

**15-16**  
**NOVIEMBRE**  
**2023**

**X** UNTANZA DE  
**I** NVESTIGADOR@S  
**N** OV@S NO ÁMBITO DA  
**Q** UÍMICA

**LIBRO DE RESUMOS**

*Facultade de Química*  
Universidade de Santiago de Compostela



## III Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da Química

# LIBRO DE RESUMOS

Santiago de Compostela, 2023

Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela

HDL: <http://hdl.handle.net/10347/31360>

Distribuída baixo licenza *Creative Commons* 4.0 (CC BY 4.0)



### COMITÉ CIENTÍFICO

- Ana María González Noya
- José Benito Quintana Álvarez
- Antonio Rumbo Gómez
- Carlos Vázquez Vázquez (coordinador)

### COMITÉ ORGANIZADOR:

- Paula Antelo Riveiro
- Uxía Barreiro Sisto
- Javier Corral Sertal
- Cristina González Barreira
- Adrián López Teijeiro
- Paula Oreiro Martínez

Organiza: Comisión de Normalización Lingüística da Facultade de Química, co apoio do Servizo de Normalización Lingüística da USC

# ÍNDICE

## INDICE

|                                                                                                                                                                                                                        |           |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|
| <b>PRESENTACIÓN .....</b>                                                                                                                                                                                              | <b>5</b>  |
| <b>PROGRAMA.....</b>                                                                                                                                                                                                   | <b>6</b>  |
| <b>RESUMOS .....</b>                                                                                                                                                                                                   | <b>10</b> |
| Comunicación C-1 – Análise de residuos de xiringas como novo indicador do consumo de drogas por vía intravenosa.....                                                                                                   | 11        |
| Comunicación C2 - Desenvolvemento e aplicación dunha metodoloxía analítica para a análise de compostos orgánicos perigosos en partículas de caucho de pneumáticos.....                                                 | 13        |
| Comunicación C3 - Estudo da bioaccesibilidade <i>in vitro</i> de parafenilendiaminas e outros compostos orgánicos presentes no granulado de caucho reciclado. ....                                                     | 15        |
| Comunicación C4 - Retos da administración oral e novos enfoques de estabilización de proteínas terapéuticas: o sistema IC-Tagging como unha novidosa solución.....                                                     | 17        |
| Comunicación C5 - Explorando a batalla a nivel celular: como os péptidos antimicrobianos se involucran coas membranas celulares cambiados pola COVID-19 a través de simulacións de Dinámica Molecular .....            | 19        |
| Comunicación C6 - Micro-nanoplateformas pole-nanoestructuras lipídicas para a asociación de rifabutina. ....                                                                                                           | 21        |
| Comunicación C7 - Síntese de complexos derivados de ligandos <i>bíscarbamato</i> e o estudo da súa hidrólise autoinmolante. ....                                                                                       | 23        |
| Comunicación C8 - Estudo coordinativo dun ligando bifuncional derivado de o-carborano.....                                                                                                                             | 25        |
| Comunicación C9 - A helicidade na natureza e na química do ferro .....                                                                                                                                                 | 27        |
| Comunicación C10 - Inclusión do fin de vida na avaliación ambiental dos biopolímeros plásticos .....                                                                                                                   | 29        |
| Comunicación C11 – O desempeño dos clústeres de Ag como catalizadores e inhibidores nas reaccións con HDDA.....                                                                                                        | 31        |
| Comunicación C12 - Hidrólise do substrato e enriquecemento de cultivos microbianos mixtos no mesmo reactor para obter PHA e TAG empregando ácido oleico.....                                                           | 33        |
| Comunicación C13 – Conmutación térmica resistiva .....                                                                                                                                                                 | 35        |
| Comunicación C14 - Reaccións abióticas promovidas pola maquinaria celular .....                                                                                                                                        | 36        |
| Comunicación C15 - Estudo da estabilidade de origamis de ADN .....                                                                                                                                                     | 38        |
| Comunicación C16 - Modelos matemáticos para a predición de parámetros reolóxicos .....                                                                                                                                 | 40        |
| Comunicación C17 - Estudo do metabolismo <i>in-vitro</i> da 1,3-difenilguanidina (DPG) e a 1,3-di-o-tolilguanidina .....                                                                                               | 42        |
| Comunicación C18 – Determinación de tramadol e o seu principal metabolito en líquido pericárdico mediante microextracción líquido-líquido dispersiva e cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas ..... | 44        |
| Comunicación C19 - Estudo da interacción entre péptidos de amiloide monoméricos e proteínas seroalbuminas con técnicas de fluorescencia.....                                                                           | 46        |
| Comunicación C20 - Catálise heteroxénea de nanoclústeres de prata para reaccións de hidroxenación de CO <sub>2</sub> .....                                                                                             | 48        |
| Comunicación C21 - Detección automática de virus respiratorio .....                                                                                                                                                    | 50        |

|                                                                                                                                                                                                    |    |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Comunicación C22 - Un novo complexo de disprosio cun ligando azamacrocíclico $N_6$ amosando comportamento de SIM inducido por campo .....                                                          | 52 |
| Comunicación C23 - Síntese dunha estrutura metalosupramolecular helicoidal de cobre derivada dun ligando azina funcionalizado con grupos <i>ter</i> -butilo.....                                   | 54 |
| Comunicación C24 - Deseño de imáns moleculares de disprosio a partir dun ligando heptadentado $N_5O_2$ .....                                                                                       | 56 |
| Comunicación C25 - Novas perspectivas na inmovilización de enzimas de interese industrial: fabricando nanoreactores coa tecnoloxía IC-Tagging.....                                                 | 58 |
| Comunicación C26 - Isotermas $\pi$ -APL de monocapas lipídicas mediante simulacións de dinámica molecular e experimentos nunha balanza de Langmuir.....                                            | 60 |
| Comunicación C27 - Estudo da condutividade térmica do $Fe_3GeTe_2$ , un material bidimensional.....                                                                                                | 61 |
| Comunicación C28 - Evidenciando a presenza de almiscreos sintéticos en augas medioambientais mediante un método analítico baseado na extracción por sorción en fase téxtil (FPSE) e GC-MS/MS ..... | 63 |
| COMUNICACIÓNS PREMIADAS .....                                                                                                                                                                      | 65 |

# PRESENTACIÓN

A XINQ é un espazo de encontro no que as investigadoras e investigadores novos que desenvolven o seu traballo no ámbito da química poden dalo a coñecer ao resto da comunidade universitaria, e potenciar ao tempo as súas capacidades de comunicación en público en lingua galega.

Isto desenvólvese a través de sesións abertas de comunicacións orais nas que esta mocidade investigadora presenta, en lingua galega e cun enfoque divulgativo, algúns aspectos máis ou menos específicos do traballo que realiza ou da súa área de investigación.

Nesta segunda edición, a XINQ presentou como maior novidade a concesión de premios ás mellores comunicacións nas modalidades de máster e de doutoramento, segundo a valoración dos comités organizador e científico, e a do público asistente.

## PROGRAMA



---

#### Sesión Doutoramento 4

---

**Moderación:** Carlos Vázquez Vázquez e Javier Sertal Corral

**12:45 Comunicación (C-10) – Brais Vázquez Vázquez**

*Inclusión do fin de vida na avaliación ambiental dos biopolímeros plásticos*

**13:00 Comunicación (C-11) – Xinran Lu**

*O desempeño dos clústeres de Ag como catalizadores e inhibidores nas reaccións con HDDA*

**13:15 Comunicación (C-12) – José Ramón Lorenzo Larena**

*Hidrólise do substrato e enriquecemento de cultivos microbianos mixtos no mesmo reactor para obter PHA e TAG empregando ácido oleico.*

**13:30 Comunicación (C-13) – Víctor Álvarez Martínez**

*Conmutación térmica resistiva*

**13:45 Debate**

---

**14:05-16:00 Descanso para xantar**

---

---

#### Sesión Máster 1

---

**Moderación:** Antonio Rumbo Gómez, Cristina González Barreira e Uxía Barreiro Sisto

**16:00 Comunicación (C-14) – David Montoto Pintos**

*Reaccións abióticas promovidas pola maquinaria celular*

**16:15 Comunicación (C-15) – Beatriz Lista Lema**

*Estudo da estabilidade de origamis de ADN*

**16:30 Comunicación (C-16) – Paula Cambeses Franco**

*Modelos matemáticos para a predición de parámetros reolóxicos*

**16:45 Comunicación (C-17) – Iago Riveiro Rodríguez**

*Estudo do metabolismo in-vitro da 1,3-difenilguanidina (DPG) e a 1,3-di-o-tolilguanidina*

**17:00 Comunicación (C-18) – Laura Blanco García**

*Determinación de tramadol e o seu principal metabolito en líquido pericárdico mediante microextracción líquido-líquido dispersiva e cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas*

**17:15 Debate**

---

#### Sesión Doutoramento 5

---

**Moderación:** Carlos Vázquez Vázquez e Paula Antelo Riveiro

**17:40 Comunicación (C-19) – Diego Cora Calvo**

*Estudo da interacción entre péptidos de amiloide monoméricos e proteínas seroalbuminas con técnicas de fluorescencia*

**17:55 Comunicación (C-20) – Martín Dieste Places**

*Catálise heteroxénea de nanoclústeres de prata para as reaccións de hidroxenación de CO<sub>2</sub>*

**18:10 Comunicación (C-21) – Stella Hernández Faria de Moraes**

*Detección automática de virus respiratorio*

**18:25 Debate**

---

**18:40 Fin da xornada**

---

## Xoves 16 de novembro de 2023

**09:10 Presentación do segundo día da III Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da química**

### Sesión Doutoramento 6

**Moderación:** Ana María González Noya e Antonio Rumbo Gómez

**09:15 Comunicación (C-22) – Cristina González Barreira**

*Un novo complexo de disprosio cun ligando azamacrocíclico N6 amosando comportamento de SIM inducido por campo*

**09:30 Comunicación (C-23) – Uxía Barreiro Sisto**

*Síntese dunha estrutura metalosupramolecular helicoidal de cobre derivada dun ligando azina funcionalizado con grupos ter-butilo*

**09:45 Comunicación (C-24) – Paula Oreiro Martínez**

*Deseño de imáns moleculares de disprosio a partir dun ligando heptadentado N5O2*

**10:00 Debate**

### Sesión Doutoramento 7

**Moderación:** José Benito Quintana Álvarez e Carlos Vázquez Vázquez

**10:15 Comunicación (C-25) – Adrián López Teljeiro**

*Novas perspectivas na inmovilización de enzimas de interese industrial: fabricando nanoreactores coa tecnoloxía IC-Tagging*

**10:30 Comunicación (C-26) – Paula Antelo Riveiro**

*Isotermas  $\pi$ -APL de monocapas lipídicas mediante simulacións de dinámica molecular e experimentos en balanza de Langmuir*

**10:45 Comunicación (C-27) – Javler Corral Sertal**

*Estudo da condutividade térmica do  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ , un material bidimensional*

**11:00 Comunicación (C-28) – Ana Castiñeira Landeira**

*Evidenciando a presenza de almiscreos sintéticos en augas medioambientais mediante un método analítico baseado na extracción por sorción en fase téxtil (FPSE) e GC-MS/MS*

**11:15 Debate**

**11:35 Votacións finais**

### 11:45-12:15 Descanso para café

**12:15 Entrega de premios**

**12:30 Acto de clausura da III Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da química**

Jesús Sanmartín Matalobos (decano da Facultade de Química da USC), Carlos Vázquez Vázquez e Antonio Rumbo Gómez (membros do Comité Científico da XINQ\_3).

### 12:45 Fin da xornada

## RESUMOS

## Comunicación C-1 – Análise de residuos de xiringas como novo indicador do consumo de drogas por vía intravenosa

**C. Pernas-Fraguela<sup>1</sup>, X. González-Gómez<sup>1</sup>, A. Estévez-Danta<sup>1</sup>, R. Rodil<sup>1</sup>, J.B. Quintana<sup>1</sup>, R. Montes<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, Instituto de Investigación en Análises Químicas e Biolóxicas (IAQBUS), Universidade de Santiago de Compostela, Rúa Constantino Candeira S/N, 15782 Santiago de Compostela, España. Contacto: carlos.pernas@rai.usc.es.*

**Palabras chave:** química analítica; drogas de abuso; vía intravenosa

A análise das xiringas usadas, para a posterior identificación das substancias que conteñen, é un novo indicador para coñecer cal é o consumo actual das substancias de abuso por vía intravenosa. Ademais, facilita información sobre cales son as tendencias de consumo durante unha serie temporal, e pode ser posible detectar a aparición de substancias de abuso e adulterantes antes da súa declaración en enquisas ou incautación por parte das autoridades. Tendo isto en conta, e en colaboración con diversas organizacións, fíxose unha recolleita de xiringas usadas (tanto en prácticas sexuais de “Chemsex” coma noutro tipo de usuarios) en puntos de intercambio e salas de consumo de diversos puntos da xeografía española para analizar, non só as substancias consumidas, senón tamén se hai algún patrón de consumo segundo o lugar de residencia, o xénero ou calquera outro factor demográfico e/ou socioeconómico.

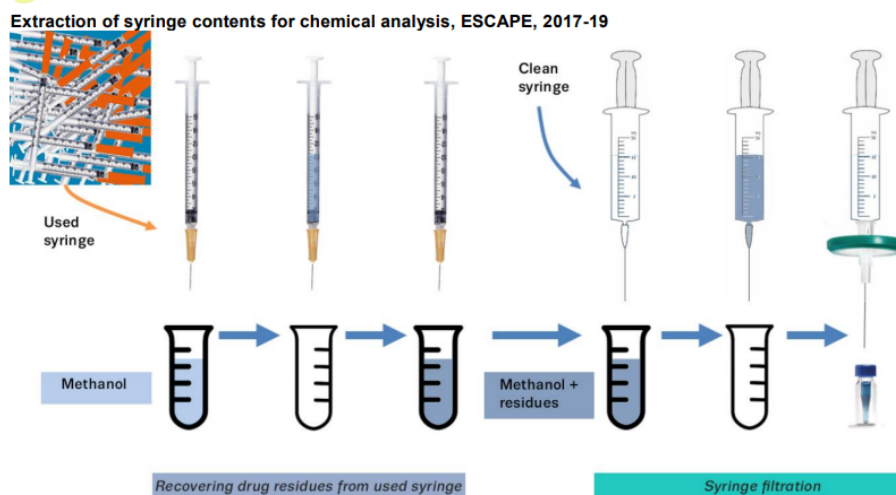
O primeiro paso no desenvolvemento da metodoloxía analítica consistiu en crear unha base de datos dos espectros de masas de 179 substancias. Dentro desta, atópanse as 35 substancias obrigatorias establecidas polo Observatorio Europeo das Drogas e Toxicomanías (EMCDDA, das súas siglas en inglés), co obxectivo de integrar os resultados no proxecto ESCAPE, e 144 adicionais que se consideran de interese ben pola súa recente aparición (nitazenos, novas substancias psicoactivas...) ou pola recente extensión do seu consumo (catinonas, derivados do fentanilo...)[1,2]

Deste xeito, adoptouse a metodoloxía analítica establecida no protocolo de ESCAPE do EMCDDA [3], que consiste, primeiro, en lavar cinco veces o corpo da xiringa con 1 mL de metanol para despois facer unha dilución de 20 µL da mostra con 180 de metanol. Tras isto, a dilución pásase a través dun filtro orgánico de 0,22 µm (Figura 1). Posteriormente, 1 µL deste extracto inyéctase nun sistema de cromatografía de líquidos acoplados a espectrometría de masas de alta resolución (LC-QTOF), en modo AutoMS/MS, facendo unha abordaxe do tipo *suspect screening*.

Tras as inxeccións, procédese ao tratamento de datos, cunha identificación tentativa a través do tempo de retención (no caso de haber patróns da substancia), a masa exacta e o espectro de MS/MS.

Ata o momento, foron procesadas tanto mostras de “ChemSex” (xénero masculino debido ás características desta práctica) como dun punto de recollida da cidade de Barcelona, con usuarios de ambos xéneros. Os resultados amosan diferencias, non só segundo a práctica, senón tamén segundo o xénero.

Por un lado, a substancia máis consumida en prácticas sexuais por vía intravenosa, presente no 100 % das mostras, é a clorometilcatinona, coñecida como clofedrona [4]. Pola súa parte, nos consumidores da sala de consumo de Barcelona destaca a presenza de cocaína en todas as xiringas analizadas (en ambos xéneros), mais tamén é relevante como a metanfetamina está presente no 80 % das mostras das usuarias de xénero feminino, mais non o está en ningunha do masculino, habendo unha distinción de consumo segundo o xénero.



**Figura 1.** Protocolo de extracción establecido no proxecto ESCAPE.

Actualmente, estanse a analizar máis mostras para saber como varía o consumo en función do punto de recollida, verificar os resultados actuais relativos ao xénero e afondar algo máis nas substancias empregadas durante a práctica de ChemSex, xa que existen compostos que aparecen na meirande parte das mostras e non foron identificados aínda.

### Agradecementos

Delegación do Goberno Español para o Plan Nacional Sobre Drogas (REF. 2022-PN065) e Fundación Gil Dávila, polo financiamento. Unidade Municipal de Atención a Drogodependencias (UMAD) de Santiago de Compostela, Asociación Médicos do Mundo, Fundación Érguete, Comisión antisida de Álava – Sidálava, Comisión cidadá antisida de Bizkaia – Bizkaisida, Àmbit Prevenció Fundació, Grupo ABD, Arquisocial, Fundación Saúde e Comunidade, MadridSalud, Agència de Salut Pública de Barcelona (ASPB) pola colaboración na recollida de mostras.

### Referencias

- [1] A. Evans, et al., *Forensic Science International*, 2021, 329, 111083
- [2] H. Gjerde, et al., *Scandinavian Journal of Public Health*, 2023, 51(1), 21 – 27.
- [3] *European Syringe Collection and Analysis Enterprise: Generic Protocol*, European Monitoring Centre for Drugs and Drug Addiction, February 2021.
- [4] T. Willeman, et al., *Harm reduction journal*, 2023, 20(1), 96

## Comunicación C2 - Desenvolvemento e aplicación dunha metodoloxía analítica para a análise de compostos orgánicos perigosos en partículas de caucho de pneumáticos

**A. Duque-Villaverde,<sup>1</sup> D. Armada,<sup>1</sup> T. Dagnac,<sup>2</sup> M. Llompart <sup>1</sup>**

<sup>1</sup> CRETUS, Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, Universidade de Santiago de Compostela, E-15782, Santiago de Compostela, España, andres.duque.villaverde@usc.gal<sup>2</sup> Centro de Investigacións Agrarias de Mabegondo (AGACAL-CIAM), Unidade de Contaminantes Orgánicos, Apartado 10, E-15080, A Coruña, España.

