, Ca, Mg además variables de manejo como sombra la cual depende de la altura en la cual se encuentra el cultivo. Q1 que presento baja calificación en los atributos sensoriales se relacionó con características del suelo como Al y Fe.

**Palabras clave:** Manejo agronómico; beneficio; estadística multivariada; rangos altitudinales

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Comportamiento electroquímico de colorantes antraquinónicos en solución de solventes no-acuosos

**Jaime Fernando Martínez Suárez<sup>a\*</sup>**

<sup>a</sup>Universidad de la Amazonia, programa de química, Florencia, Colombia

Email: \*jai.martinez@udla.edu.co

### Resumen

Los colorantes se han empleado desde la antigüedad para cambiar o proporcionar color a alimentos, medicamentos, cosméticos y ropa. Los colorantes derivados de 9,10- antraquinona desempeñan un papel importante debido a su abundancia relativa y sus posibilidades de modificación. Se analizan las condiciones en las cuales el colorante alizarina (ALZ) en solución de N,N-dimetilformamida (DMF) y acetonitrilo (ACN) puede ser transformado electroquímicamente. El comportamiento electroquímico de esta molécula con grupos quinónicos y fenólicos se determinó por voltamperometría cíclica. Se observaron numerosos procesos de electrorreducción/oxidación sin y con agregado de ácido o base. El número, la intensidad de corriente y el potencial de pico de los procesos de transferencia de carga se racionalizan sobre la base de los equilibrios de disociación de los grupos HO-fenólicos que ocurren en fase homogénea. El medio modifica significativamente la posición de los equilibrios homogéneos ácido-base. Los equilibrios de disociación de los grupos HO-fenólicos en DMF se confirman mediante espectros UV-Vis. Se lleva a cabo la electrolisis a potencial controlado (EPC) de ALZ en diferentes soluciones electrolíticas PTBA o NaClO<sub>4</sub>/DMF y NaClO<sub>4</sub>/ACN. El avance de las reacciones se mide por voltamperometría cíclica (VC), espectroscopía de absorción UV-Vis y resonancia paramagnética electrónica (EPR). Se realizan cálculos químico-cuánticos en base a la teoría del funcional densidad (DFT) para comparar con algunos resultados experimentales (UV-Vis) y como ayuda para la determinación de la estructura molecular de productos de reacción. Las EPC se realizó al potencial del primer proceso catódico conducen a la acumulación del radical anión derivado del colorante, el cual fue detectado e identificado por EPR y VC. Estas especies radicalarias resultan inestables durante el desarrollo de las electrólisis. El agregado de un exceso de CH<sub>3</sub>I a la solución al final conduce a la formación de los correspondientes derivados O-metilado, con rendimientos bajos en ambos casos. Las EPC de AZ en solución de ACN genera la sal de sodio del colorante depositado sobre la superficie del cátodo de Pt. Se propone un mecanismo de reacción para condiciones estudiadas.

**Palabras clave:** Electroquímica; colorante y solventes orgánicos

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Remoción de fármacos presentes en aguas residuales municipales mediante tratamiento biológico: efecto del medio de reacción y de la estructura química

**Lis Manrique-Losada<sup>a\*</sup>, Brayan Muñoz, Carolina Quimbaya,  
Ricardo Antonio Torres-Palma<sup>b</sup>**

<sup>a</sup>Materiales Ambiente y Desarrollo (MADE). Universidad de la Amazonia, Florencia- Caquetá, Colombia 57

<sup>b</sup>Remediación ambiental y biocatálisis. Universidad de Antioquia, Medellín-Antioquia, Colombia 57  
Email: <sup>a\*</sup>[l.manrique@udla.edu.co](mailto:l.manrique@udla.edu.co), <sup>b</sup>[ricardo.torres@udea.edu.co](mailto:ricardo.torres@udea.edu.co).

### Resumen

Los tratamientos biológicos han demostrado alta eficiencia para la remoción de materia orgánica biodegradable y una limitada capacidad para eliminar fármacos. En este trabajo se evaluó el tratamiento biológico en dos vías: aerobia y anaerobia, de un agua residual municipal de baja intensidad como es la de Florencia-Caquetá (Colombia) con el fin de evidenciar su alcance en la eliminación de cuatro fármacos representativos de esta matriz de agua (acetaminofén, sulfametoxazol, carbamazepina y diclofenaco) y en la mineralización, además de explicar la influencia de la estructura química de estos compuestos y del medio biológico sobre la respuesta de eliminación. Los experimentos se llevaron a cabo en vasos de reacción de 1 L, donde se puso en contacto el agua residual dopada con los fármacos en mezcla equimolar (0.0066 mM) con un lodo cultivado para este fin. Para el tratamiento aerobio, el sistema se aireó permanentemente y se mantuvo fuerte agitación. Para el tratamiento anaerobio, el sistema se selló y se permitió únicamente la salida del biogás, se mantuvo agitación lenta para garantizar contacto entre el agua residual y el lodo. El lodo anaerobio fue tomado de un pozo séptico y se aclimatizó antes de proceder con la experimentación. El tratamiento biológico eliminó parcialmente los fármacos carbamazepina, diclofenaco y sulfametoxazol, lo que se atribuyó a la estructura química de los fármacos, la cual generaría interferencia estérica o efectos negativos en los sitios activos de las enzimas encargadas del metabolismo microbiano. El acetaminofén se degradó completamente sin importar el medio biológico en el que se encuentre. Los otros tres fármacos ven favorecida su eliminación vía aerobia lo que se atribuye a una posible bio eliminación gracias a la presencia de grupos donores de electrones específicamente en sulfametoxazol y diclofenaco (eliminación de 65% y 90% respectivamente) mientras que las fracciones de grupos electro atrayentes que favorecen reducciones en el medio anaerobio, son limitadas. La carbamazepina demostró que su principal mecanismo de eliminación es la adsorción en el lodo y su moderada hidrofobicidad así como su presencia en forma neutra en el medio de reacción lo que permitiría interacciones  $\pi$ - $\pi$  con el lodo. Se favoreció el tratamiento aerobio para la mineralización de materia orgánica lo que se atribuyó al consumo de ésta debido a etapas de oxidación y biosíntesis, mientras el proceso anaerobio consume materia orgánica en la digestión. Estos resultados demostraron la parcial capacidad de eliminación de fármacos y además la capacidad que tiene el lodo de almacenar fármacos hidrófobos, lo que obliga a evaluar otros procesos que garanticen la completa eliminación de fármacos del sistema de reacción.

**Palabras clave:** Tratamiento aerobio; tratamiento anaerobio; aguas residuales municipales; fármacos; bioeliminación; adsorción.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

# PRESENTACIONES FORMATO POSTER

## Determinación de la capacidad de adsorción de $\text{Co}^{2+}$ sobre una Arcilla Natural del Caquetá modificada con Cisteína

**Angie Carolina Domínguez López<sup>a,\*</sup>; Lisette Ruiz Bravo<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Programa de Química, Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia

Email: \*ang.dominguez@udla.edu.co

### Resumen

El recurso hídrico se está viendo afectado por los vertimientos de aguas residuales provenientes de hospitales, instituciones, hogares domésticos, industrias y residuos provenientes de las prácticas agrícolas que no reciben un previo tratamiento, depositando metales pesados y materia orgánica, en su mayoría tóxicos. Los metales pesados en el agua potable ocasionan graves problemas a la salud de las personas debido a su capacidad bioacumulativa. Una estrategia para solventar esta dificultad consiste en el uso de materiales adsorbentes con propiedades mejoradas a través de la funcionalización con aminoácidos. En este trabajo se propone mejorar la capacidad de adsorción de una arcilla natural del Caquetá modificando su superficie con cisteína que contiene grupos tiol que forman complejos con cationes de metales pesados utilizando como molécula modelo el catión de Cobalto. El material híbrido se sintetizó mezclando 15 g de arcilla con 20 mL de cisteína 100 mM agitando por 24 horas a temperatura ambiente y ajustando el pH a 4.0. Posteriormente se centrifugó y lavó con agua destilada dejando secar a temperatura ambiente; el material obtenido se caracterizó por IR y DRX. Para evaluar la capacidad de adsorción del  $\text{Co}^{2+}$  se realizó un estudio utilizando isotermas construidas en un rango de concentraciones de 2 – 200 ppm y a pH entre 4 y 6. La relación material/ solución de  $\text{Co}^{2+}$  fue de 10 mg/5 mL en contacto por 24 horas. El seguimiento a la concentración en equilibrio se determinó por espectroscopia UV- visible. Las isotermas de adsorción obtenidas se ajustarán a los modelos de Langmuir o Freundlich y se determinarán los parámetros de adsorción. Los materiales híbridos obtenidos a partir de arcillas funcionalizadas con aminoácidos es una estrategia promisoría para la remoción de metales pesados.