**Palabras chave:** Química analítica; cromatografía líquida; espectrometría de masas

Durante o proceso de fabricación dos pneumáticos, ao caucho engádenselle gran cantidade de axentes químicos, considerándose algúns deles contaminantes medioambientais. Unha forma de reciclar os pneumáticos fóra de uso é mediante o seu triturado, para obter granulado de caucho. Este granulado emprégase como recheo en campos deportivos de céspede artificial e como pavimento de parques infantís, e é considerado a maior fonte de contaminación de microplásticos intencionais. A Comisión Europea anunciou en setembro deste ano a súa prohibición, habendo 8 anos para adaptarse a esta nova regulación [1]. Un dos compostos orgánicos perigosos que compoñen o caucho de pneumáticos son o antiozonante 6PPD (*N*-(1,3-dimethylbutyl)-*N'*-phenyl-*p*-phenylenediamine), cuxo produto de transformación, a 6PPDq (*N*-(1,3-dimethylbutyl)-*N'*-phenyl-*p*-phenylenediamine-quinone), está relacionado coa mortalidade dun tipo de salmón en Norteamérica [2]. Outros axentes vulcanizantes e reticulantes, como o DPG (1,3-diphenylguanidine) e o HMMM (hexamethoxymetil melamine), tamén son de interese polas súas posibles implicacións no medio ambiente e na saúde humana [3,4].

Neste traballo desenvolveuse una metodoloxía analítica para a detección e cuantificación simultánea de 11 compostos orgánicos perigosos en mostras de caucho, baseada na extracción asistida por ultrasóns (UAE) seguida de cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS). Tras optimizar a metodoloxía UAE-LC-MS/MS mediante un deseño experimental, esta validouse en termos analíticos. Finalmente, aplicouse a unha ampla variedade de mostras reais, entre as que se inclúe granulado de caucho de campos e de parques infantís, así como tamén varias mostras de rodas. Ademais, tamén se analizaron varios materiais alternativos con fins comparativos. O antiozonante 6PPD alcanzou os niveis de concentración máis elevados nos campos de nova construción, chegando a concentracións de ata 0,2% p/p.

### Agradecementos

Esta investigación foi financiada polos proxectos RETOS PID2019-104336RB-I00, Proxecto de Xeración de Coñecemento PID2022-140148OB-I00 e UNST10-1E-491 (Ministerio de Ciencia e Innovación, España), ED431 2020/06 e IN607B 2022/15 (Programa de Grupos de Investigación Consolidados, Xunta de Galicia). Este estudo baséase no traballo e Rede de Estudo de Preparación de Mostra apoiado pola División de Química Analítica da Sociedade Europea de Química. Algúns dos autores pertencen á Rede Nacional para a sustentabilidade na preparación de mostra, RED2022-134079-T (Ministerio de Ciencia e Innovación, España). Todos estes programas están cofinanciados por FEDER (UE).

## Referencias

- [1] ECHA (European Chemical Agency). Microplásticos. <https://echa.europa.eu/hot-topics/microplastics>
- [2] Z. Tian, H. Zhao, K. T. Peter, et al., *Science*, 2021, 371 (6525), 185-189.
- [3] K. Müller, D. Hübner, S. Huppertsberg, *Science of The Total Environment*, 2022, 802, 149799.
- [4] C. Johannessen, P. Helm, C. D. Metcalfe, *Environmental Pollution*, 2021, 287, 117659.

## Comunicación C3 - Estudo da bioaccesibilidade *in vitro* de parafenilendiaminas e outros compostos orgánicos presentes no granulado de caucho reciclado.

**S. Sónora<sup>1\*</sup>, A. Duque-Villaverde<sup>1</sup>, D. Armada<sup>1</sup>, T. Dagnac<sup>2</sup>, M. Llompart<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> CRETUS, Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, Universidade de Santiago de Compostela, E-15792, Santiago de Compostela, España, [sergio.sonora.otero@usc.es](mailto:sergio.sonora.otero@usc.es)

<sup>2</sup> Centro de Investigacións Agrarias de Mabegondo (AGACAL-CIAM), Unidade de Contaminantes Orgánicos, Apartado 10, E-15080, A Coruña, España.

**Palabras chave:** Química analítica; bioaccesibilidade; cromatografía de líquidos.

Co fin de impulsar unha economía circular, os pneumáticos unha vez rematada a súa vida útil son triturados obtendo diferentes subprodutos que son aproveitables. O granulado de caucho que se obtén logo da moenda do pneumático consiste nun microplástico empregado principalmente como recheo en campos de fútbol sintéticos. Sen embargo, recentemente, a Unión Europea prohibiu o seu uso dando un período de 8 anos para substituír o granulado por alternativas máis sostibles e menos prexudiciais. Débese resaltar que o granulado de caucho consiste a maior fonte de microplásticos intencionais no medio ambiente [1].

A problemática non reside unicamente no tamaño da partícula, se non tamén na composición da mesma. Ao estar formada de igual maneira que o pneumático, o granulado contén gran cantidade de axentes químicos, como é o caso dos hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) atopados en granulado e en superficies de parques infantís [2,3] demostrándose recentemente a súa bioaccesibilidade [4]. O presente estudo céntrase na avaliación da bioaccesibilidade oral de outros axentes presentes no granulado, incluíndo axentes aceleradores da vulcanización, axentes entrecruzantes de cadeas e vulcanizantes así como compostos que actúan como antiozonantes. Actualmente, un foco de interese está na N-(1,3-dimethylbutyl)-N'-phenyl-1,4-benzenediamine ou 6PPD onde, un dos seus produtos de transformación, (N-(1,3-Dimethylbutyl)-N'-phenyl-p-phenylenediamine-quinone) ou 6PPDq estase a relacionar coa morte de especies acuáticas [5].

Para avaliar as cantidades bioaccesibles emprégase un método de simulación *in vitro* (*Unified Bioaccessibility Method*, UBM) [6]. Este método consiste na preparación de catro fluídos biolóxicos (saliva, mollo gástrico, mollo duodenal e bile) simulando a inxestión de material. Unha vez rematada a simulación, os compostos foron extraídos mediante extracción en fase sólida (SPE), logo da optimización e validación do procedemento. A cromatografía de líquidos acoplada á espectrometría de masas en tándem foi a técnica empregada para a correcta identificación e cuantificación dos compostos.

### Agradecementos

Esta investigación está financiada polos proxectos de Xeración de Coñecemento PID2022-140180B-I00 e RETOS PID2019-104336RB-I00. ED431 2020/06 e IN607B 2022/15 (Programa de Grupos de Investigación Consolidados, Xunta de Galicia). Este estudo baséase no traballo da Rede de Estudo de Preparación de Mostra, apoiado pola División de Química Analítica da Sociedade Europea de Química. Os autores pertencen á Rede Nacional para a sustentabilidade na preparación de mostra, RED2022-134079-T (Ministerio de Ciencia e Innovación, España). Todos estes programas están cofinanciados por FEDER (UE).

## Referencias

- [1] ECHA (European Chemical Agency). Microplásticos. <https://echa.europa.eu/hot-topics/microplastics>
- [2] M. Llompart, L. Sanchez-Prado, J. Pablo Lamas, C. García-Jares, E. Roca, T. Dagnac. *Chemosphere*, 2013, 90, 423-431.
- [3] D. Armada, M. Llompart, M. Celeiro, P. Garcia-Castro, N. Ratola, T. Dagnac, J. de Boer. *Science of The Total Environment*, 2022, 812, 152542.
- [4] D. Armada, A. Martinez-Fernandez, M. Celeiro, T. Dagnac, M. Llompart. *Science of The Total Environment*, 2023, 857, 159485.
- [5] Z. Tian, H. Zhao, K. T. Peter, et al., *Science*, 2021, 371 (6525), 185-189.
- [6] BARGE-INERIS (2010). UBM procedure for the measurement of inorganic contaminant bioaccessibility from solid matrices.

## Comunicación C4 - Retos da administración oral e novos enfoques de estabilización de proteínas terapéuticas: o sistema IC-Tagging como unha novidosa solución

**Daniel Abella López,<sup>1</sup> Adrián López Teljelro,<sup>1</sup> Natalla Barreiro Piñeiro,<sup>1</sup> Gemma María Elbes González,<sup>2</sup> José Manuel Martínez Costas<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> CiQUS- Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares, [daniel.abella@rai.usc.gal](mailto:daniel.abella@rai.usc.gal)

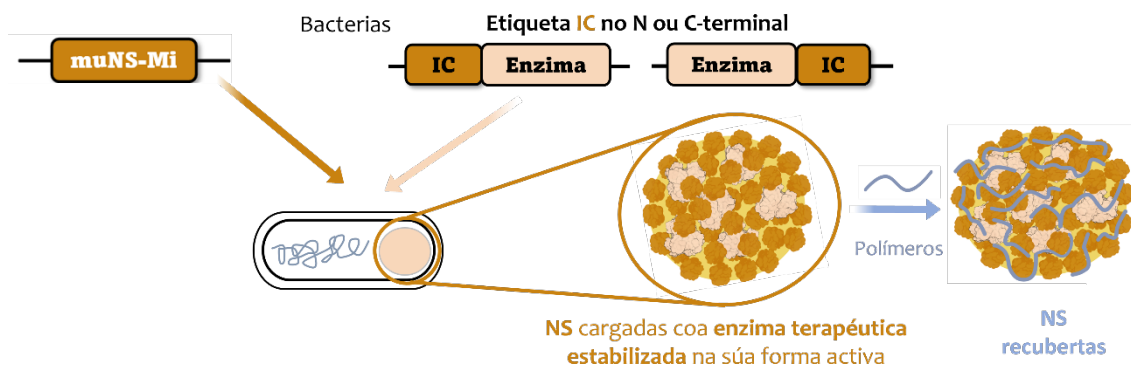
<sup>2</sup> CRETUS-Centro Interdisciplinar de Investigación en Tecnoloxías Ambientais

**Palabras chave:** Bioquímica/biotecnoloxía; Proteínas terapéuticas; Estabilización de enzimas

A administración oral de fármacos segue sendo actualmente a vía preferida de administración debido ao bo cumprimento por parte do paciente, a súa facilidade de administración e a diminución do dano tisular provocado. Sen embargo, debido a baixa solubilidade de certos fármacos e a súa escasa biodisponibilidade oral, moitas terapias biolóxicas rara vez se administran por dita vía. A administración oral supón un importe desafío, especialmente en canto a administración de vacinas e medicamentos de carácter proteico. A ruta oral implica o paso polo tracto gastrointestinal, o cal supón un entorno fisiolóxico complexo debido as condicións de pH acedo, pola presenza de sales biliares, de enzimas dixestivas (como as proteases) ou polos efectos da motilidade e hidrodinámica intestinal. Debido a ditos obstáculos, os fármacos de carácter peptídico ou proteico adoitan ser administrados por vía parenteral mediante inxección subcutánea ou intravenosa. Neste sentido, existe unha necesidade de buscar novos enfoques que melloren a administración oral de fármacos, especialmente no caso das proteínas terapéuticas [1].

Ante esta problemática, o noso traballo propón o uso do sistema IC-Tagging patentado polo noso laboratorio para desenvolver tratamentos orais baseados en proteínas terapéuticas, centrándonos especialmente no caso de enzimas. A metodoloxía IC-Tagging é unha plataforma biotecnolóxica de etiquetado molecular de proteínas. Este sistema permítenos a produción de micro ou nanoesferas (MS ou NS) cargadas con calquera proteína de interese usando calquera sistema de expresión [2]. E o que é máis interesante, as proteínas encapsuladas nas MS ou NS manteñen o seu correcto pregamento e función, ao tempo que aumenta a súa estabilidade e protección fronte a axentes externos como a temperatura, os compostos químicos, os valores de pH extremos ou a degradación proteolítica.

Os últimos resultados obtidos na nosa investigación, demostran a eficacia do sistema IC-Tagging para estabilizar proteínas terapéuticas de cara o seu uso como tratamento oral. En particular, demostramos a capacidade desta metodoloxía para producir NS bacterianas cargadas cunha enzima terapéutica usada para tratar a fenilcetonuria na súa forma activa e provida dunha enorme estabilidade fronte a temperatura, pH e dixestión por proteases pancreáticas. Ademais, fomos quen de recubrir ditas NS con polímeros co obxectivo de aumentar a súa biodisponibilidade e a súa vida media en circulación unha vez administradas ao paciente. Na Figura 1 móstrase un esquema de funcionamento da proposta.



**Figura 1.** Esquema xeral de funcionamento do sistema IC-Tagging para a produción de NS bacterianas cargadas con enzimas terapéuticas, e o seu posterior recubrimento con polímeros para a súa administración por vía oral.

### Referencias

- [1] J Mudie, D. M., Amidon, G. L., Amidon, G. E., *Molecular pharmaceuticals*, 2010, 7(5), 1388-140.
- [2] Brandariz-Nunez, A., Menaya-Vargas, R., Benavente, J., Martinez-Costas, J., *PLoS One*, 2010, 5(11), e137.

## Comunicación C5 - Explorando a batalla a nivel celular: como os péptidos antimicrobianos se involucran coas membranas celulares cambiados pola COVID-19 a través de simulacións de Dinámica Molecular

**A. Seco<sup>1</sup>, Á. Piñeiro<sup>2</sup> and R. García-Fandino<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Departamento de Química Orgánica, Center for Research in Biological Chemistry and Molecular Materials, Universidade de Santiago de Compostela, Campus Vida s/n, E-15782 Santiago de Compostela, España.*

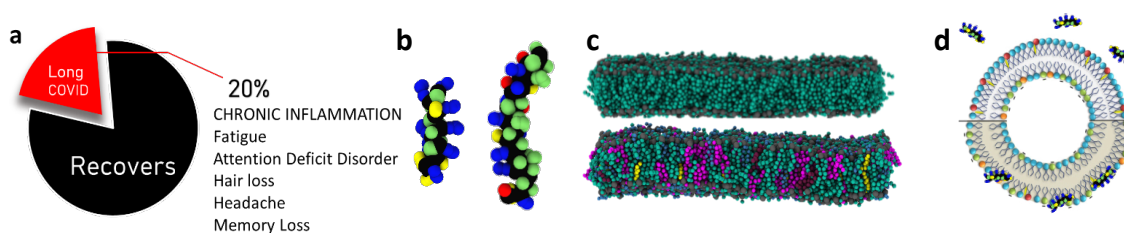
<sup>2</sup>*Departamento de Física Aplicada, Facultade de Física, Universidade de Santiago de Compostela, E-15782, Santiago de Compostela, España*

**Palabras chave:** Química Computacional, Química Orgánica, Química Supramolecular.

A pandemia de COVID foi unha das principais preocupacións sanitarias, e gran parte da atención centrouse nos efectos inmediatos da enfermidade. Con todo, para algúns, a batalla continúa con síntomas duradeiros coñecidos como afección posCOVID (PCC), que afecta a un 20% dos afectados que non se recuperan totalmente<sup>1,2</sup>. Entre os retos da PCC atópanse a falta de tratamentos eficaces e o impacto duradeiro en quen sobreviviu á enfermidade.

A pesar da énfase posta na secuenciación xenómica e a análise da cuberta proteica do virus para a creación de vacinas, o estudo dos perfís lipídicos dos pacientes de COVID-19 descoidouse en certa medida. Estes lípidos non só son cruciais durante a enfermidade inicial, senón que tamén desempeñan un papel na progresión da enfermidade e as súas secuelas a longo prazo<sup>3,4</sup>. Existen probas que suxiren que a interacción entre estes lípidos e as moléculas de defensa naturais do organismo<sup>5</sup>, denominadas péptidos antimicrobianos (AMP), podería ser importante para comprender a relación coa COVID-19.

Para profundar na forma en que estes AMP interactúan coas membranas celulares que a infección comprometeu, utilizamos simulacións de Dinámica Molecular (DM), probando varios AMP con membranas celulares tanto modificadas como inalteradas. Os resultados desta investigación poderían lanzar luz sobre a influencia dos AMP nos perfís lipídicos das persoas con COVID-19 e PCC, achandando potencialmente o camiño para tratamentos máis eficaces.



**Figura 1:** De esquerda a dereita: a) Un gráfico que presenta diversos síntomas experimentados por pacientes de COVID persistente; b) Parasin-I e LL-37, os dous péptidos utilizados neste estudo; c) Modelos de membrana en Coarse-Grained: modelo de membrana de mamíferos saudables composto por POPC (na parte superior) e modelo de membrana COVID persistente (na parte inferior); d) Representación de como os péptidos interaccionan cunha membrana sa (apenas) e cunha membrana infectada/alterada (cargada negativamente). Lípidos representados: POPC (Palmitoyl Oleoyl Phosphatidyl Choline, verde claro), POPI (Inositol, Azul curioso); POPE (Etanolamina, Magenta); POPS (Serina, Violeta); Colesterol (amarelo) e Cardiolipina-II (pompador). Gris para cabezas polares (PO4).

### Agradecementos

Este traballo foi financiado pola Axencia Estatal de Investigación de España e o ERDF (RTI 2018-098795-A-I00) e pola Xunta de Galicia e o ERDF (ED431F 2020/05, ED431C 2017/25, e a acreditación do Centro singular de investigación de Galicia 2016-2019 ED431G/09. Todas as simulacións leváronse a cabo no Centro de Supercomputación de Galicia.