**Palabras clave:** Bentonita; cisteína; Adsorción

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Evaluación computacional del efecto sustituyente en la reacción de protección entre benzaldehídos sustituidos y glicerol

**Luis David Bernal Solano, César A. Serrato Hurtado, Elkin A. Tilvez.**

*Universidad de la Amazonia, Programa de química, Florencia-Caquetá, Colombia, 180002*

*Email: lu.bermal@udla.edu.co*

### Resumen

En el presente estudio se evaluó la sustitución en el grupo fenilo del benzaldehído por grupos activantes y desactivantes para en la protección del grupo carbonilo del benzaldehído, utilizando como grupo protector glicerol. Las optimizaciones estructurales de los reactivos y productos, y los cálculos puntuales de energía se simularon a las temperaturas de 320K, 340K, 360K, 380K y 480K al nivel de teoría B3LYP/6-31G(d,p) en el Software computacional ORCA v4.1.

De igual manera se determinó que el proceso de reacción en ambos productos es exotérmico, obteniendo energías de 5,961 kcal/mol para el producto de 6 miembros y 3,234 kcal/mol para el producto de 5 miembros.

La evaluación del efecto de la temperatura con la reacción modelo entre el benzaldehído y el glicerol mostró una disminución significativa en la energía de activación a 320K; adicionalmente, se observó que grupos activantes como el grupo amino ( $\text{NH}_2$ ) y el grupo metoxi (OMe) que actúan como sustituyentes del benzaldehído, disminuyen la energía libre de Gibbs favoreciendo la formación del producto de ciclación de 6 miembros, y a su vez que la formación del producto de ciclación de 5 miembro se ve favorecida por la presencia del grupo nitro ( $\text{NO}_2$ ).

**Palabras clave:** DFT; Glicerol; Benzaldehído; Protección; efecto del Sustituyentes.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Derivados halogenados y nitrados de fenantro[9,10-c][1,2,5] tiadiazol 1,1-dióxido. Síntesis, caracterización y radicales aniones.

**Julyleth P. Jiménez Macías<sup>a\*</sup>, Mauro J. Banera<sup>a,b</sup>, José A. Caram<sup>a</sup>, María V. Mirífico<sup>a,b\*</sup>**

<sup>a</sup>Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA, CCT La Plata-CONICET), Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Química, UNLP, Argentina, 1900.

<sup>b</sup> Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química, UNLP, La Plata, Argentina, 1900.

\*Email: mirifi@inifta.unlp.edu.ar - julyleth@inifta.unlp.edu.ar

La introducción de grupos electrón atrayentes fuertes en la estructura de ciertos compuestos orgánicos constituye un aporte significativo en la búsqueda de compuestos de interés en el campo de la electrónica orgánica. Con el objetivo de mejorar las propiedades como semiconductores tipo-n de la familia de compuestos derivados de 1,2,5-tiadiazol 1,1-dióxido, se introdujeron grupos nitro (-NO<sub>2</sub>) y halógenos (-Br y -I) en la estructura base de fenantro[9,10-c][1,2,5] tiadiazol 1,1-dióxido (**T**). Se siguió un procedimiento convencional y otro alternativo (en ausencia de solvente y empleando catalizadores sólidos con posibilidad de ser reutilizados). Se sintetizaron seis nuevos derivados: 2-iodo; 2,7-diiodo; 2,7-dibromo; 5-nitro; 7-nitro; y 5,10-dinitro**T**. Todos presentan espectros UV-Vis con absorciones de muy baja intensidad situadas en la zona visible del espectro electromagnético. Esta característica los convierte en opcionales para dispositivos que requieran circuitos transparentes. El estudio del comportamiento electroquímico por voltamperometría cíclica revela que los compuestos en solventes no acuosos no resultan electroactivos frente a oxidación. En cambio, en los barridos catódicos los derivados halogenados se electroreducen a través de dos procesos monoeléctricos de transferencia de carga separados, y los nitrados en tres procesos. La primera transferencia monoeléctrica reversible corresponde a la reducción de cada tiadiazol a su correspondiente anión radical. Las especies radicalarias se detectaron por resonancia paramagnética electrónica, voltamperometría cíclica y espectroscopía UV-Vis. La segunda etapa de reducción corresponde a la transformación del anión radical en el dianión correspondiente. Se proponen esquemas de reacción para los derivados mono- y dinitrados. Dinitro**T** se electroreduce al menor potencial catódico de todos los derivados sintetizados y con una diferencia *ca.* 300 mV respecto de **T**. Esta característica resulta de marcado interés para sus potenciales aplicaciones como componente para la fabricación de dispositivos electrónicos orgánicos. La facilidad de electroreducción parece estar asociada con la estabilidad del anión radical inicialmente formado, la cual es favorecida no solamente por el sistema conjugado extendido-conectado sino también por el efecto de la presencia de átomos o grupos atómicos electrón atrayentes que colaboran en estabilizar la carga negativa adicionada. En los análisis por difracción de rayos-X se evidencia que el esqueleto carbonado con características aromáticas que incluye los sustituyentes electronegativos es coplanar con el anillo heterocíclico. Esta conformación estructural en los tiadiazoles facilita la deslocalización de electrones a través del sistema electrónico-n conjugado. Se midió la estabilidad del anión radical acumulado por electrolisis a potencial controlado de 2,7-dibromofenantro[9,10-c][1,2,5]tiadiazol 1,1-dióxido en presencia de O<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O y en ausencia de estos agentes. El anión radical permanece en un 60%, 70% y 75%, respectivamente, al cabo de tres meses.

**Palabras clave:** Tiadiazoles; electrónica orgánica; halógenos; nitro; electrón atrayentes; radical anión.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Empleo de TGA para la elección de condiciones de reacción en síntesis orgánica

**María F. Rozas<sup>1</sup>, Julyleth P. Jiménez Macías<sup>1\*</sup>, Edgardo A. Fertitta<sup>1,2</sup>, Mauro J. Banera<sup>1,3</sup>,  
María V. Mirífico<sup>1,3\*</sup>**

<sup>1</sup>Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA, CCT La Plata-CONICET), Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Química, UNLP, Argentina.

<sup>2</sup>Comisión de Investigaciones Científicas Pcia. Bs. As. (CIC PBA)

<sup>3</sup>Facultad de Ingeniería, Departamento de Ingeniería Química, UNLP, La Plata, Argentina.

\*Email: mirifi@inifta.unlp.edu.ar - julyleth@inifta.unlp.edu.ar

### Resumen

En investigaciones previas el grupo de trabajo encontró que derivados 3,4-disustituidos de 1,2,5-tiadiazol 1,1-dióxido (*T*) son de interés en el campo de los semiconductores orgánicos tipo-n. Con el fin de modificar la estructura de un compuesto conocido para mejorar las propiedades de interés para el campo en cuestión, se realizó la nitración de fenantro[9,10-c]-1,2,5-tiadiazol 1,1-dióxido (*TR*) siguiendo dos procedimientos (A y B). A) Vía convencional ( $H_2SO_4 + HNO_3 + Ac_2O$ , a 60 °C), y B) en ausencia de solvente y empleando un agente nitrante (AN: nitrato de potasio (NP) y nitrato de torio (IV) (NT)) y un catalizador ácido fuerte ( $H_4PMo_{11}VO_{40} \cdot nH_2O$  soportado sobre nanosílice, *HPAsop*) sólidos, a 150 °C. Por el procedimiento A, se obtienen tres compuestos nitrados, 5-nitrofenantro (*TRN1*), 7-nitrofenantro (*TRN2*), y 5,10-dinitrofenantro[9,10-c][1,2,5]tiadiazol 1,1-dióxido (*TRN3*), siendo el rendimiento molar global 89 %, valor mayor que los valores generalmente informados en la literatura (ca. 60%) para nitraciones convencionales de aromáticos. El procedimiento B resulta más selectivo. Se investiga el efecto del AN, del pretratamiento térmico del catalizador sólido y de la relación molar  $R = HPAsop/TR$ . Para AN = NT,  $R = 0,06$  y el catalizador pretratado térmicamente a 300 °C (24 h), se forma *TRN3* con rendimiento molar del 86%, trazas de *TRN1* y otros no identificados. Despertó la atención el hecho de tener que agregar el NT en gran exceso y en porciones frescas cada 2 h para que la reacción de síntesis en ausencia de solvente sea completa. En un intento de explicar lo observado y también porque la reacción no ocurre cuando se usa NP y si con NT, surgió el estudio por TGA del comportamiento térmico de ambos AsNs. Los resultados obtenidos muestran que el NP no se descompone a la temperatura de reacción, mientras que si lo hace el NT. Se estudió la estabilidad térmica de otros posibles AsNs, e.g. nitrato de lantano (III) (NL) y nitrato de cobre (II) (NC). El NL se descompone a temperaturas mayores que 400°C, mientras que el NC es térmicamente lábil a 112°C. Se midió que *TR* se descompone entre 200-300 °C. Se estudió por TGA el comportamiento de: *HPAsop*, (AN + *HPAsop*) y (AN + *HPAsop* + *TR*). Los experimentos TGA se realizaron bajo atmósfera de  $N_2$  seco y de  $O_2$  seco. Se concluye que para que ocurra la reacción, es necesario que el AN se descomponga lentamente a ca. la temperatura de reacción. El empleo de TGA permite establecer la temperatura óptima de reacción, el intervalo de tiempo en que hay que incorporar nuevas porciones de AN para que la reacción se complete y el tiempo del pretratamiento térmico del *HPAsop*.

**Palabras clave:** TGA; agente nitrante; heteropoliácido; 1,2,5-tiadiazol 1,1-dióxido

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Comparación de tres compuestos como coagulantes para la obtención de caucho a partir de látex del árbol *Hevea brasiliensis*.

**Natalia Aroz Ortiz <sup>a\*</sup>, José Ricardo Gutiérrez Rojas <sup>b</sup>, Sugey Maryuri Martínez Gómez <sup>a</sup>, Jhon Ironzi Maldonado Rodríguez <sup>a\*</sup>.**

<sup>a</sup> Universidad de la Amazonia, Florencia-Caquetá, Colombia, CP. 80001

<sup>b</sup> Asociación de Reforestadores y cultivadores de caucho del Caquetá (ASOHECA), Colombia, CP.80001

Email: <sup>a</sup> j.maldonado@udla.edu.co, <sup>b</sup> n.aroz@udla.edu.co

### Resumen

Durante la obtención del caucho natural a partir del árbol *Hevea Brasiliensi*, el proceso de coagulación del látex con ácido fórmico es un paso fundamental. En el Caquetá; un departamento de tradición cauchera, la consecución de este reactivo se ha dificultado en los últimos años, trayendo consigo la necesidad de buscar otras alternativas. Como contribución a dicho propósito, en este trabajo se evaluó la eficiencia de ácido acético y nitrato de calcio como coagulantes y se comparó frente al habitualmente usado, ácido fórmico. Dicho estudio se realizó mediante la variación de las concentraciones de dos coagulantes incluyendo al ácido fórmico, empleando 15 tratamientos por coagulante y comparando la repercusión que tenían en propiedades como lo son la plasticidad original ( $P_0$ ), pH, contenido de caucho seco (DRC) y contenido de sólidos totales (TSC). Luego de un análisis estadístico ANOVA, los resultados mostraron que ambos compuestos son una alternativa viable en el proceso de coagulación de látex para la obtención de caucho, siendo el ácido acético el compuesto que mostró el mejor perfil con respecto a los parámetros evaluados. El ácido acético permitió obtener los mayores porcentajes de DRC a concentraciones de 0,50 %; mientras que el nitrato de calcio a concentraciones de 0,67 %. Ambos compuestos mostraron los más altos índices de plasticidad con respecto al ácido fórmico cuyos valores están por encima de 30 que es lo establecido por la norma técnica colombiana (NTC) para caucho natural. Las mayores eficiencias se obtuvieron a pH 3, 4 y 6-7 para ácido fórmico, ácido acético y el nitrato de calcio respectivamente. Finalmente, un análisis por espectroscopia IR permitió obtener un espectro cuyas bandas fueron características del caucho natural.

**Palabras clave:** Caucho; %DRC; Coagulación; plasticidad.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Glutelinas de chachafruto (*Erythrina edulis*) como fuente proteica alternativa

**Katherine Ojeda<sup>a</sup>, Dayhana Benavides<sup>b</sup>, Cristian Felipe Martínez<sup>c</sup>, Yurley Calderón<sup>c</sup>**

<sup>a</sup>Ingeniera Química, Gestora Línea Biotecnología y Nanotecnología Tecnoparque Nodo Pitalito, Grupo de Investigación Yamboró SENA Regional Huila, [ckojeda@misena.edu.co](mailto:ckojeda@misena.edu.co),

<sup>b</sup>Magíster en Ciencias Agrarias con énfasis Fitopatología Centro de Gestión y Desarrollo Sostenible Surcolombiano SENA, Dinamizadora Tecnoparque Nodo Pitalito, [dcbenavides@sena.edu.co](mailto:dcbenavides@sena.edu.co),

<sup>c</sup>Aprendices Tecnólogo en Control Ambiental, Semillero Gestión Ambiental del Centro de Gestión y Desarrollo Sostenible Surcolombiano SENA Regional Huila.

Email: <sup>a</sup>[ckojeda@misena.edu.co](mailto:ckojeda@misena.edu.co), <sup>b</sup>[dcbenavides@sena.edu.co](mailto:dcbenavides@sena.edu.co), <sup>c</sup>[yurleycalderon15@gmail.com](mailto:yurleycalderon15@gmail.com)

### Resumen

La tendencia hacia consumo de proteínas de origen vegetal, cada día cobra más importancia; las organizaciones de salud, recomiendan aunar esfuerzos para investigar e identificar fuentes proteicas alternativas. El Chachafruto (*Erythrina edulis*) una leguminosa multipropósito con gran potencial en diversos usos, contiene en la semilla un 23% de proteína y un aminograma comparable al del huevo y superior al del frijol y la arveja; según estudios, el valor biológico de la proteína del chachafruto es 70.9, superior al de la lenteja (44,6), el frijol (58), la arveja (63,7) y el haba (54,8), además de proporcionar porcentajes entre  $13,29 \pm 0,36$  de Glutelinas,  $8,83 \pm 0,45$  de Globulinas,  $11,52 \pm 0,22$  Albuminas  $0,01 \pm 0,003$  Prolaminas; propiedades significativas para trabajar en el presente estudio, el cual recolectó el chachafruto cultivado en Tierra Activa, finca agroecológica del municipio de San Agustín Huila. Los frutos se transformaron en la Planta de Agroindustria del Centro de Gestión y Desarrollo Sostenible Surcolombiano. Los resultados demuestran que bajo condiciones óptimas de transformación es posible obtener proteínas con significativo valor nutricional a partir del chachafruto, de cuatro formulaciones, caracterizadas fisicoquímicamente, la Formulación F3 cocción del fruto sin cáscara arrojó resultados favorables en el mayor contenido de proteína 20,01 %p/p a  $T=80^{\circ}\text{C}$  durante un tiempo de  $t=35$  minutos bajo la metodología Kjeldahl, y la menor actividad acuosa con  $A_w=0,172$ ; característica con incidencia directa en la validación de productos de panificación.

**Palabras claves:** Chachafruto, proteína vegetal, propiedades fisicoquímicas, panificación.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Efecto del trolox y ácido ascórbico sobre el comportamiento electroquímico de ABTS

**Anderson Murcia Polania, Anderson Scarpetta Anaconda<sup>a</sup>, Gloria Magaly Paladines<sup>a\*</sup>, Jaime Fernando Martínez Suárez<sup>a\*</sup>**

<sup>a</sup> Universidad de la Amazonia, programa de química, Florencia, Colombia  
Email: \*g.paladines@udla.edu.co, \*jai.martinez@udla.edu.co