### Referencias

- [1] A. Nalbandian; K. Sehgal; A. Gupta et al. *Nature Medicine* 2021, 601–615.
- [2] S. Lopez-Leon; T. Wegman-Ostrosky; C. Perelman et al. *Sci. Rep.* 2021, 11(1), 1-12.
- [3] K.H. Ebrahimi; J. S. O. McCullagh, *Biosci. Rep.* 2021, 41 (8).
- [4] Y. Bai; W. Huang; Y. Li et al. *Biosci. Rep.* 2021, 41 (3).
- [5] R. García-Fandino; Á. Piñeiro, *Front. Immunol.* 2021, 11, 3532

## Comunicación C6 - Micro-nanoplateformas pole-nanoestructuras lipídicas para a asociación de rifabutina.

**Ángela González-Balzán,<sup>1</sup> Carla Castro-Blanco,<sup>1</sup> Lorena Valverde-Fraga,<sup>2</sup> Noemi Csaba,<sup>2</sup> Carmen Remuñán-López,<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup> Grupo Nanobiofar, Departamento de Farmacología, Farmacia e Tecnoloxía Farmacéutica, Facultade de Farmacia, Universidade de Santiago de Compostela, Campus Vida, 15782-Santiago de Compostela (España), [angela.gonzalez.baizan@rai.usc.gal](mailto:angela.gonzalez.baizan@rai.usc.gal)

<sup>2</sup> Centro de Investigación en Medicina Molecular e Enfermedades Crónicas (CIMUS), Departamento de Farmacología, Farmacia e Tecnoloxía Farmacéutica, Facultade de Farmacia, Universidade de Santiago de Compostela, 15782- Santiago de Compostela (España).

<sup>3</sup> Instituto de Materiais (iMATUS), Universidade de Santiago de Compostela, Campus Vida, 15782-Santiago de Compostela (España).

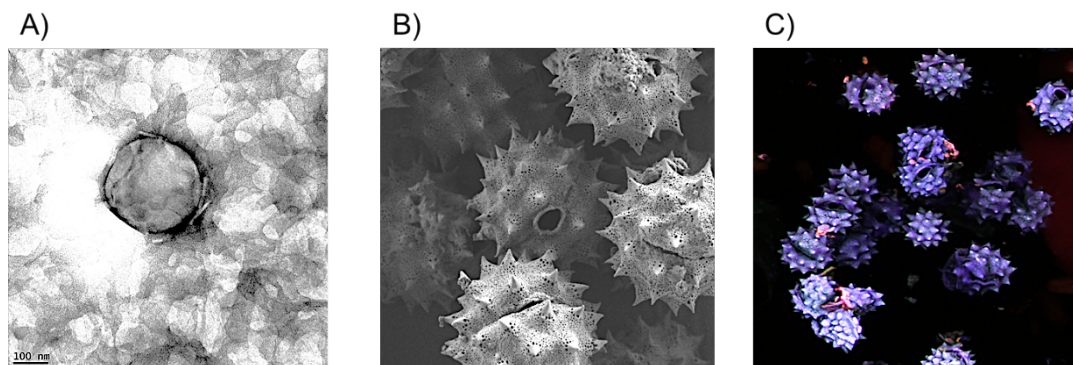
**Palabras chave:** liberación pulmonar de antibióticos anti-TB, pole, química da saúde

Na actualidade, a Tuberculose (TB) continúa supoñendo un problema de Saúde Pública. Causada pola bacteria *Mycobacterium tuberculosis*, afecta principalmente os pulmóns (TB pulmonar), aínda que, poden verse afectados outros órganos (TB extrapulmonar). En España, a Rede de Vixilancia Epidemiolóxica (RENAVE), recolleu no ano 2021, unha taxa de notificación (TN) de 5,36 por cada 100.000 habitantes para o caso da TB pulmonar, presentándose Galicia, como unha das comunidades máis afectadas (TN=8.48-19.33). O tratamento habitual, consiste en administrar oralmente altas doses dunha combinación de distintos antibióticos, durante polo menos 6 meses, o que xeralmente provoca a aparición de importantes efectos secundarios no paciente, e leva a un abandono prematuro do tratamento e facilitando a aparición de cepas resistentes.

Por este motivo se buscan novas alternativas terapéuticas anti-TB, destacando nos últimos anos como unha interesantísima estratexia, a administración directa de antibióticos ao pulmón. A diana terapéutica dos antibióticos son os macrófagos alveolares, xa que este é o lugar onde se acumulan os bacilos durante a infección. Co fin de maximizar a chegada dos antibióticos a os macrófagos, expónse a súa incorporación en nanosistemas e, para facilitar a súa administración pulmonar, en partículas de tamaño micrométrico [1]. Neste traballo, nós propoñemos o emprego de nanopartículas lipídicas sólidas (SLN) ás que asociamos a rifabutina (RFB) como antibiótico modelo. Para garantir que as SLN cargadas de antibiótico cheguen á zona desexada do pulmón e evitar a súa eliminación polos mecanismos de defensa pulmonar, antes de poder exercer a seu efecto, neste traballo propoñemos a súa asociación en microcápsulas de esporopolenina derivadas dos grans de pole de *Matricaria camomilla*, previamente inactivados [2]. Estas micropartículas de diámetros entre 15-25  $\mu\text{m}$  e con baixa densidade mostran un gran interese pola liberación pulmonar de substancias activas. Presentan menos agregación e maior aerosolización, o que resulta nunha fracción óptima de fármaco que chega á rexión pulmonar desexada. En conxunto, a súa alta capacidade de carga, baixa densidade e porosidade fan da plataforma de pole oco unha candidata ideal para a administración de fármacos ás vías respiratorias.

En primeiro lugar, obtivéronse SLN cargadas con RFB, preparadas a partir dun protocolo de homoxeneización de alto cizallamento previamente desenvolvido [1, 3], que foron caracterizadas fisicoquímica e morfoloxicamente, obtendo un tamaño de aprox.198 nm e unha morfoloxía esférica. Avaliouse a súa eficacia de encapsulación, demostrándose que eran capaces de asociar aprox. 90 % (p/p) de fármaco cunha carga de fármaco con relación a peso de lípido do 9 %. Realizouse a purificación de pole, co fin de obter as microcápsulas porosas sen restos de “contaminante” e/o alérxenos. Por último, investigouse a asociación de SLN ás microcápsulas de esporopolenina utilizando un procedemento de carga forzada que empregaba rotaevaporación ao

baleiro. Nun primeiro momento, utilizáronse SLN baleiras (sen fármaco) marcadas con Rodamina 6G utilizando distintas relacións SLN/pole. A asociación, avalíouse analizando os sólidos por microscopia confocal e os sobrenadantes por fluorescencia. A partir destes estudos, seleccionouse a proporción SLN/pole 1:1 (p/p) para o estudo preliminar de liberación (empregando o método de diálise nun medio pulmonar simulado a 37 °C) de RFB a partir das micro-nanoestrutura. Comprobouse que, as micro-nanoplateformas reducían a liberación do antibiótico ata un 74 % ao cabo de 72 horas, en comparación ao 95 % observado a partir das SLN.



**Figura 1:** A) Imaxe de Microscopia Electrónica de Transmisión (TEM) dunha nanopartícula lipídica sólida (SLN) cargada con rifabutina (RFB). B) Microfotografía de Microscopia Electrónica de Varrido (SEM) de grans de pole de *Matricaria chamomilla* unha vez purificados. C) Fotografía obtida por Microscopia Confocal da micro-nanoplateforma pole/SLN, estando marcadas as SLN con Rodamina 6G e nunha proporción pole/SLN 1:1 (p/p).

### Agradecementos

Esta investigación foi financiada polos proxectos FEDER/Ministerio de Ciencia e Innovación-Axencia Estatal de Investigación de España, no marco do Programa Estatal de Xeración de Coñecemento e Fortalecemento Científico e Tecnolóxico do Sistema de I+D+i e do Programa Estatal de I+D+i Orientada aos Retos da Sociedade (Proxecto PID2019-107500RB-I00); e Grupos de Referencia Competitiva-Xunta de Galicia (ED431C 2021/17-FEDER).

### Referencias

- [1] D.P. Gaspar, M.M. Gaspar, C.V. Eleutério, A. Grenha, M. Blanco, L.M.D. Gonçalves, et al. *Mol Pharm*, 2017, 14, 2977-90.
- [2] J.M. Ageitos, S. Robla, L. Valverde-Fraga, M. García-Fuentes, N. Csaba, *Polymers (Basel)*, 2021, 13, 2094.
- [3] D.P. Gaspar, V. Faria, L.M.D. Gonçalves, P. Taboada, C. Remuñán-López, A. Almeida, *International Journal of Pharmaceutics*, 2016, 497, 199-209.

## Comunicación C7 - Síntese de complexos derivados de ligandos *biscarbamato* e o estudo da súa hidrólise autoinmolante.

P. Domínguez-Carbón,<sup>1</sup> I. Velo-Helene,<sup>1</sup> S. Fernández-Fariña,<sup>1</sup> M. Martínez-Calvo,<sup>1</sup>

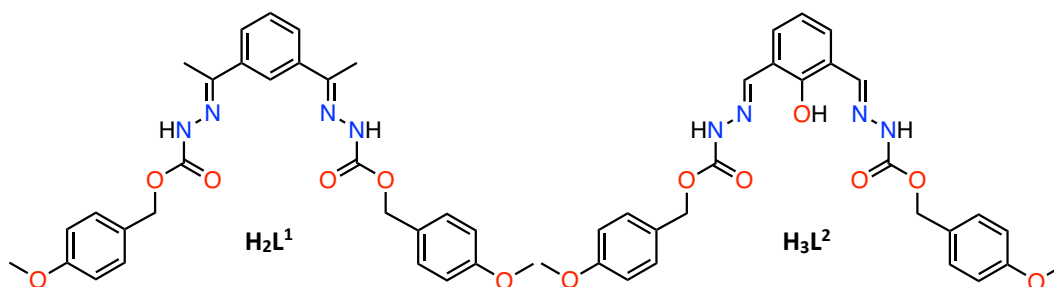
<sup>1</sup> *Suprabioin Lab, Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, España.*

**Palabras chave** Química Inorgánica, *biscarbamatos*, hidrólise.

As extensas aplicacións que presentan os carbamatos en áreas tan diferentes como a Química Medioambiental [1], a Química dos Materiais [2] e a Química Médica [3] débense, principalmente, a capacidade que teñen estes compostos de sufrir hidrólise autoinmolante. Destacan, sobre todo, na obtención de profármacos con maior selectividade, menor toxicidade e doses máis baixas ca os fármacos estándares.

No grupo de investigación realizáronse estudos empregando un ligando *biscarbamato* cun espazador de piridina ( $H_2L$ ), mediante unha metodoloxía electroquímica obténdose helicatos dinucleares neutros [4]. Por outra banda, a reacción con sales metálicas de cloruro deu lugar a que o mesmo ligando sufrira un proceso de hidrólise autoinmolante [5].

Co fin de ampliar a información sobre estes sistemas centrámonos na análise da influencia dos átomos doadores do ligando *biscarbamato* sobre a arquitectura final dos compostos así coma no proceso de hidrólise. Observouse que a partir do ligando  $H_2L^1$  non foi posible a formación dos seus complexos iónicos derivados. Porén, identificouse a formación dos complexos iónicos derivados do proceso de hidrólise para o caso do ligando  $H_3L^2$ . Isto expón a importancia da presenza dun átomo doador no espazador para que se produza a coordinación dos ións metálicos e o posterior proceso de hidrólise.



**Figura 1:** Ligandos *biscarbamato*  $H_2L^1$  e  $H_3L^2$ .

### Agradecementos

Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria, Xunta de Galicia, 2023GRCGI-1584 (ED431C 2023/02). Ministerio de Ciencia e Innovación, Proxecto PID2021-127531NB-I00 (AEI/10.13039/501100011033/ FEDER, UE) y METALBIO (RED2022-134091-T).

## Referencias

- [1] X. Liu, T. Werner, *Chem. Sci.*, 2021, 12, 10590.
- [2] F. E. Tabaght, K. Azzaoui, A. El. Idrissi, S. Jodeh, B. Khalaf, L. Rhazi, R. Bellaouchi, A. Asehrou, B. Hammouti, R. Sabbahi, *Sci Rep*, 2023, 13, 1.
- [3] B. T. Graff, C. Palanivel, C. B. Jenkins, J. Baranowska-Kortylewicz, Y. Yan, *Cell Death Discov*, 2023, 9, 1.
- [4] R. Pedrido, M. Vázquez López, L. Sorace, A. M. González-Noya, M. Cwiklinska, V. Suárez-Gómez, G. Zaragoza, M. R. Bermejo, *Chemical Communications*, 2010, 46, 4797.
- [5] S. Fernández-Fariña, M. Martínez-Calvo, M. J. Romero, J. M. Seco, G. Zaragoza, R. Pedrido, A. M. González-Noya, *Dalton Transactions*, 2022, 51, 12915.

## Comunicación C8 - Estudo coordinativo dun ligando bifuncional derivado de o-carborano

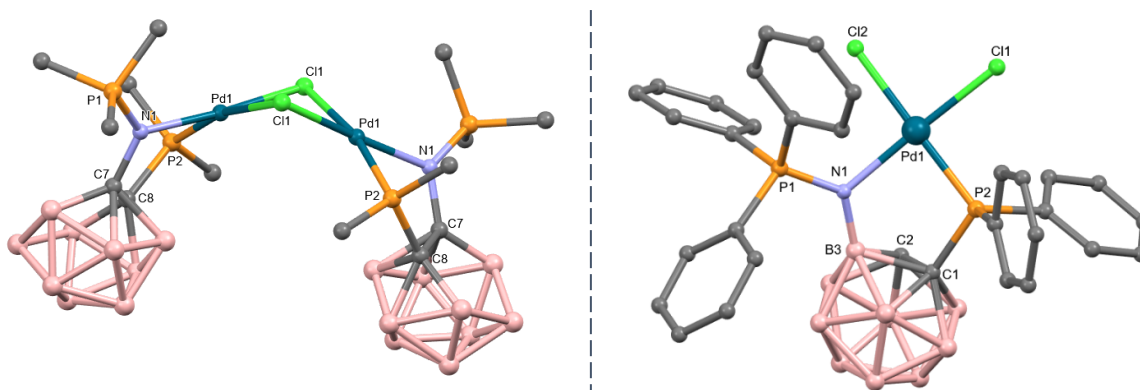
I. Vázquez-Carballo,<sup>1</sup> A. Sousa-Pedrares<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Suprabioin Lab, Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela, Campus Vida, 15782, Santiago de Compostela, España*

**Palabras chave:** Química inorgánica; o-carborano; ligandos bidentados.

Os sistemas coñecidos como carboranos son clústeres moleculares formados por átomos de boro e carbono en diferentes estequiometrías [1] con propiedades electrónicas determinantes para o estudo da súa reactividade, xa que cada posición do clúster presenta un efecto indutivo diferenciado. Desta maneira, os átomos de carbono presentan un carácter electrón-atraínte sobre os grupos aos que están unidos, efecto que perde intensidade nos átomos de boro B3 e B6, conectados directamente a ambos átomos de carbono [2]. Así, considerando esta distribución irregular de carga, durante os últimos anos investigouse o comportamento coma ligandos de derivados de o-closocarborano con grupos dadores como fosfina e iminofosforano [3-5], creando potenciais ligandos heterobidentados (P,N). O seu obxectivo é a determinación do carácter hemilábil destes ligandos a través do seu estudo coordinativo con cloruro de paladio(II).

Con esta finalidade, tomando coma exemplo o complexo descrito  $[\text{PdCl}((\text{C1,C2})\text{-iminofosforano-fosfina-o-carborano})]_2$  [4] con ambos os grupos dadores unidos a ambos átomos de carbono do clúster, e xa que presentou un comportamento coordinativo moi débil que imposibilita a hemilabilidade, procedeuse coa obtención e estudo do seu isómero estrutural co grupo iminofosforano unido ao boro B3, o  $[\text{PdCl}((\text{B3,Cc})\text{-iminofosforano-fosfina-o-carborano})]$ . Así, a obtención deste complexo permitiu acadar o modo de coordinación quelato (P,N) mantendo a integridade do clúster carborano (Figura 1).



**Figura 1:** Estruturas de raios X do  $[\text{PdCl}((\text{C1,C2})\text{-iminofosforano-fosfina-o-carborano})]_2$  (esquerda) e do  $[\text{PdCl}((\text{B3,Cc})\text{-iminofosforano-fosfina-o-carborano})]$  (dereita).

**Agradecementos:** Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria, Xunta de Galicia, 2023GRCGI-1584 (ED431C 2023/02) e Ministerio de Ciencia e Innovación, Proxecto PID2021-127531NB-I00 (AEI/10.13039/501100011033/ FEDER, UE) e METALBIO (RED2022-134091-T).

## Referencias

- [1] Carboranes. R. N. Grimes, Academic Press, New York, 2011.
- [2] A. M. Spokoyny, C. W. Machan, D. J. Clingerman, M. S. Rosen, M. J. Wiester, R. D. Kennedy, C. L. Stern, A. A. Sarjeant, C. A. Mirkin, *Nat. Chem.*, 2011, 3, 590.
- [3] P. Crujeiras, J. L. Rodríguez-Rey, A. Sousa-Pedrares, *Dalton Trans.*, 2017, 46, 2572.
- [4] P. Crujeiras, J. L. Rodríguez-Rey, A. Sousa-Pedrares. *Eur. J. Inorg. Chem.*, 2017, 4653.
- [5] J. L. Rodríguez-Rey, D. Esteban-Gómez, C. Platas-Iglesias, A. Sousa-Pedrares, *Dalton Trans.*, 2019, 48, 486.

## Comunicación C9 - A helicidade na natureza e na química do ferro

**I. Velo-Helena,<sup>1</sup> U. Barreiro-Sisto,<sup>1</sup> P. Domínguez-Carbón,<sup>1</sup> S. Fernández-Fariña, A. M. González-Noya<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Campus Vida, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 ,Santiago de Compostela, España*

**Palabras chave** Química Inorgánica; helicidade, ferro

As figuras helicoidais atópanse en lugares diversos no mundo no que vivimos, como por exemplo: na natureza, nas galaxias, na arquitectura ou no arte. Porén, a maior fascinación por este tipo de deseños provén da disposición da dobre hélice do ADN, na que está codificada a vida en si mesma.

Inspirándose nestes modelos, un dos principais obxectivos da Química Metalosupramolecular é o deseño de compostos helicoidais derivados de ións metálicos, coñecidos como helicatos. Nos últimos anos, estes compostos suscitaron gran interese debido ás súas interesantes propiedades en diferentes campos como son a Bioloxía [1], a Farmacoloxía [2] ou a Química de Materiais [3].

Neste contexto, publicáronse varios helicatos de ferro (II) capaces de interaccionar co ADN e que presentan propiedades anticancerosas e antimicrobianas [4].

Tendo en conta estes precedentes, neste traballo presentamos unha familia de compostos helicoidais de ferro(III) dinucleares (Figura 1) obtidos mediante unha metodoloxía de síntese electroquímica [5]. Estes compostos foron estudados en estado sólido e en disolución.

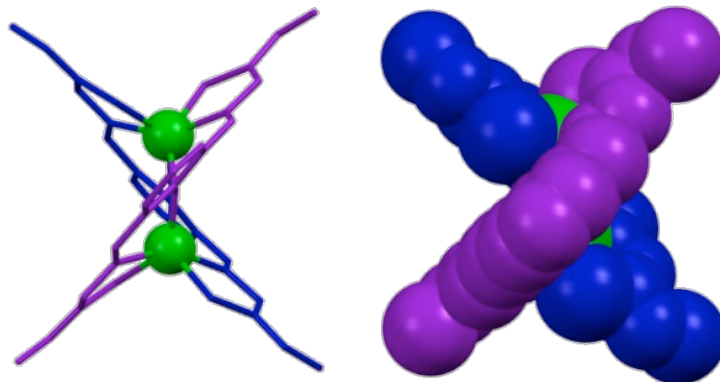


Figura.1. Estruturas helicoidais dos complexos de Fe(III) presentados neste traballo.

**Agradecementos:** Este traballo está financiado pola Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria, Xunta de Galicia, 2023GRCGI-1584 (ED431C 2023/02). Ministerio de Ciencia e Innovación, Proxecto PID2021-127531NB-I00 (AEI/10.13039/501100011033/ FEDER, UE) e METALBIO (RED2022-134091-T).

## Referencias

- [1] M. J. Hannon, L. J. Childs, *Supramolecular Chemistry*, 2004, 16, 7-22.
- [2] S. E. Howson, A. Bolhuis, V. Brabec, G.J. Clarkson, J. Malina, A. Rodger, P. Scott, *Nature Chem.*, 2011, 4, 31-6.
- [3] Y. R. Qiu, L. Cui, P. Y. Cai, F. Yu, M. Kurmoo, C. F. Leong, D. M. D'Alessandro, J. L Zuo, *Chem. Sci.*, 2020, 11, 6229-6235.
- [4] a) J. Malina, M. J. Hannon, V. Brabec, *Chem. Eur. J.*, **2015**, 21, 11189-11195. b) J. Malina, M. J. Hannon, V. Brabec, *Sci. Rep.*, 2016, 6, 29674.
- [5] S. Fernández-Fariña, I. Velo-Helena, M. Martínez-Calvo, M. Maneiro, R. Pedrido, A. M. González-Noya, *Int. J. Mol. Sci.*, 2023, 24, 8654.

## Comunicación C10 - Inclusión do fin de vida na avaliación ambiental dos biopolímeros plásticos

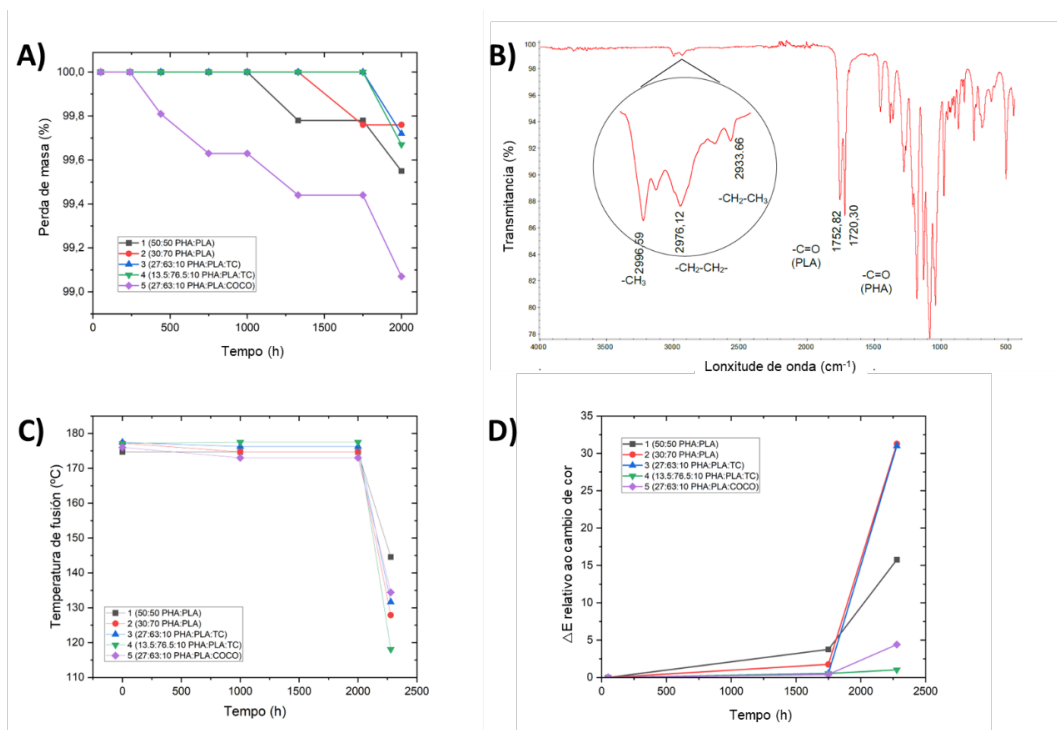
Brais Vázquez-Vázquez<sup>1</sup>, Massimo Lazzari<sup>2</sup> e Almudena Hospido<sup>1</sup>

<sup>1</sup> CRETUS. BioGroup. Departamento de Enxeñaría Química, Universidade de Santiago de Compostela.

<sup>2</sup> CIQUS. Lazzari. Departamento de Química Física, Universidade de Santiago de Compostela.

**Palabras chave:** química de polímeros; química de materiais; análises de ciclo de vida

Este traballo de investigación enmárcase no proxecto nacional ECOPOLYVER (<https://biogroup.usc.es/ecopolyver>), que ten como obxectivo revalorizar correntes residuais lipídicas mediante a produción de polihidroxialcanoatos (PHA) capaces de transformarse en biopolímeros plásticos (BP) [1]. Estes teñen a capacidade de substituír a plásticos petroquímicos como o polipropileno (PP) e o polietileno de baixa densidade (LDPE), empregados polas empresas xeradoras de ditos residuos. A inclusión da etapa de fin de vida (EoL, polas siglas en inglés End-of-life), será necesaria para obter a imaxe completa que valide o mellor comportamento medioambiental. Porén as metodoloxías actuais de Análise de Ciclo de Vida (ACV) precisan dun desenvolvemento para poder incluír o impacto mariño, compartimento final dos residuos plásticos [2]. Nacen así proxectos como MarILCA (<https://marilca.org/>), onde precisan datos experimentais sobre a degradación de plásticos que, no caso dos BP, non están dispoñibles polo de agora. O principal obxectivo deste traballo é polo tanto, xerar datos experimentais para facer posible a aplicación dos modelos de ACV aos BP baseados en PHA.

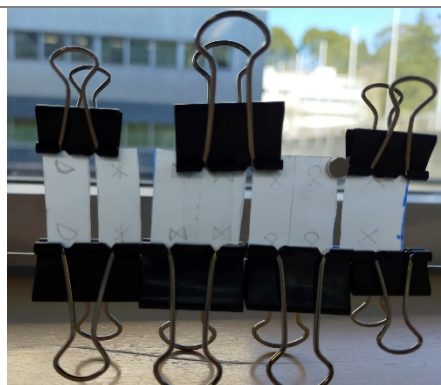


**Figura 1.** Seguimento das principais propiedades das mostras co paso da fotooxidación. A) Cambios de masa; B) Principais grupos funcionais das mostras visibles baixo espectroscopia infravermella; C) Variación das temperaturas de fusión das mostras; D) Cambios de cor das mostras.

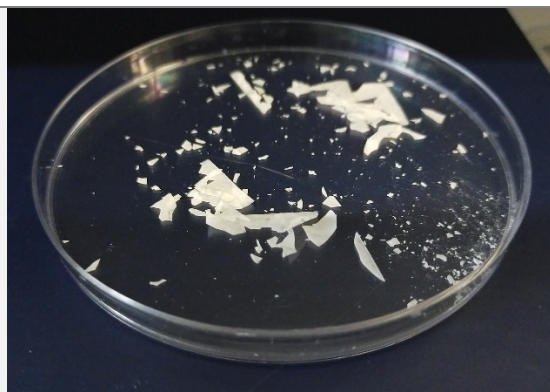
Realizáronse estudos de fotooxidación acelerada en cinco tipos diferentes de BP. Todos eles inclúen, en diferentes proporcións, PHA e ácido poliláctico (PLA) como polímeros principais; e tres deles aceite de coco (COCO) ou trietilcitrato (TC) a modo de aditivos. Durante a experimentación realizáronse medidas periódicas de masa, espectroscopia infravermella, calorimetría diferencial de barrido, análises termo gravimétricos e medidas de cor.

Pódense seguir así os cambios de masa; grupos funcionais; temperaturas de transición vítrea e fusión; estabilidade térmica e cor (Figura 1), respectivamente, das mostras de BP co paso do tempo na cámara de fotoenvellecemento baixo radiación ultravioleta.

*Mostras BP virxes*



*Mostras BP fotooxidados*



*Figura 2: Comparativa das mostras de biopolímeros plásticos antes e despois da súa fotooxidación.*

Os resultados obtidos denotan que nunha localización como Santiago de Compostela as mostras de BP precisarían pouco máis de 1 ano para fotooxidarse (Figura 2). O tempo de fotooxidación é menor que o que necesitan en iniciala, por fragmentación, os materiais a substituír (PP, 1 ano e 8 meses, e PE, 2 anos e 2 meses [3]), pero superior a 6 meses (tempo máximo que marca a norma UNE-EN 13432:2001 para considerar a envases e embalaxes biodegradables). Confírmase así que as mostras de BP non son fotooxidables pero que pode haber outra ruta de degradación (compostaxe, hidrólise, etc.) que as faga biodegradables.

### Agradecementos

Esta investigación foi financiada polo proxecto ECOPOLYVER (ref. PID2020-112550RB-C21). As mostras de BP foron facilitadas por ANFACO-CECOPESCA, coordinador do proxecto BIOCEN+ (ref. 2021-PN070), proxecto afín a ECOPOLYVER e desenvolvido tamén, en parte, polo Biogroup. O traballo experimental de laboratorio desenvolveuse no Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CIQUS), agradecerlle ao persoal técnico e investigador a axuda prestada no transcurso da investigación.

### Referencias

- [1] A. Roibás-Rozas, A. Mosquera-Corral, and A. Hospido, *Environmental assessment of complex wastewater valorisation by polyhydroxyalkanoates production*, *Science of the Total Environment*, 2020, 744, 140893.
- [2] Y. Wu and D. Su, *Sustainable Product Development: Tools, Methods and Examples*. Springer International Publishing, 2020.
- [3] Y. K. Song, S. H. Hong, S. Eo, and W. J. Shim, *The fragmentation of nano- and microplastic particles from thermoplastics accelerated by simulated-sunlight-mediated photooxidation*, *Environmental Pollution*, 2022, 311, 119847

## Comunicación C11 – O desempeño dos clústeres de Ag como catalizadores e inhibidores nas reaccións con HDDA

**X. Lu,<sup>1</sup> C. Vázquez Vázquez,<sup>1</sup> M. A. López Quintela<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Laboratorio de Magnetismo e Nanotecnoloxía (NANOMAG), Instituto de Materiais da USC (iMATUS), Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela*

**Palabras chave:** catálise; química de materiais; nanomateriais

A busca de novos catalizadores sempre foi unha área central na investigación química. A estrutura xeométrica e electrónica dos nanoclústeres é diferente á do metal correspondente, orixina a aparición de novas e diferentes propiedades químicas do material metálico a granel e das nanopartículas. Os clústeres poden actuar como un sitio activo individual na catálise, o que os fai de especial interese.[1,2]

Neste traballo, estudamos o efecto catalítico dos clústeres de prata ( $\text{Ag}_5\text{-Ag}_{15}$ ) dispersos no diacrilato de hexanodiol (HDDA) en polimerización. Os resultados mostran que os clústeres de Ag poden catalizar a reacción entre HDDA con moléculas que teñen grupo éter ou éster con grupo epoxi. A reacción ocorre a través dun mecanismo novo coa retención do grupo epoxi, que é diferente da situación xeral. Os clústeres de Ag activan selectivamente os osíxenos dos grupos éter e éster, que reaccionan cos dobres enlaces do HDDA. Esta reacción química é de especial importancia para o curado de resinas epoxi. A resina epoxi refírese a un termo xeral para unha clase de polímeros que conteñen máis de dous grupos epoxi na molécula. É un dos materiais máis utilizados, mentres que as súas propiedades útiles deberían conseguirse despois de ser reticuladas (curados) co axente de curar (endurecedor). Os aneis epoxi sempre abren a través dos axentes de curar para formar a estrutura de rede. Non obstante, a adición de clústeres de Ag permite que a resina epoxi forme un novo tipo de sistema de curado con HDDA que pode reter grupos epoxi. A reacción ocorre a través dun mecanismo completamente novo catalizado por clústeres de Ag. O sistema aquí non require adición de endurecedores tradicionais.

Ademais, moitos fabricantes de resina inclúen o compoñente alcohol nas súas formulacións de resina. Durante a reacción tamén se producen subprodutos que conteñen grupos hidroxilo. Isto resulta en resinas epoxi no mercado que conteñen certa cantidade de grupos hidroxilo que poden reaccionar cos dobres enlaces carbono-carbono dos acrilatos. Para descartar a interferencia polo grupo hidroxilo na polimerización, estudamos o efecto dos clústeres de Ag na reacción entre o alcohol e o HDDA. A análise térmica e a análise espectroscópica mostran que os clústeres de Ag non só poden catalizar a polimerización, tamén teñen un efecto inhibidor significativo sobre a reacción entre alcohol e acrilato.

En xeral, os resultados mostraron un forte efecto dos clústeres Ag sobre a polimerización. Este novo mecanismo de polimerización amosa amplas perspectivas de aplicación. Segundo a observación, propónse un novo mecanismo para a produción de polímeros termoestables. Os resultados asentan as bases para máis investigacións de aplicacións da nova resina curada. Propiedades mecánicas e físicas específicas do produto probaranse en estudos posteriores. Dado que usamos clústeres de prata como catalizador na reacción, tamén pasa a formar parte da composición do produto final. Podería darlle ao polímero obtido algunhas propiedades especiais, como antibacteriano [3] e na degradación fotocatalítica de materiais [4] **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia..** Estes obxectivos confirmaranse en estudos posteriores.

### Agradecementos

O traballo realizouse en colaboración coa empresa GAIRESA (<https://gairesa.com>), líder internacional na formulación de resinas epoxi. Grazas polo seu apoio técnico.

Grazas á doutora Iria Rodríguez Arias e aos outros investigadores de Nanogap (<https://nanogap.es/products/antimicrobial-materials/>), polos catalizadores e pola axuda que nos ofrecen.

### Referencias

- [1] Lichen Liu , Avelino Corma, *Trends Chem.*, 2020, 2(4), 383-400
- [2] Lei, Y. , Mehmood, F. , Lee, S. ; Greeley, J., Lee, B.; Seifert, S., Winans, R. E.; Elam, J. W., Meyer, R. J., Redfern, P. C., *Science*, 2010, 328, 224-228
- [3] Neissa, J.; Pérez-Arnaiz, C.; Porto, V.; Busto, N.; Borrajo, E.; Leal, J. M.; López- Quintela, M. A.; García, B.; Domínguez F. , *Chem. Sci.*, 2015, 6, 6717-6724
- [4] Vilar-Vidal, N.; Rivas Rey, J., López Quintela, M. A., *Small*, 2014, 10, 3632-3636

## Comunicación C12 - Hidrólise do substrato e enriquecemento de cultivos microbianos mixtos no mesmo reactor para obter PHA e TAG empregando ácido oleico

**J.R. Lorenzo-Llarena,<sup>1</sup> A. Val del Río,<sup>1</sup> A. Mosquera-Corral<sup>1</sup> A. Pedrouso,<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Departamento de Enxeñaría Química, Escola Técnica Superior de Enxeñaría, CRETUS, Universidade de Santiago de Compostela, [joseramon.lorenzo.llarena@usc.es](mailto:joseramon.lorenzo.llarena@usc.es)

**Palabras chave** Cultivo microbiano mixto; química de polímeros; ácido oleico.

Este traballo realizouse como parte do proxecto ECOPOLYVER, dedicado ao desenvolvemento de procesos para produción de biopolímeros por medio da valorización de residuos graxos. A xestión destes residuos supón un problema nas estacións depuradoras de augas residuais (EDAR) xa que poden provocar atascos nas conducións [1] ou dificultar o funcionamento dos sistemas biolóxicos secundarios. A fracción lipídica dos refugallo en concentracións moderadas pode oxidarse en tratamentos biolóxicos ou sepárase para a súa recuperación enerxética por medio de dixestión anaerobia [2]. Non obstante, debido á natureza do material, a carga orgánica aplicada por exemplo aos dixestores anaerobios debe ser limitada [3]. Polas dificultades de degradar estes residuos de xeito biolóxico unha das opcións máis aplicadas para a xestión destes residuos é a súa queima para producir enerxía.

Os lípidos son un dos compoñentes máis importantes dos efluentes producidos por diversos tipos de industrias como a alimentaria, farmacéutica e cosmética [4]. Sectores como a industria alimentaria son coñecidos por xerar unha enorme cantidade destes residuos, onde destaca a industria conserveira, capaz de producir efluentes con concentracións de ata 5 g de residuos graxos por litro [5].

As novas estratexias de economía circular da Unión Europea obrigan a repensar a xestión destes residuos para diminuír a súa valorización enerxética e incrementar a súa valorización en forma de materias escalando así na pirámide de xerarquía da xestión de residuos que se prevé acadar no 2030. Unha das alternativas máis recentes é o seu uso como substrato para a biosíntese de compostos intracelulares de valor engadido como poden ser os poli-hidroxialcanoatos (PHA) ou os triacilglicéridos (TAG).