### Resumen

Los antioxidantes son sustancias artificiales o naturales que pueden prevenir o retrasar algunos tipos de daño celular, y se encuentran en muchos alimentos, incluidos las frutas y verduras. También están disponibles como suplementos dietéticos. El Trolox (Ácido-6-hidroxi-2,5,7,8-tetrametilcroman-2-carboxílico) un análogo de la vitamina E y el ácido ascórbico o vitamina C (5-((s)-1,2-dihidroxietil)-3,4-dihidroxifuran-2(5H)-ona) son empleados como compuestos de referencia en la evaluación de la actividad antioxidante. En este trabajo se presentan los resultados preliminares del comportamiento electroquímico del ABTS (2,2'-azino-bis(3-etilbenzotiazolin-6-sulfonato) de amonio) frente a agregados crecientes de trolox o ácido ascórbico en solución de amortiguadora (50 mM de fosfato) de pH 7,2 por voltamperometría cíclica (VC). Los ensayos electroquímicos se realizaron en una celda de un compartimiento y como electrodos se usaron: de trabajo C-vítreo, auxiliar una barra de platino (Pt), y referencia Ag|AgCl|KCl (3 M). El VC de ABTS a concentraciones de 0,1 y 3 mM, y velocidades de barrido entre 20-500 mV/s presentaron dos picos anódicos ( $E_{pa}$ ) con potenciales de 550 y 995 mV (vs Ag/AgCl) para ambas concentraciones y velocidades de barrido, correspondientes a la oxidación de ABTS a su radical catión ( $ABTS^{\cdot+}$ ) y subsecuentemente a su dicatión ( $ABTS^{2+}$ ). A bajas concentraciones (1 mM), el barrido inverso mostró un pico catódico ( $E_{pc}$ ) a 453 mV para la reducción de la especie  $ABTS^{\cdot+}$  y no se observó ningún pico de electrorreducción para la especie  $ABTS^{2+}$ . A partir de este dato, se encontró que el potencial formal redox, calculado a partir de los valores medios  $E_{pa}$  y  $E_{pc}$  para la cupla redox era 501 mV para  $ABTS/ABTS^{\cdot+}$ . A una mayor concentración (3 mM) los resultados fueron similares para el segundo proceso de electrorreducción ( $ABTS^{2+}$ ). Sin embargo, la intensidad de corriente de pico para la reducción  $ABTS^{\cdot+}$  era dos veces mayor que su pico de oxidación ( $I_{pc}/I_{pa} = 2$ ). Estos resultados pueden ser racionalizados por la comproporción (inversa de la reacción de desproporción) entre las especies ABTS y  $ABTS^{2+}$  para dar 2  $ABTS^{\cdot+}$ . El VC de ABTS sobre primer pico de oxidación indican que el radical catión es relativamente estable y la transferencia de electrones es completamente reversible, como lo demuestra la relación de corriente de pico de oxidación y reducción ( $I_{pa}/I_{pc} = 1$ ) y diferencia de potencial de pico ( $E_{pa} - E_{pc} \sim 70$  mV) para cada pareja redox a velocidades de barrido moderadas. La adición de trolox o ácido ascórbico en la celda electroquímica que contiene ABTS provocó cambios en las características de los voltamperogramas. Para concentraciones de trolox superiores a 0,01 mM muestran un incremento sucesivo de la corriente de pico de oxidación de la primera señal voltamétrica, seguido por una disminución en la corriente de pico de reducción en el barrido inverso. Resultados similares fueron observados para el ácido ascórbico.

**Palabras clave:** Antioxidantes; voltamperometría cíclica y radicales

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Efecto del nivel de radiación solar sobre el sistema de defensa antioxidante enzimático de *Theobroma cacao*

**Leicy Restrepo Cuellar<sup>a</sup>, Yasmin Lopez Torres<sup>a</sup> Anderson Murcia Polania<sup>a</sup>; Anderson Scarpeta Anacona<sup>a</sup>; Cristian Buendía Nopan<sup>a</sup>, Yessi Díaz Becerra<sup>a</sup>; Magally Paladines Beltrán<sup>a\*</sup>**

<sup>a</sup>Universidad de la Amazonia, programa de química, Florencia Caquetá, Colombia. Email: g.paladines@udla.edu.co

### Resumen

El cacao (*Theobroma cacao* L), es considerado un cultivo de gran importancia a nivel mundial por los diferentes usos en la elaboración de chocolate, cosméticos y derivados; alcanza una producción de 4251 miles de toneladas de grano en 9.9 millones de hectáreas al año, siendo el principal ingreso de alrededor de 6 millones de agricultores (ICCO 2017). El cacao como especie originaria de los bosques tropicales americanos, se desarrolla de manera ancestral bajo la sombra, con poca tolerancia a exposiciones solares, presentando saturación a densidades de rango de flujo fotónico entre 400 y 750  $\mu\text{mol m}^{-2}\text{s}^{-2}$ . Intensidades de luz mayores a las que pueden absorber los cloroplastos, produce cierre estomático y en consecuencia menores tasas de asimilación de  $\text{CO}_2$ , lo que conduce a la sobreexcitación de los centros de reacción del fotosistema II, generando un aumento en la formación de especies reactivas del oxígeno (ROS por sus siglas en inglés). En condiciones normales, la producción y la remoción de las ROS es estrictamente controlada por especies antioxidantes; cuando existe un desbalance y la formación de las ROS es mayor a la capacidad del sistema antioxidante, ocurre el estrés oxidativo.

Por lo anterior, el propósito de este estudio fue evaluar el efecto de diferentes niveles de radiación solar frente al sistema de defensa antioxidante enzimático de *Theobroma cacao*, en el departamento del Caquetá. Para ello, se tomó como referencia tres arreglos agroforestales previamente caracterizados y tipificados en el centro de investigaciones Cesar Augusto Estrada González (Macagual) denominados: sombra intensa (SI), sombra media (SM) y pleno sol (PS); como sistema de defensa se evaluó el contenido de prolina, la actividad antioxidante enzimática catalasa (CAT) y ascorbato peroxidasa (APX), con un análisis simultáneo de proteína. Además de eso, se comparó entre época de baja precipitación y de alta precipitación, encontrando que existen diferencias significativas ( $p \leq 0,05$ ) entre épocas y entre arreglos. Se puede concluir que el arreglo que presenta las mejores respuestas bioquímicas frente a un posible estrés por fotoinhibición es el arreglo SM, por su bajo contenido de prolina y mayor actividad enzimática CAT y APX.

**Palabras clave:** arreglos agroforestales; antioxidantes enzimáticos; radiación solar.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Docking molecular de la chalcona 1-(p-nitrofenil)-3-(1,3,5-trimetoxifenil)-2-propenona con la enzima CYP51 de *Candida krusei*

Carolina Pinzón-Candil<sup>a</sup>, Danny Vergel-Devia<sup>a</sup>, Elkin A Tilvez<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Universidad de la Amazonia, Programa de Química, Florencia-Caquetá, Colombia, 180002

Email: ca.pinzon@udla.edu.co, da.vergel@udla.edu.co.

### Resumen

Con el interés en el diseño de nuevos fármacos con actividad antifúngica basados en chalconas (1,3-difenil-2-propenona) sustituidas, que en los últimos años han demostrado amplia actividad biológica y medicinal como antiinflamatorios, antipalúdicos, antibacterianos, anticancerosos y antifúngicos, se ha reportado el aumento de su actividad realizando diferentes sustituciones. Teniendo en cuenta lo anterior, se realizó el docking molecular de una chalcona 1-(p-nitrofenil)-3-(3,4,5-trimetoxifenil)-2-propenona, dicho método permite modelar las interacciones entre una molécula pequeña y una macromolécula correspondiente a una proteína. Los resultados evidencian un eficiente acoplamiento con la enzima CYP51 (esterol 14- $\alpha$ -desmetilasa) como iniciativa para el tratamiento de enfermedades fúngicas invasivas y sistémicas ocasionada por hongos resistentes e inmunocomprometidos, como es el caso de la *Candidiasis* que es una de las tres infecciones fúngicas más invasivas, generada por *C. albicans*, *C. krusei*, *C. parapsilopsis* y *C. glabrata*.

Se ha reportado la actividad antifúngica de chalconas con sustituyentes nitroheterocíclicos como inhibidores que se coordinan al ion  $Fe^{3+}$  de CYP51. La chalcona propuesta en este trabajo se coordina con el  $Fe^{3+}$  a través del grupo nitro ( $NO_2$ ). Adicionalmente, se validó el método de docking reproduciendo el cristal 5TZ1 del banco de datos de proteínas; se determinaron las distancias de enlace, siendo similares a las reportadas experimentalmente; existiendo un factor determinante para la evaluación de las interacciones de la chalcona con los aminoácidos presentes en la enzima CYP51 de *Cándida krusei*.

**Palabras clave:** Docking, chalcona; actividad antifúngica; fármaco; ligando-receptor; *Cándida krusei*.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Desarrollo de un nuevo sensor electroquímico basado en un electrodo de pasta de carbono decorado con $\text{Nd}_2\text{O}_3$ para la detección simultánea de TZ y SY

**Karen Daniela Márquez Mariño<sup>a\*</sup>, Johisner Penagos Llanos<sup>a</sup>, Olimpo Garcia Beltran<sup>b</sup>, Edgar Nagles<sup>b</sup>, John Hurtado<sup>c</sup>.**

<sup>a</sup> Universidad de la amazonia, Florencia, Colombia y Código postal 180001-180002

<sup>b</sup> Universidad de Ibagué, Ibagué, Colombia y Código postal 730001-730002-730003

<sup>c</sup> Universidad de los andes, Bogotá Colombia y Código postal 110111-110151-110311

\*Email: <sup>a</sup>k.marquez@udla.edu.co, <sup>a</sup>johisner.penagos@unibague.edu.co, <sup>b</sup>jose.garcia@unibague.edu.co <sup>b</sup>edgar.nagles@unibague.edu.co, <sup>c</sup>jj.hurtado@uniandes.edu.co

### Resumen

Este trabajo consiste en aprovechar las propiedades conductoras de  $\text{Nd}_2\text{O}_3$  y desarrollar una microestructura con pasta de carbono que permita una metodología nueva, simple, selectiva y sensible para detectar TZ y SY en alimentos y materiales farmacéuticos.