En concreto, os PHA pódense utilizar para a produción de bioplásticos con mellores propiedades de biodegradabilidade e biocompatibilidade que os plásticos obtidos a partir do petróleo [6]. Mentres que os TAG pódense empregar para a produción de biocombustibles cuxa combustión sexa máis limpa que os que son produto de derivados do petróleo [7]. Ambas as opcións de recuperación poden axudar ao sector económico a independizarse do petróleo, xerando ademais un menor impacto ambiental.

Durante a realización do presente traballo utilizouse o ácido oleico como substrato lipídico. Operouse un reactor a escala laboratorio de 4 L de volume útil para comprender como as condicións de funcionamento poden afectar ao desenvolvemento dun cultivo microbiano mixto (CMM) capaz de levar a cabo a hidrólise dos lípidos, e a acumulación deste en forma de compostos intracelulares dentro dunha mesma unidade. Operouse o sistema a dúas temperaturas: 30 °C e 35 °C.

O reactor operou durante 118 días de forma discontinua, en ciclos de operación como reactor SBR (do inglés: *Sequencing Batch Reactor*), impoñendo diferentes condicións de temperatura, pH e subministración de nitróxeno. ‘

A operación dividiuse en 3 etapas diferentes, nas que se estableceron as diferentes condicións que se amosan na táboa 1.

Avaliouse a capacidade do CMM enriquecido para acumular compostos intracelulares así como a composición destes por medio do seguimento de ciclos de operación individuais de cada etapa de operación.

**Táboa 1.** Condicións do reactor nas diferentes etapas de operación

| Período              |                                     | E-1    | E-2      | E-3       |
|----------------------|-------------------------------------|--------|----------|-----------|
| Días de operación    |                                     | 0 - 18 | 19 - 100 | 101 - 118 |
| pH obxectivo         |                                     | 7,00   | 6,60     | 6,60      |
| Temperatura          | °C                                  | 30 ± 2 | 30 ± 1   | 35 ± 2    |
| DQO alimentada       | g DQO                               | 5,13   | 5,13     | 5,13      |
| Nitróxeno no reactor | g N-NH <sub>4</sub> <sup>+</sup> /L | 13     | 26       | 26        |

Neste sistema acadáronse porcentaxes de acumulación superiores ao 20 % en PHA e ao 40 % no caso de TAG. Porén, o ácido oleico non foi completamente hidrolizado pois una fracción permaneceu no sistema ao final de cada ciclo. O aumento da temperatura de 30 a 35 °C permitiu solubilizar mellor o ácido oleico e aumentar a súa dispoñibilidade para os microorganismos, non obstante o cultivo microbiano mixto presenta niveis máis baixos de consumo de nitróxeno que afectaron á produción de biomasa activa.

A acumulación de PHA foi preferente na operación do sistema a 30 °C. Mentres que a 35 °C acumuláronse máis TAG posiblemente debido a que houbo maior cantidade de ácido oleico dispoñible pola súa maior solubilización. Nas dúas condicións o pH de operación óptimo foi de 6,5 xa que garantía unha mellor hidrólise do ácido oleico. En canto á concentración de nitróxeno fixouse para garantir a súa dispoñibilidade para o crecemento dos microorganismos enriquecidos no CMM. Os resultados obtidos serán empregados para establecer as condicións iniciais de operación dun reactor para o tratamento de residuos graxos industriais.

### Agradecementos

Esta investigación contou co apoio do Axencia Estatal de Investigación (AEI) a través dos proxectos ECOPOLYVER (PID2020-112550RB-C21) e POLYGO1 (TED2021-130164B-I00) así como a través das Axudas de Formación de Profesorado Universitario (FPU-021/05797) concedida a J.R. Lorenzo-Llarena. A. Pedrouso tamén agradece á Xunta de Galicia (España) a súa bolsa posdoutoral (ED481B-2021-041). Os autores pertencen a un Grupo Galego de Investigación Competitiva (GRC ED431C 2021/37), programa cofinanciado polo FEDER (UE).

### Referencias

- [1] C. Pastore, M. Pagano, A. Lopez, G. Mininni, G. Mascolo, *Water & Science Technology*, 2015, 72, 1151-1157.
- [2] L. Argiz, R. González-Cabaleiro, A. Val del Río, J. González-López, A. Mosquera-Corral, *Science of the Total Environment*, 2021, 763, 142944.
- [3] D.G. Cirne, X. Paloumet, L. Bjornsson, M.M. Alves, B. Mattiasson, *Renewable Energy*, 2007, 32, 965-975.
- [4] K.B. Chipasa, K. Medrzycka, *Journal of Industrial Microbiology and Biotechnology*, 2006, 33, 635-645.
- [5] L. Argiz, D. Correa-Galeote, A. Val del Río, A. Mosquera-Corral, R. González-Cabaleiro, *Science of the Total Environment*, 2022, 807, 150761.
- [6] S. Priyadarshi, A. Shukla, B.B. Borse, *Polyhydroxyalkanoates: Role of Ralstonia eutropha*, *International Journal of Biomedical And Advance Research*, 2014, 5, 68-76.
- [7] N. Arora, A. Patel, J. Mehtani, P.A. Pruthi, V. Pruthi, K.M. Poluri, *Environmental Science and Pollution*, 2019, 26, 16952-16973.

## Comunicación C13 – Conmutación térmica resistiva

**Víctor Álvarez<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> CIQUS Centro de Investigación Química e Materiais Moleculares

**Palabras chave:** Propiedades térmicas; conmutación resistiva; química de materiais

Un dos maiores problemas nos dispositivos electrónicos é a xeración de calor e a súa disipación. A frecuencia de traballo de dispositivos como os transistores vense estancando nos últimos anos debido a este problema. Como solución poderíanse implementar interruptores térmicos, que permiten reciclar esa enerxía que se perde en forma de calor. Un dos mecanismos que se podería implementar como interruptor térmico é o Resistive Switching. No presente traballo sintetizáronse películas delgadas de titanato de stroncio (SrTiO<sub>3</sub>, STO) de espesores nanométricos en substratos de SrTiO<sub>3</sub> dopado con Nb (Nb:STO) como modelo de dispositivo de Resistive Switching<sup>1</sup>.

### Referencias

[1] Lee, J. S., Lee, S., & Noh, T. W. Resistive switching phenomena: A review of statistical physics approaches. *Applied Physics Reviews*, 2015, 2(3), 031303.

## Comunicación C14 - Reaccións abióticas promovidas pola maquinaria celular

**D. Montoto Pintos,<sup>1,2</sup> J.F. Salgado Barca,<sup>1,2</sup> X. Fernández González,<sup>1,2</sup> A. Casas Pais,<sup>1</sup> B. Orosa Puente,<sup>1</sup> M. Tomás Gamasa,<sup>1,2</sup> J.L. Mascareñas Cid<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Universidade de Santiago de Compostela, r/ Jenaro de la Fuente s/n, 15782, david.montoto@rai.usc.gal

<sup>2</sup> Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela

**Palabras chave:** Bioquímica; química orgánica; química intracelular

O desenvolvemento de reaccións biocompatibles non enzimáticas que interactúen co metabolismo é un campo emerxente na fronteira da síntese química e a bioloxía sintética. Estas reaccións ofrecen novas posibilidades para manipular sistemas biolóxicos e acceder a novas rutas sintéticas, e poderían ter aplicacións en biomedicina e biotecnoloxía [1,2]. Neste traballo estúdase unha nova reacción promovida intracelularmente por células eucariotas baseada na arilación de Meerwein dunha naftoquinona, que representa a primeira reacción sintética non enzimática descrita de formación dun enlace carbono-carbono promovida pola maquinaria celular (Figura 1).

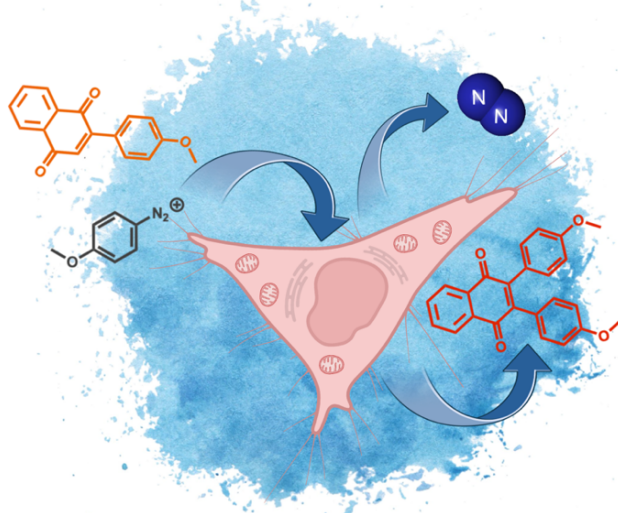
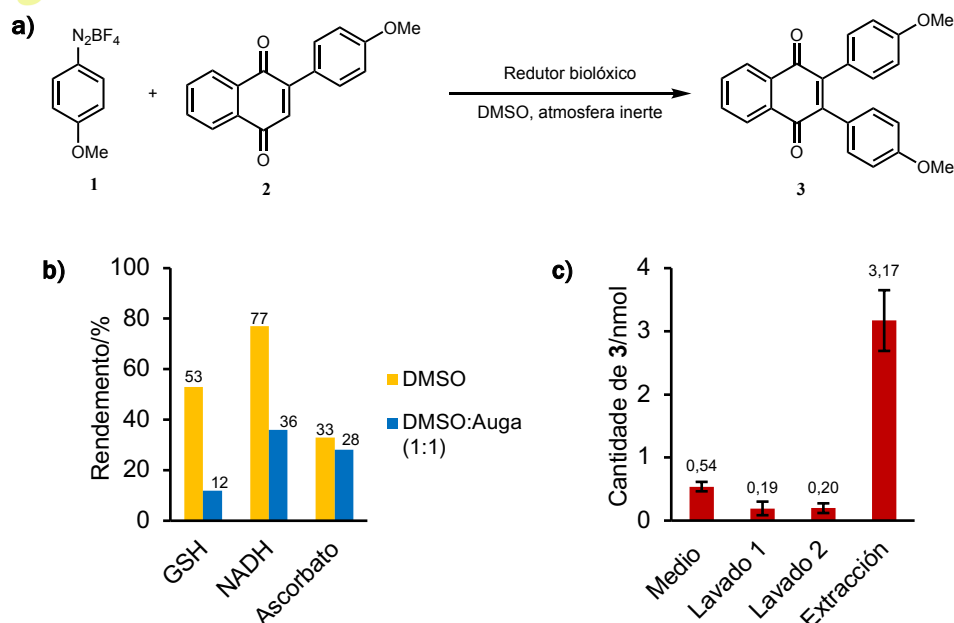


Figura 1. Arilación de Meerwein promovida pola maquinaria celular.

Unha das aplicacións máis potentes da química biocompatible é a transferencia de electróns mediada por células vivas [2], que manteñen un potencial redox redutor debido á interacción de numerosas enzimas, especies oxidantes e biomoléculas redutoras [3]. Está demostrado que certas biomoléculas redutoras de baixo peso molecular poden reducir os sales de arildiazonio a radicais arilo en condicións abióticas [4]. Neste traballo estudouse a promoción dunha arilación de Meerwein en condicións *in vitro* en presenza de varias biomoléculas redutoras (glutación, NADH e ascorbato), e observouse que promoven a reacción (Figura 2a-b). Logo avalíouse a reacción *in vivo* en células HeLa (células humanas de cancro de cervix uterino). A meirande parte do produto recuperouse da extracción celular, o que suxire que a reacción tivo lugar no interior da célula (Figura 2c).

Estas reaccións presentan un gran potencial, xa que poderían empregarse para a síntese *in situ* localizada de sondas fluorescentes e axentes quimioterápicos en células cun elevado potencial redox, como certas células tumorais [5].



**Figura 2.** (a) Arilación de Meerwein estudada. (b) Avaliación in vitro de redutores biolóxicos. Condicións: sal de diazonio **1** (1 equiv, 10 mM), naftoquinona **2** (3 equiv.), redutor biolóxico (1 equiv), 2 h, atmosfera inerte. Rendemento determinado por  $^1\text{H}$ -RMN con  $\text{CH}_2\text{Br}_2$  como patrón interno. (c) Reacción en células HeLa. Condicións: células incubadas durante 1 h con 100  $\mu\text{M}$  de sal de diazonio **1** e naftoquinona **2** en medio Eagle modificado de Dulbecco (DMEM) con DMSO 0,5% (v/v); lavados con tampón salino fosfato (PBS) e extraccións con Triton X-100. Cuantificación por HPLC-MS.

### Agradecementos

Este traballo recibiu apoio financeiro do goberno de España (rede ORFEO-CINQA, CTQ2016-81797-REDC), a Consellería de Cultura, Educación, Formación Profesional e Universidades da Xunta de Galicia (2015-CP082, ED431C-2017/19 e acreditación como Centro Singular de Investigación de Galicia 2019-2022, ED431G 2019/03), a Unión Europea (Fondo Europeo de Desenvolvemento Rexional-ERDF correspondente ó marco plurianual financeiro 2014-2020), e o Consello Europeo de Investigación (Advanced Grant No. 340055). D. Montoto agradece unha beca de colaboración ó Ministerio de Educación e Formación Profesional.

### Referencias

- [1] S. Wallace, E.P. Balskus, *Current Opinion in Biotechnology*, 2014, 30, 1-8.
- [2] J.C. Sadler, J.A. Dennis, N.W. Johnson, S. Wallace, *RSC Chemical Biology*, 2021, 2, 1073-1083
- [3] F.Q. Schafer, G.R. Buettner, *Free Radical Biology and Medicine*, 2001, 30(11), 1191-1212
- [4] K.J. Reszka, C.F. Chignel, *Chemico-Biological Interactions*, 1995, 96(3), 223-234
- [5] M.P. Gamcsik, M.S. Kasibhatla, S.D. Teeter, O.M. Colvin, *Biomarkers*, 2012, 17(8), 671-691

## Comunicación C15 - Estudo da estabilidade de origamis de ADN

**B. Lista Lema<sup>1</sup>, E. Padín González<sup>1,2</sup>, J. M. Ageltos<sup>1</sup>, A. Fernández Iglesias<sup>1,2</sup>, P. del Pino<sup>1,3</sup>, B. Pelaz<sup>1,2</sup>**

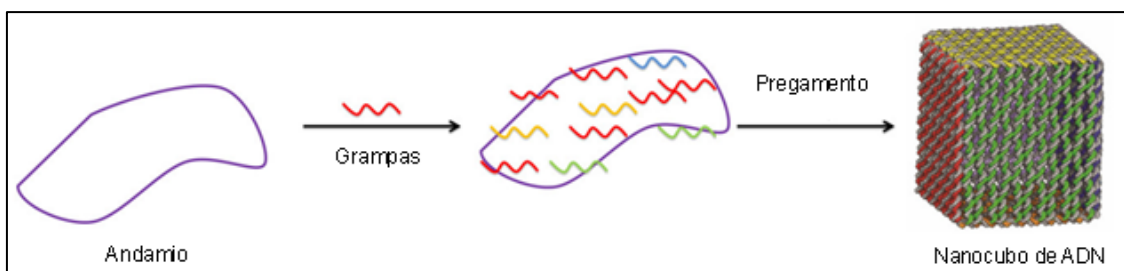
<sup>1</sup> Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CIQUS), Universidade de Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, España

<sup>2</sup> Departamento de Química Inorgánica, Universidade de Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, España

<sup>3</sup> Departamento de Física de Partículas, Universidade de Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, España

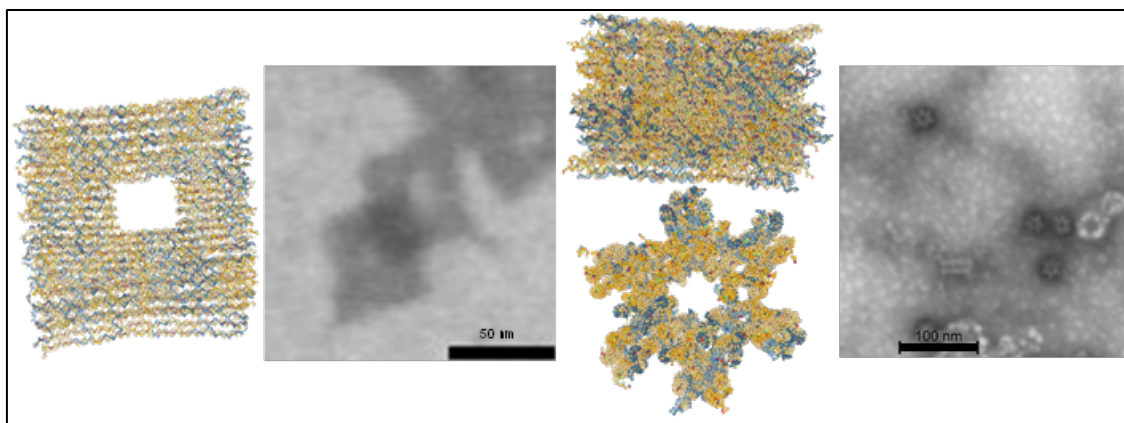
**Palabras chave:** biotecnoloxía; origami de ADN; estabilidade

Un origami de ADN é unha supramolécula formada pola autoensamblaxe e o autopregamento de cadeas simples de ADN en dúas ou tres dimensións. Este está composto por un andamio, que é unha cadea simple e longa de ADN, e por centos de oligonucleótidos curtos de secuencia complementaria a parte da do andamio denominados grampas (Figura 1) [1].



**Figura 1.** Síntese dun origami de ADN. As grampas adiciónanse ao andamio e, tras o seu pregamento, fórmase o origami de ADN. Neste caso é un nanocubo de ADN [2].

Estas estruturas atópanse na escala nanométrica, polo que presentan un tamaño adecuado para interactuar con moléculas de interese biolóxico, virus ou células. Ademais, ao estar formadas por ADN, son biocompatibles. En consecuencia, os origamis presentan potenciais aplicacións biolóxicas, sendo as relacionadas coa nanomedicina as máis prometedoras [3].



**Figura 2.** Imaxes de STEM dos origamis de ADN comerciais. Cuboide cun burato grande (PF-2, esquerda) e estrutura tipo engrenaxe (PF-4, dereita).

Porén, aínda non existen resultados concluíntes sobre a estabilidade e o comportamento dos origamis en células [3]. Neste contexto, o obxectivo deste traballo foi estudar a estabilidade dos origamis para avanzar na comprensión das interaccións entre estas nanoestruturas de ADN e os sistemas biolóxicos.

Para isto, sintetizáronse dous origamis comerciais: un cuboide cun burato grande, PF-2, e unha estrutura tipo engrenaxe, PF-4. Para poder observar estas estruturas en células, engadíuselles un intercalante fluorescente de ADN. A continuación, purificáronse e caracterizáronse as mostras de ambas supramoléculas, as cales resultaron ser fluorescentes, puras e monodispersas (Figura 2).

Unha vez caracterizados os origamis, estudouse a súa estabilidade en diferentes condicións. Realizáronse simulacións de dinámica molecular dos origamis a diferentes temperaturas e concentracións de sales, como as condicións dos cultivos celulares. Nelas, usouse un modelo de gran groso, que simplifica as estruturas a simular mantendo as súas propiedades. Ademais, tamén se determinou experimentalmente a integridade destas nanoestruturas en diferentes medios fisiolóxicos.

Os resultados obtidos son moi prometedores, xa que serven para estudar como se comportan e internalizan os origamis en células. Polo tanto, resulta razoable continuar con esta liña de investigación para profundar máis na interacción biolóxica destas nanoestruturas de ADN.

### Agradecementos

Este traballo foi financiado polo European Research Council (Starting Grant #950421, SPACING) e pola Axencia Estatal de Investigación (ref. PID2019-111218RB-100, ORIGARITMO). Especial agradecemento a Beatriz Pelaz, Esperanza Padín González e ao resto de membros do grupo BioNanoTools do CiQUS polo seu apoio.

### Referencias

- [1] P. Zhan et al., *Chemical Reviews*, 2023, 123(7), 3976-4050.
- [2] V. Kumar et al., *Theranostics*, 2016, 6(5), 710-725.
- [3] Q. Hu et al., *Chemical Reviews*, 2019, 119(10), 6459-6506.

## Comunicación C16 - Modelos matemáticos para a predición de parámetros reolóxicos

**P. Cambeses Franco,<sup>1</sup> J.M Ruso Belras,<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> *Departamento de física aplicada, Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago de Compostela, España.*

<sup>2</sup> *Grupo de materia branda e biofísica molecular. Departamento de Física Aplicada, Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago de Compostela, España*

**Palabras chave:** química de materiais; química de polímeros; reoloxía

Coñecer as propiedades e o comportamento mecánico dos materiais é de gran utilidade pois asegura seleccionar os materiais máis axeitados para fabricar un determinado produto. Isto resulta útil en campos de investigación como a industria de alimentos e bebidas [1], a química de materiais ou a biomedicina [2].

Nesta última está cobrando gran importancia suscitado pola necesidade de atopar materiais que teñan propiedades interesantes para ser empregados como substitutos da matriz extracelular (ECM) [3,4]. Para iso, estase traballando especialmente con hidroxelos poliméricos combinando biopolímeros como o alxinato (Alg), a xelatina (Gel) ou a hidroxiapatita (HAp). A hidroxiapatita consiste, tan só, na combinación de catro elementos: Ca, P, O e H. Non obstante, está causando unha gran expectación na comunidade científica debido ao seu baixo custo económico e a súa grande empregabilidade na rexeneración de tecidos óseos.

Neste contexto e co obxectivo de modelar tanto os fluídos newtonianos como os non newtonianos (aqueles nos que a viscosidade non é constante) foron propostos e desenvolto diversos modelos matemáticos. Tradicionalmente, estamos familiarizados en analizar a elasticidade e a resistencia dos materiais por un lado e a súa fluidez e viscosidade por outro. Non obstante, resulta beneficioso combinar ambas disciplinas pois a maioría de materiais presentan un comportamento dual, viscoelástico. Así o obxectivo principal do traballo foi o modelado e a aplicación de modelos capaces de combinar o comportamento elástico, viscoso e plástico simultaneamente chegando a modelos lineais de viscoelasticidade, fraccionais de viscoelasticidade e fraccionais visco-elástico-plásticos [5,6,7].

En primeiro lugar, presentáronse nocións básicas de reoloxía para poder centrarse, posteriormente, no desenvolvemento dos distintos modelos, comezando polos modelos lineais de viscoelasticidade de Kelvin-Voigt, de Maxwell e o de Burgers. A continuación, coa intención de mellorar a capacidade de predición dos modelos clásicos recorreuse ao cálculo fraccional, de gran popularidade nos últimos anos xa que aparece en numerosas disciplinas científicas e de enxeñaría, ademais de en biomedicina ou bioquímica. Así, introducíronse conceptos de cálculo fraccional que permitiron chegar aos denominados modelos de cálculo fraccional viscoelásticos. A través dunha discretización das derivadas e integrais, mediante un método implícito de diferenzas finitas L1, construíuse un algoritmo que permitiu a aplicación a casos prácticos de hidroxelos. Para rematar, combinando os modelos viscoelásticos anteriormente descritos e introducindo a plasticidade como nova característica que permite considerar a capacidade do material para deformarse permanentemente, xurdiron os modelos fraccionais visco-elástico-plásticos, capaces de modelar o comportamento elástico, plástico e viscoso simultaneamente.

Comprobouse que os modelos eran capaces de simular adecuadamente o comportamento elástico, viscoso e plástico dos materiais e que eran sensibles ante lixeiras modificacións dos distintos compostos.

## Referencias

- [1] Dogan, H., Kokini, J.L.: *Rheological properties of foods. En: Handbook of food engineering*. CRC Press, 2006, pp. 13-136.
- [2] Yu, K.M., et al.: *Finite difference methods for solving the transport equation in the problems of optical biomedical diagnostics*. *Journal of Biomedical Photonics & Engineering*, 2017, 3(1), 10, 311
- [3] Rial, R., Liu, Z., Messina, P., Ruso, J.M.: *Role of nanostructured materials in hard tissue engineering*. *Advances in Colloid and Interface Science*, 2022, 304, 102, 682
- [4] Rial, R., Liu, Z., Ruso, J.M.: *Soft actuated hybrid hydrogel with bioinspired complexity to control mechanical flexure behavior for tissue engineering*. *Nanomaterials*, 2020, 10(7), 1302
- [5] Barnes, H.A., Hutton, J.F., Walters, K.: *An introduction to rheology*, vol. 3. Elsevier, 1989
- [6] Fombuena, V., Boronat, T., Sánchez-Nacher, L., García-Sanoguera, D., Balart, R.: *Utilidad de los modelos de viscoelasticidad en el aprendizaje de la ingeniería de materiales poliméricos*. *Modelling in Science Education and Learning*, 2017, 10(1), 137–148
- [7] Gimeno Ortiz, S.: *Caracterización mediante reología oscilatoria del comportamiento de fluidos dilatantes*. B.S. thesis, 2018

## Comunicación C17 - Estudo do metabolismo *in-vitro* da 1,3-difenilguanidina (DPG) e a 1,3-di-o-tolilguanidina

**I. Riveiro Rodríguez,<sup>1</sup> A. Estévez-Danta,<sup>1</sup> M. Lage-Díaz,<sup>1</sup> R. Montes,<sup>1</sup> R. Rodil,<sup>1</sup> J.B. Quintana,<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Instituto de investigación en Análises Químicas e Biolóxicas (IAQBUS), R. Constantino Candeira S.N., Santiago de Compostela, España.

**Palabras chave:** Bioquímica/biotecnoloxía; química analítica; metabolismo.

A 1,3-difenilguanidida (DPG) e a 1,3-di-o-tolilguanidina (DTG) son aditivos empregados no proceso de vulcanización do caucho e outros materiais para mellorar as súas propiedades fisicoquímicas. Estímase a súa produción entre 1.000 e 10.000 toneladas anuais de cada un deles (datos para Europa no 2018) [1]. A este elevado volume de uso súmase a facilidade destes compostos para difundir dende os materiais nos que se atopan, xa que non se atopan unidos de forma covalente aos plásticos e gomas, o que provoca a súa liberación ao medio ambiente. Hai estudos que reportan a presenza destas sustancias no po do interior das casas, auga de choiva e augas superficiais [2, 3, 4]. Tamén hai investigacións en animais que lles atribúen efectos negativos sobre a saúde, tales como propiedades neurotóxicas, acción como disruptor endócrino, efectos sobre a reprodución ou estar relacionadas coa dermatite alérxica de contacto [5]. Debido a estes factores cómpre desenvolver metodoloxías que nos permitan identificar biomarcadores de exposición a estes compostos, é dicir os seus metabolitos.

O metabolismo consiste no conxunto de reacción bioquímicas que involucran tanto compostos exógenos coma endógenos coa fin de manter a homeostase do corpo. A maioría dos compostos exógenos son sometidos a reaccións de detoxificación, coa fin de diminuír a súa toxicidade e facilitar a súa excreción. Este tipo de rutas pódese dividir en dúas fases, unha primeira (fase I) que abrangue reaccións de oxidación-redución, hidrólise, hidroxilación, ciclacións... e unha segunda (fase II) consistente na adición de pequenas moléculas, como grupos sulfato ou glicurónico.

Neste estudo pretendíase e determinar os produtos de biotransformación da DPG e da DTG mediante técnicas de metabolismo *in-vitro*, unha alternativa menos invasiva para o ser humano e que evita a experimentación animal, fronte aos estudos *in-vivo*. Para isto, nun medio tamponado e a temperatura constante de 37°C, engadíronse as enzimas e os cofactores necesarios as reaccións. As mostras inxectáronse nun equipo de cromatografía líquida de alta resolución acoplada a espectrometría de masas en tándem de tipo cuadrupolo-tempo de voo. Paralelamente, creouse una lista de posibles metabolitos mediante predicións *in-silico* ou recollidos da bibliografía. Unha vez analizadas as mostras, sobre os cromatogramas obtidos realizouse unha busca de tipo “*suspect screening*” mediante a que se identificaron os posibles metabolitos contidos na lista de sospeitosos por comparación da súa masa exacta, perfil isotópico, etc.

En base aos resultados obtidos pódese concluír que se formaron seis metabolitos da DPG e sete da DTG mediante a simulación *in-vitro*. A estrutura destes metabolitos deduciuse a partir dos seus espectros de MS/MS estudando o seu patrón de fragmentación. Todos os compostos identificados cumpriron os parámetros de calidade marcados e seu nivel de confianza para a identificación destes compostos está entre 2b y 3, indicando nalgúns casos a presenza de isómeros [6].

## Agradecementos

Este traballo foi financiado pola Xunta de Galicia (ED431C 2021/06, ED481A-2020/258) e a Axencia Estatal de Investigación –MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (ref. PID2020-117686RB-C32).

## Referencias

- [1] (ECHA) ECA. 1,3-diphenylguanidine [Dispoñible en: <https://echa.europa.eu/es/substance-information/-/substanceinfo/100.002.730>.]
- [2] Challis J, Popick H, Prajapati S, Harder P, Giesy J, McPhedran K, et al. Occurrences of tire rubber-derived contaminants in cold-climate urban runoff. *Environmental Science & Technology Letters*. 2021, 8(11), 961-7.
- [3] Zahn D, Mucha P, Zilles V, Touffet A, Gallard H, Knepper T, et al. Identification of potentially mobile and persistent transformation products of REACH-registered chemicals and their occurrence in surface waters. *Water research*. 2019, 150, 86-96.
- [4] Schulze S, Zahn D, Montes R, Rodil R, Quintana JB, Knepper TP, et al. Occurrence of emerging persistent and mobile organic contaminants in European water samples. *Water research*. 2019, 153, 80-90.
- [5] Li Z-M, Kannan K. Occurrence of 1, 3-Diphenylguanidine, 1, 3-Di-o-tolylguanidine, and 1, 2, 3-Triphenylguanidine in Indoor Dust from 11 Countries: Implications for Human Exposure. *Environmental Science & Technology*. 2023, 57(15), 6129-38.
- [6] Schymanski EL, Jeon J, Gulde R, Fenner K, Ruff M, Singer HP, et al. Identifying small molecules via high resolution mass spectrometry: communicating confidence. *Environ. Sci. Technol.*, 2014, 48, 2097-2098.

## Comunicación C18 – Determinación de tramadol e o seu principal metabolito en líquido pericárdico mediante microextracción líquido-líquido dispersiva e cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas

**L. Blanco<sup>1</sup>, I. Álvarez<sup>1</sup>, P. Cabarcos<sup>1</sup>, M. J. Tabernero<sup>1</sup> y A. M. Bermejo<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Instituto de Ciencias Forenses Luis Concheiro, Facultade de Medicina, Universidade de Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, España.*

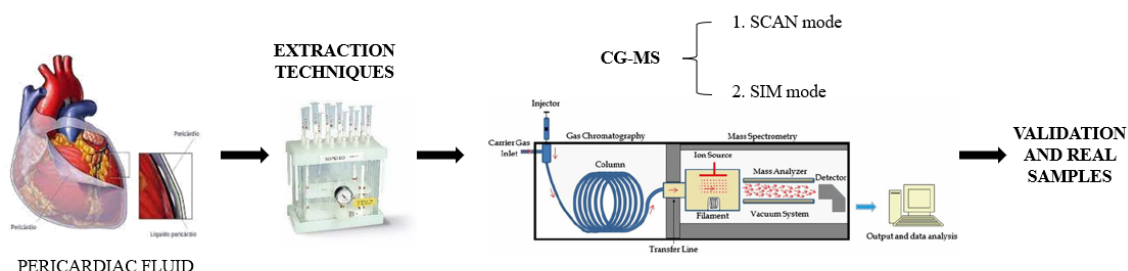
**Palabras chave:** química analítica; Tramadol; DLLME.

O tramadol é un medicamento opioide usado para tratar a dor leve e moderada. Ten un dobre mecanismo de acción, sendo un agonista puro e non selectivo dos receptores opioides, especialmente  $\mu$ , e ao mesmo tempo inhibe a recaptación de neurotransmisores. Ademais, o seu principal metabolito, O-desmetiltramadol, é activo polo que tamén contribúe aos seus efectos a través dos mesmos mecanismos.

O uso desta droga fíxose relevante debido ao seu menor potencial de abuso en comparación con outros opioides. Ademais, tamén ten unha menor taxa de depresión respiratoria como efecto secundario. Debido á creanza de que é máis seguro, estendeuse o seu uso, pero tamén o seu mal uso e abuso. Por este motivo, aumentaron os casos de intoxicación relacionados co tramadol, especialmente en combinación con outras substancias depresoras do sistema nervioso central.

Neste contexto, desenvolveuse un método para a súa determinación no líquido pericárdico. Este fluído constitúe un ultrafiltrado do plasma sanguíneo, mantendo unha boa correlación co seu contido. Por este motivo, postulouse como mostra alternativa ao sangue cando non se pode obter ou cando se ve alterada a concentración de tóxicos. Utilizouse a técnica de microextracción líquido-líquido dispersivo (DLLME) con acetona como dispersante e cloroformo como extractante. A determinación do tramadol e do seu metabolito realizouse mediante GC-MS e a validación do método realizouse seguindo as directrices de validación da FDA.

Os resultados obtidos demostraron unha linearidade no intervalo de 0,05 a 5  $\mu\text{g/mL}$  para o tramadol e de 0,3 a 5  $\mu\text{g/mL}$  para o O-desmetiltramadol. O límite de detección (LOD) alcanzado para tramadol foi de 0,02  $\mu\text{g/mL}$  mentres que para o metabolito foi de 0,1  $\mu\text{g/mL}$ . Ademais, obtivéronse resultados satisfactorios no resto dos parámetros estudados de selectividade, exactitude, precisión e recuperación. Por último, o método utilizouse na análise de 8 casos reais que demostraron a súa eficacia e capacidade de aplicación.



## Referencias

- [1] F. Moriya, F., Y. Hashimoto. *Legal Medicine*, 1999, 1(2), 86-94.
- [2] O. Zuloaga, M. Olivares, P. Navarro, A. Vallejo, A. Prieto. *Bioanalysis*, 2015, 7(17), 2211-2225.
- [3] *Comprehensive analytical chemistry: Fast Analytical Techniques Based on Microextraction*. Netherlands, Vol. 67, Elsevier, 2015.
- [4] I. Álvarez, P. Brunetti, P. Cabarcos, A. Fernández, M.J. Tabernero, A.M. Bermejo. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*, 2018, 159, 45-52.

## Comunicación C19 - Estudo da interacción entre péptidos de amiloide monoméricos e proteínas seroalbuminas con técnicas de fluorescencia

**D. Cora<sup>1</sup>, S. Illodo<sup>1,2</sup>, F. Rodríguez-Prieto,<sup>2</sup> W. Al-Soufi<sup>1</sup> e M. Novo<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Departamento de Química Física, Facultade de Ciencias, Campus Terra, Universidade de Santiago de Compostela, 27002 Lugo, España. Enderezo: [diego.cora@rai.usc.es](mailto:diego.cora@rai.usc.es)

<sup>2</sup>Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Departamento de Química Física, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, España.

**Palabras chave:** Química física, fluorescencia, Alzheimer, divulgación.

A enfermidade de Alzheimer (EA) é unha afección neurodexenerativa que afecta actualmente a máis de 45 millóns de persoas en todo o mundo. Aínda non se comprenden completamente os mecanismos exactos que están na orixe da EA. Non obstante, a hipótese máis aceptada é a da cascada amiloide, que suxire que a EA está relacionada coa acumulación de péptidos amiloides- $\beta$  ( $A\beta$ ) no cerebro.[1] Hai dous tipos principais de péptidos  $A\beta$ :  $A\beta$ 40 (composto por 40 aminoácidos) e  $A\beta$ 42 (composto por 42 aminoácidos), sendo este último o máis neurotóxico e propenso á agregación.[2-4]

Recentemente, fixéronse avances terapéuticos significativos na EA. O intercambio de plasma con substitución de albumina está a ser investigada como un novo enfoque terapéutico para a EA, amosando resultados esperanzadores.[5] Este tratamento aproveita a asociación entre a seroalbumina humana (HSA) e os péptidos  $A\beta$  para retirar o os péptidos do cerebro do paciente.[6]

O obxectivo deste traballo é caracterizar a asociación entre a HSA e os péptidos  $A\beta$  no seu estado monomérico, como paso inicial para comprender os mecanismos subxacentes do tratamento de intercambio plasmático. Tamén intentamos aclarar as inconsistencias na literatura, tendo en conta que estudos anteriores produciron resultados dispares.[7-12] Para iso, utilizamos técnicas de fluorescencia convencionais en condicións de estado estacionario e resolución temporal, así como técnicas de microscopía como a espectroscopía de Correlación de Fluorescencia, empregando  $A\beta$  marcados fluorescentemente.