Se realizó la detección simultánea de los colorantes de tartrazina (TZ) y Sunset Yellow (SY) usando el electrodo de pasta de carbono decorado con el óxido del neodimio (III) ( $\text{Nd}_{\text{Ox}}$ /CPE), las características superficiales del  $\text{Nd}_{\text{Ox}}$ /CPE fueron estudiadas por voltametría cíclica, espectroscopia de impedancia y electrón de barrido Microscópico. Las corrientes de pico anódico para TZ y SY aumentaron en más de 60%, y los potenciales máximos de anódica para TZ y SY fueron observados en los valores potenciales menos positivos que los de la pasta de carbono sin  $\text{Nd}_{\text{Ox}}$ .

Bajo los parámetros óptimos (pH 3,0; tiempo de acumulación  $t_{\text{ACC}}$  30 s; y el potencial de acumulación  $E_{\text{ACC}}$  0,10 V), El nuevo sensor era sensible, estable, fácilmente manufacturado, y muy conveniente para la detección de TZ y de SY en muestras del alimento y farmacéutico los materiales y proporcionó resultados constantes.

Además, la durabilidad de la microestructura es alta y el electrodo tiene una larga vida útil. Por otro lado, también se puede aplicar en análisis de rutina y en la detección de otras sustancias como el allura red. Este nuevo informe puede ser evidencia de las múltiples aplicaciones que se pueden desarrollar en la modificación de electrodos con  $\text{Nd}_2\text{O}_3$ .

**Palabras clave:** Tartrazina; Sunset Yellow; pasta de carbono; electrodos modificados; oxido de neodimio.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Oxidación biológica aerobia y anaerobia de fármacos presentes en aguas residuales municipales de Florencia Caquetá

Brayan Steven Muñoz-Sierra<sup>a</sup>, Carolina Quimbaya<sup>b</sup>, Ricardo A. Torres-Palma<sup>c</sup> Lis Manrique-Losada<sup>d</sup>

<sup>a, b, d</sup> Universidad de la amazonia, Florencia, Colombia, CP 180002

<sup>c</sup> Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia, CP 050010

Email: <sup>a</sup> br.munoz@udla.edu.co, <sup>b</sup> iti\_195@hotmail.com, <sup>c</sup> ricardo.torres@udea.edu.co, <sup>d</sup> l.manrique@udla.edu.co

### Resumen

Las aguas residuales municipales (ARM) de Florencia Caquetá son vertidas sin tratamiento sobre los cuerpos de agua afectando su calidad. Convencionalmente, para el tratamiento de ARM se utiliza oxidación biológica aerobia (lodos activados) por su eficiencia, sin embargo, no se han adelantado estudios con tecnología anaerobia que definan su alcance en términos de mineralización y degradación de fármacos. En este estudio se evaluaron los dos procesos de oxidación biológica para el tratamiento de las ARM en mención, con el fin de evidenciar diferencias significativas entre ellos durante la mineralización y degradación de fármacos. En laboratorio, se utilizaron reactores batch de 500 mL tanto para el tratamiento aerobio como para el anaerobio. El tratamiento aerobio se llevó a cabo utilizando un lodo activado cultivado en laboratorio a partir de ARM y lodo anaerobio juntos en aireación constante y alimentación intermitente por 2 meses. Para los experimentos en tratamiento aerobio se adicionaron 200 mL de lodo aerobio y 300 mL de ARM, y se mantuvo con agitación y aireación constante las 24 h del día. Para los experimentos anaerobios se adicionaron 200 mL de lodo anaerobio (tomado de un tanque séptico de aguas residuales domésticas) y 300 mL de agua residual y se mantuvo una mezcla lenta con agitación constante, el reactor se tapó herméticamente y se permitió la salida de los gases producidos por una manguera hasta una solución de neutralización con NaOH al 10%. Ambos tratamientos duraron 72 h y cada 24 h se hizo seguimiento a la mineralización mediante COT, a la concentración de fármacos presentes (fueron agregados a ARM: acetaminofén (ACT), sulfametoxazol (SMX), carbamazepina (CBZ) y diclofenaco (DCF), a nitratos y N-NH<sub>4</sub><sup>+</sup>. Los experimentos se hicieron por duplicado. Para los dos tratamientos biológicos, se encontraron diferencias significativas en el alcance de la mineralización y remoción de fármacos cuando la concentración de COT inicial (COT<sub>0</sub>) se incrementa. Para COT<sub>0</sub> de 19 y 128 mg. L<sup>-1</sup> se obtuvieron remociones de 64% y 95% respectivamente para el tratamiento aerobio y de 72% y 91% respectivamente para el tratamiento anaerobio. El resultado demuestra que ante cargas altas de materia orgánica la eficiencia de la mineralización mejora. El tratamiento anaerobio mostró que la degradación de los 4 fármacos adicionados al ARM incrementó con el incremento en la COT<sub>0</sub>. El tratamiento aerobio remueve entre el 80-100% de los fármacos indistintamente de la COT<sub>0</sub>. El ACT presentó remoción del 100% en todos los tratamientos excepto durante el anaerobio con alta COT<sub>0</sub>. Durante el tratamiento anaerobio, los fármacos SMX, CBZ y DCF incrementaron su eliminación con el incremento en la COT<sub>0</sub> (remociones entre 30 y 34% hasta remociones entre 55% y 77%). Como se esperaba, la concentración de NO<sub>3</sub><sup>-</sup> se incrementó drásticamente y la de N-NH<sub>4</sub><sup>+</sup> se redujo lentamente durante el tratamiento aerobio. Durante el anaerobio, la concentración de nitratos sufrió fluctuación con tendencia a incrementar levemente y se incrementó la de N-NH<sub>4</sub><sup>+</sup>, lo que sugiere mineralización con aceptores de electrones diferentes a NO<sub>3</sub><sup>-</sup>, reducción disimiliativa de nitratos a amonio y producción de N-NH<sub>4</sub><sup>+</sup> vía oxidación anaerobia.

**Palabras clave:** Oxidación biológica; Oxidación avanzada; Agua residual.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Aislamiento, Caracterización y Evaluación Biológica de las Resinas Glicosídicas de *Ipomoea purpurea*

**Jonathan Andrés Huertas-Beltrán<sup>a\*</sup>, Kelly Johana Muñoz-Losada<sup>b</sup>, Jhon Fredy Castañeda-Gómez<sup>c</sup>**

<sup>a, b</sup> Estudiantes de Licenciatura en Ciencias Naturales: Física, Química y Biología, Universidad Surcolombiana, Neiva – Huila, Colombia.

<sup>c</sup> Docente de Licenciatura en Ciencias Naturales y Educación Ambiental, Universidad Surcolombiana, Neiva – Huila, Colombia.

Email: <sup>a</sup> jonathanhuertasb@gmail.com, <sup>b</sup> johamu304@gmail.com, <sup>c</sup> jhon.castaneda@usco.edu.co

### Resumen

El género *Ipomoea* está representado por una variedad de especies reconocidas por sus propiedades medicinales y terapéuticas. Sus metabolitos secundarios presentan alto potencial para contrarrestar el efecto de las bombas de eflujo desarrolladas principalmente por bacterias Gram-positivas, Gram-negativas y células cancerígenas. A pesar de las investigaciones que se hacen actualmente para que las quimioterapias cumplan su objetivo, la resistencia que presentan las células cancerígenas a agentes citotóxicos constituye un gran obstáculo para la curación de los pacientes ya que se han identificado varios genes, proteínas y vías metabólicas implicados en el fenómeno de resistencia a múltiples fármacos. En este sentido, se aislaron glicolípidos mediante la técnica de cromatografía de alta eficiencia en fase reversa y sus estructuras fueron identificadas mediante técnicas espectroscópicas como resonancia magnética nuclear <sup>1</sup>H, COSY, TOCSY, HSQC y HMBC; así como la espectroscopía de masas. Los glicolípidos aislados de *I. purpurea* se identificaron como tetrasacáridos conformados por un núcleo de azúcares compuesto por una unidad de glucosa y tres de ramnosa reportada como ácido glicosídico E. Adicional a esto, se identificaron los ésteres que se encuentran acilando este núcleo como el ácido octanoico, decanoico, hexadecanoico y octadecanoico. Las evaluaciones biológicas consistieron en el bioensayo de *Artemia salina* para identificar la toxicidad de los extractos calculando el CL<sub>50</sub> identificando que el extracto hexánico fue el más tóxico a una concentración de 314,9 µg/mL, así como su evaluación para determinar su potencial como modulador de resistencia a múltiples fármacos empleados en la quimioterapia contra el cáncer. El compuesto aislado no fue citotóxico para células MCF-7 (carcinoma de mama), HeLa (carcinoma de cerviz) y HCT-116 (carcinoma de colon) a concentraciones 0.004-0.016 µg/mL y utilizando vinblastina y colchicina como controles positivos. En el ensayo de modulación, las células MCF-7 S, MCF-7/Vin- y MCF-7/Vin+ fueron expuestas a diferentes concentraciones de Vinblastina desde 0.00064- 10 µg/mL, un fármaco citotóxico empleado principalmente para la quimioterapia contra el cáncer de mama, testicular, pulmonar, de cabeza y cuello. Se considera un agente modulador aquellos compuestos que presentan factores de reversión superiores al control positivo. En este ensayo, el compuesto de prueba resultó ser menos potente que el control positivo, ya que los factores de reversión para las líneas MCF-7 S, MCF-7/Vin- y MCF-7/Vin con reserpina como control positivo fue de 143.3, 44.2 y 16.9 mientras que el compuesto P6-1 obtuvo valores inferiores a 2.