A charla terá un enfoque máis divulgativo, co fin de dar a coñecer tamén a investigación que se fai no Campus de Lugo.

### Agradecementos

Agradecemos ao Goberno de España (Proxecto PID 2020-120378RB-I00) por financiar este traballo. D.C. tamén agradece ao Campus Terra da Universidade de Santiago de Compostela polo contrato predoutoral.

### Referencias

- [1] Selkoe, D. J.; Hardy, J. *EMBO Mol. Med.* 2016, 8 (6), 595–608.
- [2] Hampel, H.; Hardy, J.; Blennow, K. et al., *Mol. Psychiatry* 2021, 26 (10), 5481–5503.
- [3] Calabrò, M.; Rinaldi, C.; Santoro, G. et al., *AIMS Neurosci.* 2020, 8 (1), 86–132.
- [4] Verma, A.; Kumar Waiker, D.; Bhardwaj, B. et al., *Bioorganic Chem.* 2022, 119, 105562.
- [5] Boada, M.; Martínez-Lage, P.; Serrano-Castro, P. et al., *Expert Rev. Neurother.* 2021, 21 (8), 843–849.
- [6] Rohrer, L.; Yunce, M.; Montine, T. J. et al., *Transfus. Med. Rev.* 2023, 37 (1), 10–15.

- [7] Kuo, Y.-M.; Kokjohn, T. A.; Kalback, W. et al., *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 2000, 268 (3), 750–756.
- [8] Różga, M.; Kłoniecki, M.; Jabłonowska, A. et al., *Biochem. Biophys. Res. Commun.* 2007, 364 (3), 714–718.
- [9] Milojevic, J.; Raditsis, A.; Melacini, G., *Biophys. J.* 2009, 97 (9), 2585–2594.
- [10] Costa, M.; Ortiz, A. M.; Jorquera, J. I., *Alzheimers Dis.* 2012, 29 (1), 159–170.
- [11] Stanyon, H. F.; Viles, J. H., *J. Biol. Chem.* 2012, 287 (33), 28163–28168.
- [12] Algamal, M.; Ahmed, R.; Jafari, N., *J. Biol. Chem.* 2017, 292 (42), 17158–17168.

## Comunicación C20 - Catálise heteroxénea de nanoclústeres de prata para reaccións de hidroxenación de CO<sub>2</sub>

**M. Dieste, I. Rodríguez, J. Calvo, N. Davila**

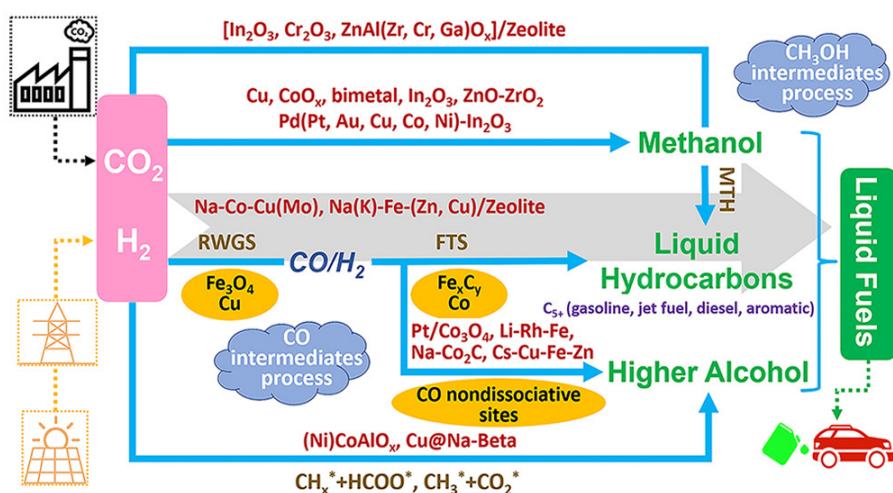
NANOGAP SUB-NM POWDER S.A., Rúa da Xesta (Pg Novo Milladoiro), 15864, Ames (A Coruña), España.

**Palabras chave** (foto)catálise; hidroxenación de CO<sub>2</sub>; Atomic Quantum Clusters (AQCs)

Durante moitas décadas os combustibles fósiles permitiron o mellor desenvolvemento da sociedade, acadando unha era de prosperidade e o máximo estado de ben estar. Porén, estes recursos limitados lévanse esgotando dende hai anos, e os contaminantes atmosféricos, como o dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), son emitidos ao medio ambiente continuamente. Coñécese que emisión deste gas de efecto invernadoiro contribúe en gran medida ao quecemento global favorecendo desta maneira ao cambio climático. Esta problemática obrigou á busca de novas alternativas enerxéticas que permitan manter un consumo sostible [1].

Un dos maiores avances neste campo foi a hidroxenación do CO<sub>2</sub> capturado, empregando fontes de enerxía renovables, para producir combustibles fósiles e produtos químicos de interese industrial. Na actualidade, existen varias estratexias de hidroxenación de CO<sub>2</sub> xa establecidas na industria química, entre elas, destácase o proceso Reverse Water-Gas Shift seguido da síntese Fischer-Tropsch (RWGS-FTS), a síntese de metanol (MTH) ou a síntese de alcohois de cadea longa (**Figura 1**) [2].

As principais dificultades asociadas a estes procesos residen no emprego dun catalizador que presente unha boa estabilidade térmica, que evite a desactivación por deposición de carbono, e por suposto, que presente boa actividade a elevadas temperaturas. En consecuencia, existe moita interese en desenvolver novos catalizadores que permitan unha maior eficiencia nas reaccións de hidroxenación de CO<sub>2</sub>.



**Figura 1.** Esquema dos principais procesos de hidroxenación de CO<sub>2</sub> existentes.

Recentemente, clústeres de pequeno tamaño (Atomic Quantum Clusters, AQC)s compostos por un número reducido de átomos, foron empregados neste campo obtendo excelentes resultados. Estes novidosos materiais presentan propiedades fluorescentes, catalíticas, fotocatalíticas e biomédicas que difiren das mostradas por clústeres máis grandes, por nanopartículas, ou polo mesmo metal a granel. É ben coñecido que os AQC)s presentan forte actividade catalítica para diferentes reaccións catalíticas, amosando melloradas selectividades e novos mecanismos [3,4].

Porén, o obxectivo deste traballo é explorar a posibilidade de utilizar estes novos e fascinantes materiais no ámbito da catálise heteroxénea para as reaccións de hidroxenación de CO<sub>2</sub>. O proxecto lévase a cabo en Nanogap que é unha empresa especializada na síntese de AQC)s.

## Referencias

- [1] Jiang, X., Nie, X., Guo, X., Song, C., Chen, J. G. *Recent Advances in Carbon Dioxide Hydrogenation to Methanol via Heterogeneous Catalysis*. *Chem. Rev.* 2020, **120**, 7984-8034
- [2] Gao, P., Zhang, L., Li, S., Zhou, Z., Sun, Y. *Novel Heterogeneous Catalysts for CO<sub>2</sub> Hydrogenation to Liquid Fuels*. *ACS Cent. Sci.* 2020, **6**, 1657-1670.
- [3] Liu, L., Corma, A. *Metal Catalysts for Heterogeneous Catalysis: From single atoms to Nanocluster and nanoparticles*. *Chem. Rev.* 2018, **118**, 4981-5079
- [4] Cong, L., Bing, Y., Tyo, E., Seifert, S., DeBartolo, J., Von Issendorf, B., Zapol, P., Vajda, S., Curtiss, L. *Carbon Dioxide Conversion to Methanol over Size-Selected Cu<sub>4</sub> Clusters at Low Pressures*. *J. Am. Chem. Soc.* 2015, **137** (27), 8676-8679.

## Comunicación C21 - Detección automática de virus respiratorio

**S. Hernández,<sup>1</sup> M. Novo,<sup>1</sup> W. Al-Soufi<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Departamento de Química Física, Facultade de Ciencias, Universidade de Santiago de Compostela, E-27002 Lugo, España, stella.hernandez@rai.usc.es*

**Palabras chave:** química física; detección; ADN.

Nos últimos anos, houbo un crecemento significativo no desenvolvemento de técnicas eficientes e rápidas para a detección e cuantificación, principalmente no contexto de diagnósticos clínicos [1,2]. Neste proxecto, usouse a detección por fluorescencia debido a súas vantaxes, como a simplicidade, sensibilidade e selectividade [2].

No marco do proxecto NANOFLUIDEDEC (IN852D 2021/5) desenvolveuse un prototipo para a extracción e detección do SARS-COV-2. O obxectivo foi o desenvolvemento dun método de detección máis eficaz que un test de antíxenos e mais rápido que unha PCR, un equipo de sobremesa que podería estar dispoñíbel nas farmacias para o seu uso, por exemplo. A detección dun virus implica varias etapas: extracción e purificación do material xenético desexado, amplificación selectiva e finalmente a detección.

Para a realización destas etapas o proxecto constituíuse por diferentes obxectivos:

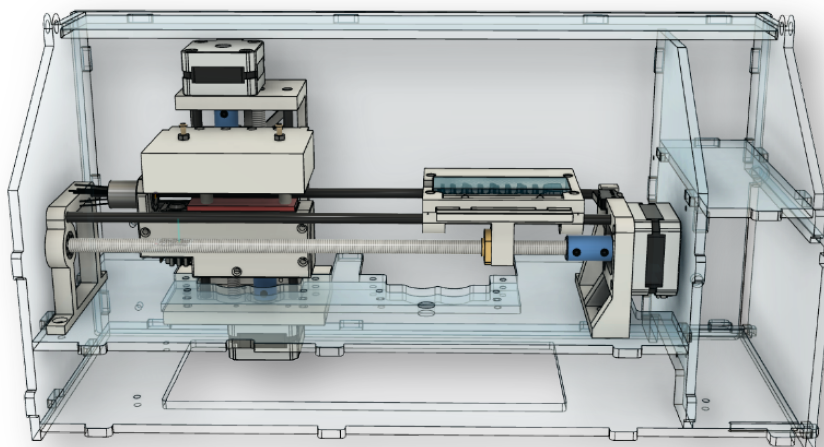
1. Encontrar unha sonda molecular viábel para a detección do ADN;
2. Montar un sensor óptico que permita a correcta detección do ADN;
3. Transporte magnético que desprace o ADN da zona de extracción á zona de detección;
4. Control de temperatura para a realización da amplificación selectiva;
5. Control numérico e procesado de datos;
6. Integración do sistema e validación.

Para atopar unha sonda molecular que detectase o ADN empregouse o Laranxa de Tiazol (TO), que na bibliografía xa se describía altas constantes de afinidade para a complexación do TO coa dobre cadea de ADN (dsDNA), así como estudos da súa selectividade para avaliar seu potencial como intercalador [3,4].

Foi validado o seu uso na reacción en cadea da polimerase (PCR) e na amplificación isotérmica mediada por bucle (LAMP), comprobándose que non interfería en ningún dos procedementos de amplificación. Para finalizar a súa validación tamén se fixo unha comparación cun colorante comercial usado na PCR.

Para o transporte do ADN empregáronse nanopartículas magnéticas (NPM), onde o ADN se une na capa externa das NPM. O estudo do uso de nanopartículas para o transporte de ADN tense feito principalmente como medio para penetrar as paredes celulares e membranas co obxectivo de administrar fármacos ou biomoléculas nestas células [5, 6, 7].

Unha vez validada a sonda molecular, cumpríronse cos demais obxectivos, como o montaxe dun sistema de detección, o control de temperatura con placas térmicas e sensores de temperatura e a integración de todo o sistema cun software de control.



**Figura 1 .**Prototipo de extracción de ADN e detección de SARS-COV-2.

### Agradecementos

Este proxecto foi financiado Xunta de Galicia—Axencia Galega de Innovación (proxectos ED431B 2016/024, R2016/007, ED431B 2019/18 e IN852D 2021/5).

### Referencias

- [1] T. Vilaivan, *Beilstein J. Org. Chem.*, 2018, 14, 253-281
- [2] N. Svanvik, G. Westman, D. Wang, M. Kubista, *Analytical Biochemistry* 2000, 281, 26-35.
- [3] J. Nygren, N. Svanvik, M. Kubista *Biopolymers* 1998, 46, 39-51.
- [4] D. L. Boger, W. C. Tse, *Bioorganic Med. Chem.* 2001, 9, 2511–2518.
- [5] F. Torney, B. G. Trewyn, V. S. Y. Lin, K. Wang, *Nat. Nanotechnol.*, 2007, 5, 295-300.
- [6] V. Sokolova, M. Epple, *Nucleic Acids Res*, 2008, 8, 1382-1395.
- [7] M. Magro et. al, *BBA- General Subjects*, 2017, 11, 2802-2810

## Comunicación C22 - Un novo complexo de disprosio cun ligando azamacrocíclico $N_6$ amosando comportamento de SIM inducido por campo

C. González-Barreira,<sup>1</sup> M. Fondo,<sup>1</sup> A. M. García-Delbe,<sup>1</sup> J. Sanmartín-Matalobos<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, España.

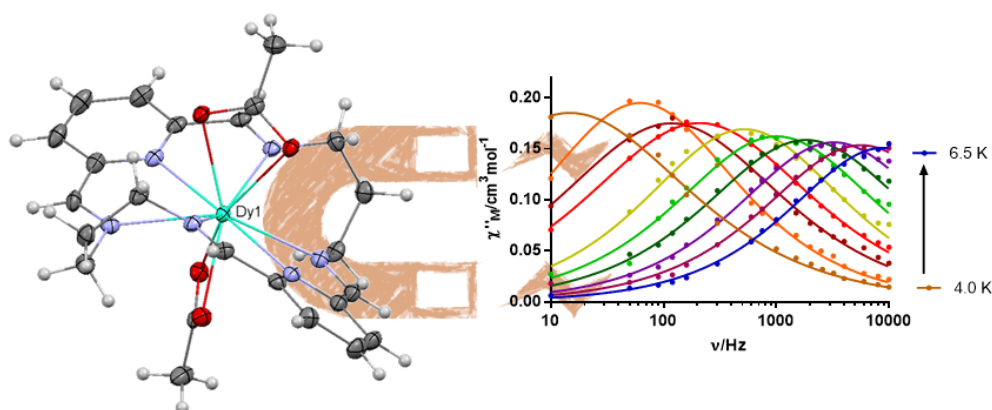
<sup>2</sup> Instituto de Materiais (iMATUS), Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, España

**Palabras chave:** Química inorgánica; disprosio; hexaaza macrociclo

Á vista dos rápidos cambios tecnolóxicos dos últimos anos, o deseño de novos materiais de base molecular converteuse nun importante reto da ciencia contemporánea. Os imáns moleculares (SMMs), en particular, ocupan un lugar destacado neste campo, dadas as súas potenciais aplicacións en almacenamento e procesamento da información dixital [1].

A funcionalidade dos SMMs de lantanoides depende, entre outros factores, do control preciso da xeometría de coordinación arredor do ión metálico. Baseándose neste feito, desenvóléronse varios enfoques sintéticos para mellorar tanto a temperatura de bloqueo ( $T_B$ ) como a barreira enerxética efectiva para a inversión do espín ( $U_{ef}$ ) nos SMMs. Un destes enfoques implica a síntese de complexos de disprosio altamente axiais, como aqueles con xeometría de bipirámide hexagonal [2,3,4].

Con todas estas consideracións en mente, presentamos aquí a síntese, a análise estrutural e a caracterización magnética do complexo de disprosio  $[\text{Dy}(\text{L}^{N_6,prop})(\text{OAc})_2](\text{NO}_3) \cdot \text{CHCl}_3$  (**1**·CHCl<sub>3</sub>) (Figura 1, esquerda), derivado dun ligando macrocíclico  $N_6$ . Os estudos magnéticos de corrente alterna (ac) revelan que o composto presenta comportamento de SMM inducido por un campo magnético externo ( $H_{dc}$ ) (Figura 1, dereita).



**Figura 1.** Diagrama de elipsoides (50% de probabilidade) para o catión  $[\text{Dy}(\text{L}^{N_6,prop})(\text{OAc})_2]^+$  en **1**·CHCl<sub>3</sub> (esquerda), e dependencia de  $\chi''_M$  coa frecuencia para **1**·CHCl<sub>3</sub> con  $H_{dc} = 2000$  Oe a diferentes temperaturas (dereita).

## Referencias

- [1] A. Zabala-Lekuona, J. M. Seco, E. Colacio, *Coord. Chem. Rev.*, 2021, 441, 213984.
- [2] A. B. Canaj, S. Dey, E. R. Martí, C. Wilson, G. Rajaraman, M. Murrie, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2019, 58, 14146-14151.
- [3] Z. Zhu, C. Zhao, T. Feng, X. Liu, X. Ying, X-L. Li, Y-Q. Zhang, J. Tang, *J. Am. Chem. Soc.*, 2021, 143, 10077-10082.
- [4] J. Corredoira-Vázquez, C. González-Barreira, P. Oreiro-Martínez, A. M. García-Deibe, J. Sanmartín-Matalobos, M. Fondo, *J. Rare Earths*, 2023, artigo avanzado, doi.org/10.1016/j.jre.2023.03.013.