**Palabras clave:** Ipomoea, glicolípidos, aislamiento, caracterización, citotoxicidad, modulación.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Determinación de un método para la extracción y cuantificación de DMT por Cromatografía de gases masas (CG-MS) en pócimas de Yagé

**Wilfre Lean Torres Naranjo,<sup>a</sup> Jhon Ironzi Maldonado Rodríguez <sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia y Código postal 180001

Email: j.maldonado@udla.edu.co, wil.torres@udla.edu.co

### Resumen

El Ayahuasca o yagé es un brebaje o bebida sagrada de carácter psicoactivo que se ingiere en una ceremonia ritual indígena de reflexión y limpieza. En los últimos años su uso se ha extendido a poblaciones no indígenas, visitantes o turistas que buscan al chaman para hacer parte de estas ceremonias como prácticas recreativas. Este brebaje es caracterizado por su alto contenido de alcaloides tales como  $\beta$ -carbolicinas y el N,N-dimetiltriptamina (DMT) cuyos contenidos podrían variar dependiendo de la zona geográfica donde se consume. En Caquetá y otras regiones de la amazonia se han presentado accidentes por intoxicación debido al consumo de esta bebida, en algunos casos con resultados mortales. Algunos países han comenzado a cuantificar el contenido de estos alcaloides como una primera medida hacia el camino de prácticas seguras. En Caquetá aún no se conocen estudios de este tipo.

En este trabajo se muestran los resultados preliminares de la extracción y cuantificación de la dimetiltriptamina por cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas, (CG-MS), a partir de pócimas de yagé suministradas por la comunidad indígena "Los Inganos" del Caquetá. Se establecieron las condiciones de extracción de dimetiltriptamina en condiciones básicas y posterior separación líquido-líquido con diclorometano. Del mismo modo se establecieron las condiciones por CG-MS empleando una columna de inyección manual y helio como fase móvil. Como resultado se logró la separación de DMT la cual aparece en un tiempo de retención de 16.36 minutos. Finalmente, como resultado preliminar se estableció que tanto el método de extracción como el de separación por CG-MS, pueden ser un método viable para la cuantificación de DMT en pócimas de yagé en Caquetá.

**Palabras clave:** Yagé; *Psychotria Viridis*; *Banisteriopsis caapi*.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Perfil de ácidos grasos de lípidos totales de semilla de *Theobroma cacao* provenientes del departamento del Huila, usando prensado artesanal

Jennifer Cruz, <sup>a\*</sup>, Wilson Rodríguez <sup>b</sup>, Juan Carlos Suarez <sup>c</sup>, Enith Osorio <sup>d</sup>, Jefferson Sánchez <sup>e</sup>.

<sup>a</sup> Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia, 180001

<sup>b</sup> Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia, 180001

<sup>c</sup> Tecnoparque Agroecológico Yamboró, Pitalito, Colombia, 417030

<sup>d</sup> Tecnoparque Agroecológico Yamboró, Pitalito, Colombia, 417030

Email: <sup>a</sup> j.cruz@udla.edu.co, <sup>b</sup> w.rodriguez@udla.edu.co, j.suarez@uniamazonia.edu.co.

### Resumen

Se evaluó el proceso de obtención de lípidos totales de semillas de *Theobroma cacao* mediante la extracción con prensa artesanal de tornillo simple. Se llevó a cabo la optimización de la extracción y la transesterificación de grasa de cacao, conservando al menos tres variables en cada proceso. Siendo las mejores condiciones de extracción un tamaño de particular de 0,5mm, 10g de muestra y 300s de extracción. Las mejores condiciones de transesterificación usando catálisis homogénea y básica, fueron 5h, a 300rpm, 60°C, una proporción alcohol:grasa (6:1) y una concentración KOH-MeOH 0,05M, finalmente los rendimientos estuvieron comprendidos entre 9,02 y 16%; fracción que compone hasta el 37% del contenido total de manteca en semillas de cacao. La fracción lipídica estuvo comprendida por una mezcla de ésteres metílicos de ácidos grasos con abundancia relativa según perfil cromatográfico; entre el 96 y 98%. Se identificaron 15 ácidos grasos de los cuales 7 fueron ácidos grasos saturados con una longitud de cadena media de 14 a 24 átomos de carbono y 6 ácidos grasos insaturados, además de 2 ácidos grasos inusuales: el ácido 9,10-epoxi-octadecanoico y el ácido 9,10-dihidroxi-octadecanoico.

**Palabras clave:** prensado; cocoa; manteca, ácidos grasos, *Theobroma cacao*.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Evaluación teórica de las interacciones moleculares del glifosato presentes en solución acuosa

Dumer Sacanamboy Papamija<sup>a</sup>, Laura Polania Varón<sup>a</sup>, Elkin A Tilvez<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Universidad de la Amazonia, Programa de Química, Florencia-Caquetá, Colombia 180002

Email: d.sacanamboyp@udla.edu.co; lau.polania@udla.edu.co

### Resumen

En el presente trabajo se ha propuesto una evaluación computacional de las interacciones moleculares que pueden tener lugar en una molécula de glifosato con una y dos moléculas explícitas de agua en fase condensada, con el objeto de conocer la naturaleza de las interacciones intermoleculares generadas entre dos especies químicas. Para conocer la conformación más favorable de la molécula del glifosato (GLF), se llevó a cabo un análisis conformacional utilizando el campo de fuerza universal (UFF). Posteriormente, se determinaron las posibles interacciones de las especie química  $GLF-(H_2O)_n$ , ( $n=1,2$ ) a partir de la generación de mil posibles conformaciones para cada sistema utilizando el algoritmo snippetkick. Las conformaciones obtenidas se optimizaron mediante el uso del método semiempírico PM6-DH2 que esta parametrizado para sistemas con interacciones no covalentes. Finalmente, se seleccionaron 20 conformaciones representativas  $GLF-H_2O$  y 25 conformaciones  $GLF-(H_2O)_2$  para analizar la naturaleza de las interacciones presentes mediante un análisis QTAIM.

Los resultados evidencian que la estabilidad de los complejos es predominante en las conformaciones donde se presentan interacciones de las moléculas de agua con los átomos de oxígeno del grupo fosfato a través de interacciones de tipo puentes de hidrógeno. Dichas interacciones demuestran el rol estabilizador las moléculas de agua. El estudio QTAIM, evidencia la formación de puntos críticos de anillo en múltiples sistemas, involucrando una o dos moléculas de agua, favoreciendo la estabilidad del sistema.

**Palabras clave:** Glifosato; semiempírico; Interacciones moleculares, Simulación

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Síntesis de una serie de bases de Schiff del tipo *N,N'*bis(benciliden)etanamina, potencialmente activas frente a bacterias patógenas

**Ana María Angulo-Jiménez<sup>a</sup>, Luis H. Acosta-Vega<sup>b</sup>, Lorena López-Cuéllar<sup>c</sup> y Luz Stella Nerio<sup>d\*</sup>**

<sup>a,b,c,d</sup> Semillero de Investigación SIABICO, Programa de Química, Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia, Código postal: 180001.

Email: <sup>a</sup>an.angulo@udla.edu.co, <sup>b</sup>lu.acosta@udla.edu.co, <sup>c</sup>alo.lopez@udla.edu.co, <sup>d</sup>l.nerio@udla.edu.co

### Resumen

Las enfermedades infecciosas son una de las principales causas de muerte, las altas resistencias hacia los antibióticos convencionales generan enormes problemas de salud, constituyéndose en un desafío para la medicina moderna; puesto que las bacterias mutan continuamente generando una necesidad por optimizar la propagación de nuevos agentes antimicrobiales que sean mucho más efectivos. La ausencia de tratamientos efectivos es la principal causa de este problema, por lo tanto, el desarrollo de nuevos agentes antibacteriales con nuevos y mecanismos de acción más eficientes es definitivamente una necesidad médica urgente. Dentro de los fármacos que están siendo utilizados para tratar este problema, se encuentran los compuestos del tipo imina; sin embargo, a pesar de que existe una gran variedad de compuestos imínicos que han resultado bioactivos frente a este tipo de especies, aún no se cuenta con información acerca de las propiedades antibacteriales de diiminas del tipo: *N,N'*-bis(benciliden)etanamina, las cuales pueden obtenerse en un sólo paso y con buenos rendimientos.

Por tanto, se desarrolló la síntesis de una serie de compuestos del tipo *N,N*bis(benciliden)etilendiamina, a través de la reacción de condensación entre etilendiamina y compuestos carbonílicos aromáticos (benzaldehído, acetofenona, *p*-clorobenzaldehído, vainillina), con rendimientos que variaron de acuerdo con el grado de reactividad del grupo carbonilo y la solubilidad de cada diimina. Todos los compuestos fueron caracterizados a través de su punto de fusión y espectroscopía infrarrojo, encontrándose en todos los casos la banda característica de la tensión del enlace C=N entre 1600 y 1700 cm<sup>-1</sup>. Posteriormente estos compuestos serán evaluados frente a las bacterias: *Staphylococcus aureus* ATCC 33862 y *Escherichia coli* ATCC 25922.

**Palabras clave:** bases de Schiff; síntesis; bacterias patógenas.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

# Extracción, purificación y caracterización de arcilla natural del Departamento de Caquetá y su potencial Aplicación en la adsorción de Cobre.

**Paula Murcia<sup>a\*</sup>, Ángela Cuéllar<sup>a</sup>, Carolina Pinzon<sup>a</sup>, Angie Domínguez<sup>a</sup>, Luis Fernando Rojas<sup>a</sup>,  
Adriana Cangrejo<sup>a</sup>, Liliana Burgos, Gillary Peña<sup>a</sup>, Lisette Ruiz Bravo<sup>a</sup>**

<sup>a</sup> Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Universidad de la Amazonia  
Email: pau.murcia@udla.edu.co

## Resumen

El incremento de la población mundial, ha traído consigo un aumento productivo a nivel industrial, agrícola y minero, generando simultáneamente residuos que alteran los ecosistemas y contaminan el ambiente. La mayoría de estos contaminantes son depositados en las fuentes hídricas sin previo tratamiento modificando la calidad del agua (Londoño et al. 2016; Reyes et al. 2016) En el departamento del Caquetá, esta problemática es propiciada principalmente por las actividades agrícolas y la minería del oro de aluvión, siendo esta última la que genera alto impacto al producir residuos de mercurio y cobre utilizados en el proceso. En este contexto, la comunidad científica ha invertido esfuerzos en buscar alternativas para la remoción de estos metales del recurso hídrico. En los últimos años, se han realizados estudios los cuales han señalado a las arcillas como materiales adsorbentes efectivos en la remoción de metales pesados (Crini & Badot, 2010; Srinivasan. 2011; Zacaroni, 2015). En este trabajo se realizó la extracción de una fracción de suelo arcilloso proveniente del municipio de El Doncello – Caquetá; el suelo se secó a 80 °C por 24 h, se tamizó utilizando una malla de 1 mm seleccionando la fracción fina (< 1 mm); se realizó una suspensión suelo tamizado/agua en una proporción 25g/l, se agitó vigorosamente por 3 minutos y se dejó sedimentar a ese mismo tiempo; posteriormente se separó la fracción de arcilla suspendida que se encontraba en los primeros 10 cm y se dejó secar a temperatura ambiente por 24 horas. La fracción de arcilla cruda obtenida se purificó utilizando polimetafosfato de sodio para eliminar la fase cuarzo; seguidamente se homoionizó con NaCl. Los minerales de arcilla cruda y purificado se caracterizaron por DRX, IR, FRX. La evaluación de la capacidad de adsorción de cobre (II) de la arcilla obtenida se realizó a través del método en lotes batch, utilizando soluciones de sulfato de cobre en un rango de concentraciones entre 1,2 – 5,0 ppm en un rango de pH entre 3 – 9 en una relación arcilla/solución Cu de 10 mg/10 mL, dejando en contacto por 12 h. El seguimiento a la concentración residual de Cu (II) se realizó usando espectroscopía UV – vis a una longitud de onda de 510 nm. Se espera que la arcilla adsorba eficientemente el metal debido a la elevada capacidad de intercambio iónico que poseen estos materiales, como lo reportan investigaciones previas en las cuales se han encontrado porcentajes de adsorción que van del 80 hasta el 99 % (Liu & Zhou, 2010; Garófalo & Alves, 2011; Melichová & Hromada, 2013; Aljlil & Alsewailem, 2014).

**Palabras clave:** Adsorción; Arcillas; Metales pesados; intercambio iónico.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Determinación de las propiedades Antiofídicas del extracto metanólico de *Petiveria alliacea* frente al veneno de *Bothrops atrox*.

**Sebastian Saldarriaga Muñoz<sup>a</sup>, Yudy Lorena Silva<sup>b</sup>.**

<sup>a, b</sup> Universidad de la amazonia, Florencia – Caqueta, Colombia.

Email: <sup>a</sup> s.saldarriaga@udla.edu.co, <sup>b</sup> yu.silva@udla.edu.co

### Resumen

Este estudio abordó el posible potencial antiofídico que el extracto metanólico de *Petiveria alliacea* (anamú) presenta de forma in-vitro frente al veneno de *Bothrops atrox* proveniente del pie de monte amazónico colombiano. Para esto se caracterizaron las propiedades ofídicas más comunes del veneno: Contenido proteico, actividad coagulante, actividad fosfolipásica A2, Actividad Hemolítica indirecta y finalmente actividad proteolítica, seguido de la inhibición o efecto alexitérico que el extracto metanólico de anamú presento sobre las mismas. Obteniéndose de esta forma un contenido proteico del 90 % en base seca, dosis mínima coagulante en Fibrinógeno en 10µg y una inhibición del 100% de dicha actividad a bajas concentraciones de extracto 20µg para hojas y 40µg para raíces, actividad fosfolipásica de 1328.7(unidad efectiva fosfolipásica) e inhibición del 60.67%, 23.00±7.94 para hojas y raíces. Respectivamente. Demostrando así un gran potencial antiofídico que se debe estudiar y relacionar con aspectos fitoquímicos del extracto.

**Palabras clave:** Actividad alexitérica; Actividades ofídicas; inhibición; *Petiveria alliacea*; *Bothrops atrox*

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Estudio de fitorremediación de metales pesados utilizando macrófitos flotantes: Lemna minor

Juan David Valencia Rodríguez\*, Juan Pablo Ballesteros Salguero, Francis Steven Sánchez Garzón, Jaime Fernando Martínez Suarez.

<sup>a</sup> Universidad de la amazonia, Florencia, Colombia"

Email: juand.valencia@udla.edu.co, j.ballesteros@udla.edu.co, fr.sanchez@udla.edu.co, jai.martinez@udla.edu.co

### Resumen

Este trabajo tiene como objetivo destacar la capacidad de la lenteja de agua (Lemna minor) como absorbente de metales pesados, a través de un proceso de fitoextracción y fitoacumulación, el propósito del estudio es conocer la capacidad de absorción esta planta macrófita cuando es sometida a soluciones de metales pesados como  $Cd^{2+}$  y  $Hg^{2+}$ . Los experimentos realizados consistieron en hacer pasar soluciones de los metales mencionados por una columna empacada con lenteja de agua previamente secada, molida y tamizada. Las soluciones preparadas en agua desionizada fueron analizadas mediante voltamperometría cíclica, las medidas fueron realizadas a las soluciones antes y después del proceso de fitoextracción. Como resultados relevantes, se observó una acumulación de Cadmio (Cd) y Mercurio (Hg) empleando soluciones de concentración  $5 \times 10^{-5}$  M y una cantidad entre 0,7000 y 1,0000 g de lenteja de agua seca, los métodos de extracción se realizaron a gravedad y empleando vacío para disminuir el tiempo del proceso.

**Palabras clave:** Lenteja de Agua; Fitoextracción; Fitoacumulación; Macrófita; Voltamperometría.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Estudio antibacteriano de los compuestos sintetizados de benzimidazol y derivado de 1,3-dihidropirimidinona

Ángela Cuellar <sup>\*a</sup>, David González<sup>a</sup>, Tarin A. Lucero<sup>a</sup>

<sup>a</sup> Universidad de la Amazonia

Email: ange.cuellar@udla.edu.co

### Resumen

El presente trabajo demuestra la síntesis, caracterización y actividad biológica de los compuestos heterociclos 6- (4-clorofenil) -4-metil-2-oxo-1,2 dihidropirimidina-5-carboxilato de etilo (dhip) en la reacción de Biginelli y compuesto de Benzimidazol. Este último se llevó a cabo en la condensación de ácido fórmico y la o-fenildiamina en reflujo sin solventes durante 1h. La preparación de 1,2-dihidropirimidinona, se sintetizó por reflujo con etanol catalizada con cloruro de calcio durante 2,5h. Para la caracterización, se tomaron puntos de fusión para ambos compuestos y Espectrometría IR. Se obtuvo punto de fusión para dhip de 210 -212°C recristalizado con etanol y para el Benzimidazol 168 - 170°C recristalizado con agua. No se tomó un control de reacción con cromatografía de capa fina (CCF).

Para el ensayo de la actividad antimicrobiana, se adquirieron cepas de *Staphylococcus aureus* y *Escherichia coli* previamente aisladas y caracterizadas. Mediante el método de kirby-bauer, se preparó 3 sensibilizadores de papel filtro con tres concentraciones diferentes y un blanco como control en cada cajita de Petri de policarbonato. El medio de cultivo se realizó en agar Müller-Hinton donde se inoculó las cepas con turbiedad equivalente de 0,5 del nefelómetro McFarland. El tiempo de incubación fue de 48h a 30°C. El diámetro de inhibición fue medido con una escala de precisión. Los resultados arrojaron que el dhip inhibió en mayor proporción que el Benzimidazol y en menor concentración con respecto a las demás.

**Palabras clave:** antimicrobiano; benzimidazol; reacción de Biginelli; kirby-bauer.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

## Prototipo de sistematización de riego para un cultivo de forraje verde hidropónico

**Yudy Vanessa Pérez-Galindo,<sup>a</sup> Daniel Toquica-Agudelo,<sup>b</sup> Diana Katherine Pastrana-Álzate<sup>c</sup> y Sugey M. Martínez-Gómez<sup>d</sup>**

<sup>abc</sup> Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia 18001 Facultad de Ingeniería, Ingeniería de Sistemas

<sup>d</sup> Universidad de la Amazonia, Florencia, Colombia 18001 Facultad Ciencias Básicas, Química

Email: yudy.perez@udla.edu.co, j.toquica@udla.edu.co, di.pastrana@udla.edu.co, y su.martinez@udla.edu.co

### Resumen

La sistematización del riego del cultivo hidropónico, parte del ingenio y creatividad de un grupo de estudiantes de segundo semestre de ingeniería de sistemas, como solución a un proyecto de aula, del curso de química I, donde se planteó la necesidad de reducir el tiempo de trabajo en la producción de forraje verde de maíz, como alimento para animales de granja. El sistema de riego empleado fue por aspersión, de forma que los aspersores se conectaron a la bomba mediante mangueras de 0,5 cm de diámetro por la boquilla de salida de la bomba, la cual a su vez se conecta a la solución nutritiva por la boquilla de entrada, y es activada por la señal que envía el Arduino UNO R3, que corresponde al algoritmo diseñado y cargado en él, siendo esta herramienta la que funciona como el "cerebro" del sistema de riego elaborado.

Éste envía la señal aun Relay el cual a su vez traduce esta información activando la bomba y suministrando la sustancia al forraje verde, todo este montaje funcionó al ser conectado a una fuente de poder de 230 W. Como materia prima para el forraje verde se emplearon 90 g de dos tipos diferentes de semillas: D-1 (cultivada en San Antonio de Atenas) y S-1 (maíz comercial para consumo animal). Se empleó una solución nutritiva elaborada en el laboratorio con diferentes sales que proporcionaron los macro y micronutrientes al forraje verde de maíz, el cual fue regado los primeros cuatro días con agua, los siguientes siete días con la solución nutritiva y los últimos dos días nuevamente con agua. El riego se realizó cada 3 horas por 10 segundos de aspersión suministrando 5 mL aproximadamente de líquido.

Como resultado se obtuvo un sistema de riego funcional, el cual proporciono tanto el agua como la solución nutritiva según el código diseñado, teniendo como parámetro clave y decisivo para su funcionamiento la unidad de tiempo en el que se codifica el Aruduino UNO R3, el cual debe ser en milisegundo (ms) y considerar el tiempo de retardo en el llenado de la bomba. Luego de 15 días de riego se obtuvo que la semilla D-1 produjo plantas con una altura de 47 cm, mientras, la semilla S-1 tan solo llego a una altura de 21 cm, comparando estos datos con la altura esperada de 25 cm según la literatura científica obtuvimos que la semilla D-1 creció 22 cm más de lo esperado, a diferencia del S-1 que no alcanzo los 25 cm quedando 4 cm por debajo de lo esperado, lo que se puede concluir es que la especie de la semilla es un parámetro importante para la producción del alimento para animales de granja. Por otro lado, la adición de la solución nutritiva en el día 5 aceleró el crecimiento del forraje verde de la semilla D-1 de 5,5 cm a 12 cm de altura obteniéndose un incremento de 6,5 cm, de igual forma, observamos este incremento para las semillas S-1 de 1,5 cm a 4 cm de altura obteniéndose un incremento de 2,5 cm, lo cual nos indica el efecto positivo de la solución en el crecimiento de las plantas, sin embargo, se evidencia que las semillas D-1 es la más apropiada de las dos muestras evaluadas siendo la más eficiente para la producción de forraje verde.

**Palabras clave:** Sistematización; forraje verde; solución nutritiva.

**Conflicto de intereses:** Los autores manifestamos que no tenemos ningún conflicto de intereses.

**GRUPOS DE INVESTIGACIÓN**  
UNIVERSIDAD DE LA AMAZONIA  
FACULTAD DE CIENCIAS BASICAS  
PROGRAMA DE QUIMICA

| Identificación  | Objetivos   | Contacto   |
|---|---|--|
| <p align="center"><b>GRUPO DE INVESTIGACIÓN EN PRODUCTOS NATURALES AMAZONICOS (COL0125269)</b></p>      | <p>Realizar investigaciones interdisciplinarias que aborden aspectos de la química de los productos naturales en la amazonia colombiana. - Crear un espacio de investigación, discusión y difusión sobre el uso y aprovechamiento sostenible de los recursos naturales amazónicos.</p>  | <p>LIDER: <b>ALBERTO FAJARDO OLIVEROS</b><br/>Doctor en Ciencias Químicas<br/>Email: albefao@gmail.com</p> <p>GrupLAC: <a href="https://scienti.minciencias.gov.co/gruplac/jsp/visualiza/visualizagr.jsp?nro=00000000012662">https://scienti.minciencias.gov.co/gruplac/jsp/visualiza/visualizagr.jsp?nro=00000000012662</a></p>                                   |
| <p align="center"><b>GRUPO DE INVESTIGACIÓN MATERIALES, AMBIENTE Y DESARROLLO-MADE(COL0142565)</b></p>  | <p>Fomentar la investigación sobre procesos para tratamiento de aguas. Investigar sobre materiales de la amazonia buscando nuevas aplicaciones de los mismos. Iniciar, coordinar y estimular investigaciones relacionadas con el estudio de materiales de la amazonia y procesos de descontaminación de aguas residuales fomentando la formación de talento humano a nivel regional y nacional.</p>   | <p>LIDER: <b>LIS MANRIQUE LOSADA</b><br/>Magister en Ingeniería Química<br/>Email: lismanrique@gmail.com</p> <p>GrupLAC: <a href="https://scienti.minciencias.gov.co/gruplac/jsp/visualiza/visualizagr.jsp?nro=00000000014461">https://scienti.minciencias.gov.co/gruplac/jsp/visualiza/visualizagr.jsp?nro=00000000014461</a></p>                                 |
| <p align="center"><b>GRUPO DE INVESTIGACIÓN ESTRATEGIAS COMPUTACIONALES EN QUIMICA (COL0156524)</b></p> | <p>Generar nuevo conocimiento sobre los sistemas químicos y su aplicación a la solución de problemas de interés regional, nacional o mundial utilizando simulaciones computacionales. -Formar talento humano altamente capacitado de pregrado y posgrado con capacidad de aprovechar los recursos computacionales para el estudio de sistemas químicos -Predecir propiedades físicas, químicas y biológicas de nuevas moléculas con posibles aplicaciones farmacéuticas o agroindustriales - Desarrollar nuevos métodos teóricos y computacionales para el estudio de las propiedades de las moléculas y las mezclas -Analizar resultados experimentales complejos utilizando herramientas matemáticas y computacionales avanzadas.</p> | <p>LIDER: <b>ELKIN ALBERTO TILVEZ MARRUGO</b><br/>Doctor en Química Teórica y Modelización Computacional<br/>Email: e.tilvez@udla.edu.co</p> <p>GrupLAC: <a href="https://scienti.minciencias.gov.co/gruplac/jsp/visualiza/visualizagr.jsp?nro=00000000015856">https://scienti.minciencias.gov.co/gruplac/jsp/visualiza/visualizagr.jsp?nro=00000000015856</a></p> |

## RECONOCIMIENTO

El comité organizador agradece especialmente al Doctor Alberto Fajardo Oliveros, quien desde la Vicerrectoría de Investigaciones y Posgrados de la Universidad de la Amazonia, apoyó la organización y participó en el desarrollo del VII Seminario Internacional de Química Aplicada para la Amazonia (SEQUIAMAZ), y la II Escuela Andino -Amazónica en Química (EAAQ).