## Comunicación C23 - Síntese dunha estrutura metalosupramolecular helicoidal de cobre derivada dun ligando azina funcionalizado con grupos *ter*-butilo

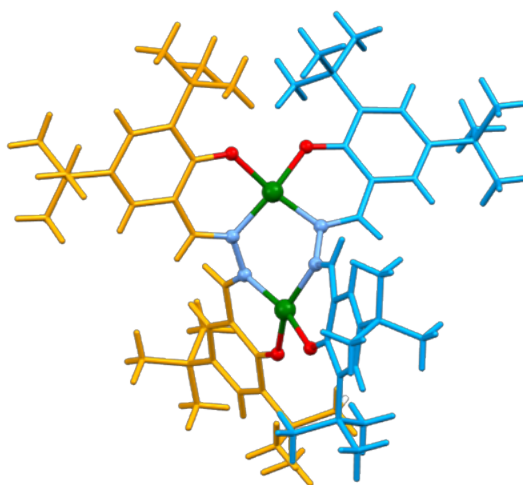
**U. Barreiro-Sisto,<sup>1</sup> S.,<sup>1</sup> I. Velo-Helena,<sup>1</sup> P. Domínguez-Carbon,<sup>1</sup> S. Fernandez-Fariña,<sup>1</sup> R. Pedrido<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Campus Vida, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, España

**Palabras chave** Química Inorgánica, helicatos, azinas

Os helicatos son estruturas metalosupramoleculares formadas por ligandos que se envolven arredor dos ións metálicos de forma helicoidal [1]. O interese neste tipo de arquitecturas de tipo helicoidal derivadas de ións metálicos débese á súa semellanza estrutural co ADN e a súa potencial aplicación en diversos ámbitos como a Ciencia dos materiais ou a Biomedicina [2]. Debido á singular estrutura dos helicatos, os precursores deben incluír múltiples átomos doadores e un espazador flexible que permita acadar a estrutura helicoidal [3]. O noso grupo de investigación posúe gran experiencia na obtención de compostos helicoidais derivados de bases de Schiff xa que son precursores moi versátiles e posúen interesantes propiedades [4].

Nesta comunicación presentamos un helicato dinuclear de cobre (II) derivado dun esqueleto azina funcionalizado con grupos *ter*-butilo ( $H_2L^5$ , Fig. 1). O composto obtívose mediante síntese electroquímica e foi caracterizado mediante diversas técnicas de caracterización como espectrometría de masas, análise elemental e raios X de monocristal.



**Figura 1.** Estrutura dun helicato dinuclear de cobre  $[Cu_2(L^5)_2]$  derivado do ligando azina  $H_2L^5$ .

### Agradecementos

Co-financiamento FEDER: Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria, Xunta de Galicia, 2018GRCGI-1584 (ED431C2018/13), MetalBIONetwork (ED431D2017/01). Ministerio de Ciencia e Innovación, Project PID2021-127531NB-I00 (AEI/10.13039/501100011033/ FEDER, UE) e METALBIO (RED2022-134091-T).

## Referencias

- [1] M. J. Hannon, L. J. Childs, *Supramol. Chem.*, 2004, 16, 7.
- [2] J. M. Lehn, A. Rigault, J. Siegel, J. Haeeowfield, B. Chevrier, D. Moras, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 1978, 84, 2565.
- [3] S. Fernandez-Fariña, I. Velo-Helena, M. Martinez-Calvo, M. Maneiro, R. Pedrido, A. M. Gonzalez-Noya, *Int. J. Mol. Sci.*, 2003, 24, 8654.
- [4] ] S. Fernandez-Fariña, I. Velo-Helena, R. Carballido, M. Martinez-Calvo, R. Barcia, O. Palacios, M. Capdevila, A. M. Gonzalez-Noya, R. Pedrido, *Int. J. Mol. Sci.*, 2023, 24(3), 2246.

## Comunicación C24 - Deseño de imáns moleculares de disprosio a partir dun ligando heptadentado $N_5O_2$

**P. Oreiro-Martínez,<sup>1</sup> J. Sanmartín-Matalobos,<sup>1,2</sup> A. M. García-Delbe,<sup>1</sup> M. Fondo.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, España.

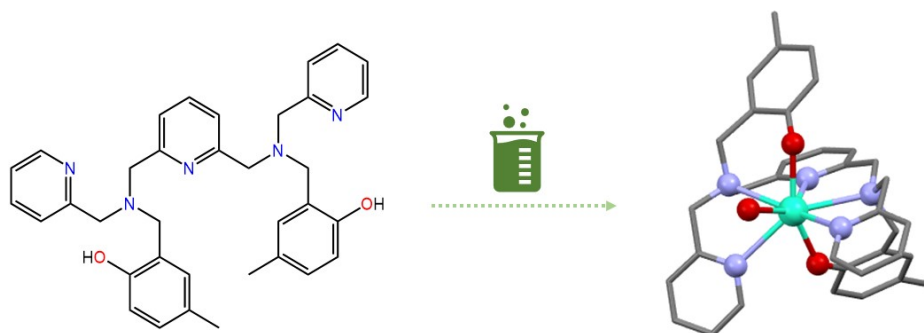
<sup>2</sup> Instituto de Materiais (iMATUS), Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, España.

**Palabras chave:** Química inorgánica; imán molecular; ligando heptadentado

As posibles aplicacións prácticas dos imáns moleculares (SMMs, Single Molecule Magnets), tales como o procesamento de datos a altas velocidades, o tratamento cuántico da información e a espintrónica molecular, experimentaron avances significativos dende o descubrimento dos SMMs baseados en lantanoides [1].

Os ións lantanoides son idóneos para o deseño de SMMs debido a que de forma inherente presentan unha elevada anisotropía, a cal se pode modular cun sutil deseño do campo de ligandos. Un exemplo notable diso é a familia de complexos tipo *sandwich* de disprosioceno, que presentan temperaturas de bloqueo ( $T_B$ ) de ata 80 K [2]. Desafortunadamente, todos eses compostos son inestables en aire, polo que o principal obxectivo deste campo de investigación é a procura de imáns moleculares con altas temperaturas de bloqueo que sexan, precisamente, estables en aire.

Actualmente, os SMMs estables en aire máis prometedores son compostos de coordinación de disprosio con xeometría de bipirámide hexagonal ou pentagonal [3],[4]. Deste xeito, os ligandos heptadentados  $N_5O_2$  poderían crear un campo de ligando  $N_5$  ecuatorial débil e introducir dadores de osíxeno cargados negativamente nas posicións apicais, co fin de predeterminar unha xeometría de bipirámide pentagonal [5]. En base a esta idea, neste traballo preséntase o composto  $[Dy(L)(H_2O)](OTf) \cdot 0.25H_2O$  ( $1 \cdot 0.25H_2O$ ), derivado do ligando heptadentado  $H_2L$  (Figura 1). Os estudos magnéticos en corrente alterna (ac) revelan que se trata dun SMM.



**Figura 1.** Esquema do ligando  $H_2L$  (esquerda) e estrutura cristalina do catión  $[Dy(L)(H_2O)]^+$  en  $1 \cdot 0.25H_2O$  (dereita).

### Agradecementos

P.O.-M. agradece á Fundación Segundo Gil Dávila pola súa axuda predoutoral.

## Referencias

- [1] E. Moreno-Pineda, W. Wernsdorfer, *Nat. Rev. Phys.*, 2021, 3, 645-659.
- [2] F.-S. Guo, B. M. Day, Y.-C. Chem, M.-L. Tong, A. Mansikkamäki, R. A. Layfield, *Science*, 2018, 362, 1400-1403.
- [3] L. Zhu, Y. Dong, B. Yin, P. Ma, D. Li, *Dalton Trans.*, 2021, 50, 12607-12618.
- [4] Z. Zhu, C. Zhao, T. Feng, X. Liu, X. Ying, X.-L. Li, Y.-Q. Zhang, J. Tang, *J. Am. Chem. Soc.*, 2021, 143, 10077-10082.
- [5] X. Meng, M. Wang, X. Gou, W. Lan, K. Jia, Y.-X. Wang, Y.-Q. Zhang, W. Shi, P. Cheng, *Inorg. Chem. Front.*, 2021, 8, 2349-2255.

## Comunicación C25 - Novas perspectivas na inmovilización de enzimas de interese industrial: fabricando nanoreactores coa tecnoloxía IC-Tagging

**A. López Teljeiro<sup>1</sup>, D. Abella López <sup>1</sup>, N. Barreiro Piñeiro <sup>1</sup>, G. Elbes González, <sup>2</sup>, J.M. Martínez Costas <sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Rúa Jenaro de la Fuente 15705, Santiago de Compostela, España*

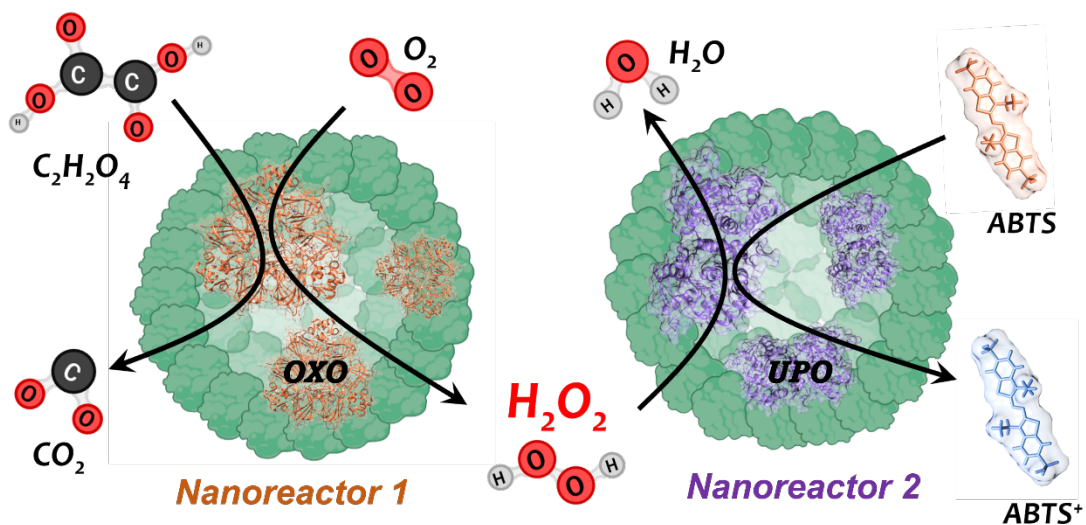
<sup>2</sup>*Instituto de Investigación Transversal en Tecnoloxías Ambientales (CRETUS), Rúa Constantino Candeira 15705, Santiago de Compostela, España.*

**Palabras chave:** Bioquímica/biotecnoloxía; IC-Tagging; enzimas de interese industrial

As enzimas son unha clase especial de proteínas capaces de acelerar a velocidade dunha gran variedade de reaccións químicas. As súas vantaxes sobre a catálise química tradicional, coma o menor impacto no medio ambiente, os grandes rendementos ou o non requirimento de condicións extremas de operación, fan que as enzimas sexan cada vez máis interesantes no sector industrial. De feito, son xa moitas as industrias que utilizan estes biocatalizadores con diversas finalidades, coma a produción de biocombustibles, o desenvolvemento de produtos farmacéuticos ou mesmo o procesado de numerosos alimentos. Por todo isto, as compañías biotecnolóxicas encargadas de producir enzimas están experimentando unha gran demanda nos últimos anos, e todo indica que seguirá aumentando no futuro próximo[1].

A maior parte de enzimas con interese industrial lévanse producindo durante anos utilizando diferentes sistemas biolóxicos coma bacterias, lévedos ou mesmo plantas, sendo plataformas altamente eficientes e optimizadas e, polo tanto, perfectamente establecidas no mercado. Porén, existen enzimas que presentan características moi particulares que fan que a súa produción a grande escala mediante estes métodos sexa complicada; son enzimas cuxo correcto pregamento é difícil de conseguir ou que tenden a inactivarse facilmente [2]. Co obxectivo de resolver esta problemática, propoñemos a utilización do sistema IC-Tagging para a estabilización e inmovilización de enzimas de interese industrial, centrándonos nun grupo de enzimas producidas por fungos denominadas perosixenases inespecíficas (UPOs), que espertan unha gran atención na industria. Dito sistema, desenvolto no noso laboratorio, permítenos cargar calquera proteína que nos interese en nanoesferas proteicas formadas por una proteína dun virus aviar denominada muNS-Mi. Para iso, simplemente temos que expresar ao mesmo tempo nunha célula a proteína muNS-Mi e a nosa proteína de interese fusionada cunha etiqueta molecular chamada Intercoil (IC), sendo a propia célula a encargada de formar as nanoesferas de proteína [3]. As aplicacións deste sistema son moi variadas, dende o desenvolvemento de vacinas contra a COVID-19, a produción de proteínas cuxa expresión non se pode conseguir mediante outras estratexias, ou mesmo a encapsulación de enzimas con interese industrial, sendo este último o foco deste traballo. Ademais de poder aplicar esta metodoloxía en distintos sistemas biolóxicos (bacterias, células de mamífero ou mesmo células de insecto), o feito de cargar as nosas enzimas en nanoesferas permítenos facilitar en gran medida a súa purificación e incluso facelas máis resistentes á temperatura, ao pH ou a axentes inactivantes.

Os resultados obtidos mostran a capacidade da nosa tecnoloxía para a expresión e purificación dunha UPO encapsulada adecuada para o seu uso en reaccións de oxifuncionalización a nivel industrial. Ademais, tamén utilizamos o noso sistema de maneira exitosa para a produción dunha oxalato oxidase (OXO), outra enzima de difícil expresión que recentemente se propuxo como un sistema de xeración *in situ* de peróxido de hidróxeno para a súa combinación coa UPO (Figura 1). En conxunto, estes resultados demostran o potencial da nosa tecnoloxía para superar os actuais retos no uso de enzimas na industria biotecnolóxica, e abren o camiño a explotar o grande interese das perosixenases inespecíficas.



**Figura 1.** Uso combinado de enzimas de interese industrial encapsuladas utilizando a metodoloxía IC-Tagging. Abreviaturas: OXO: Oxalato oxidase; UPO: Perosixenase inespecífica.

### Agradecementos

O traballo desenvolto estivo financiado polo Ministerio de Ciencia e Innovación de España. Especial agradecemento a José Manuel Martínez Costas, Natalia Barreiro Piñeiro e ao resto de membros do grupo de Viroloxía Molecular do CiQUS, así coma a Gemma Eibes González (CRETUS) e Rebeca Menaya-Vargas (CiQUS).

### Referencias

- [1] Fasim, A., More, V.S., More, S.S, *Current Opinion in Biotechnology*, 2021, 69, 68-76
- [2] Mital, S., Christie, G., Dikicioglu, D., *Microbial cell factories*, 2021, 20.1, 1-20
- [3] Brandariz-Nuñez, A., Menaya-Vargas, R., Benavente, J., Martínez-Costas, J., *PLoS One*, 2010, 5.11, e13961

## Comunicación C26 - Isotermas $\pi$ -APL de monocapas lipídicas mediante simulacións de dinámica molecular e experimentos nunha balanza de Langmuir

**Paula Antelo<sup>1,2</sup>, Emilio Lage<sup>3</sup>, Matilde Casas<sup>3</sup>, Ángel Piñeiro<sup>2\*</sup>, Rebeca García-Fandiño<sup>1\*</sup>**

<sup>1</sup>Departamento de Química Orgánica, Center for Research in Biological Chemistry and Molecular Materials, Universidade de Santiago de Compostela, Campus Vida s/n, E-15782 Santiago de Compostela, España

<sup>2</sup>Departamento de Física de Aplicada, Facultade de Física, Universidade de Santiago de Compostela, E-15782, Santiago de Compostela, España

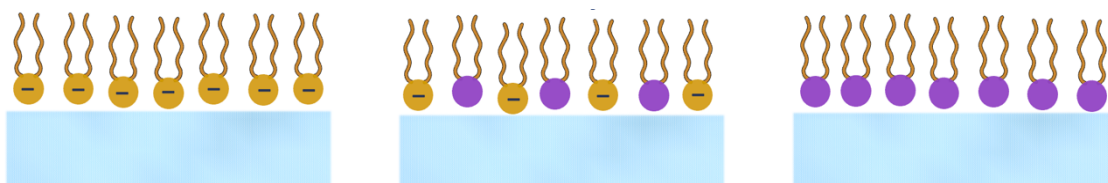
<sup>3</sup>Departamento de Química Física, Facultade de Farmacia, Universidade de Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, E-15782, España

**Palabras chave** Isotermas  $\pi$ -APL, simulación dinámica molecular, balanza Langmuir, monocapas lipídicas

As membranas celulares son sistemas complexos e dinámicos que cumpren funcións vitais para as células. Por este motivo, o estudo das súas propiedades resulta de interese para a investigación en terapia e diagnóstico de enfermidades. Dado que a estrutura das membranas celulares consiste principalmente nunha bicapa lipídica entre a que se atopan outras moléculas como proteínas ou colesterol, nas súas propiedades van influír principalmente as propiedades da bicapa lipídica que a compón. Estas últimas van vir determinadas polo tipo de lípidos que compoñan a bicapa.

En particular centrarémonos no estudo de propiedades mecánicas de monocapas lipídicas e, máis concretamente, na obtención de isotermas  $\pi$ -APL de monocapas, que consideramos modelos minimalistas de bicapas. Estas caracterizan como as monocapas responden á compresión a unha temperatura dada e poden obterse de xeito sinxelo mediante experimentos nunha balanza de Langmuir. Por outra parte, é posible reproducir estes experimentos mediante simulacións de dinámica molecular [2,3], que ademais de calcular a isoterma nunhas condicións dadas, permiten realizar a resolución atómica análises estruturais e enerxéticas [4].

Neste traballo presentaranse resultados experimentais e computacionais de isotermas  $\pi$ -APL de monocapas con diferente composición lipídica, que pretenden comprender como a composición de lípidos das monocapas inflúe na súa resposta á compresión.



### Referencias

- [1] M. Li, P. Fan and Y. Wang, *J Glycomics Lipidomics* **5** (2015) 1.
- [2] A. Olżyńska, M. Zubeck, M. Roeselova et al., *Biochimica et Biophysica Acta (BBA) – Biomembranes*, 2016, 1858, 3120.
- [3] M. Rojewska, W. Samulek, E. Kaczorek et al., *Membranes*, 2021, 11, 707.
- [4] S. Kandasamy and R. Larsson. *Biophysical Journal*, 2005, 88, 1577.

## Comunicación C27 - Estudo da condutividade térmica do $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ , un material bidimensional

Javier Corral Sertal,<sup>1,2</sup> J. Francisco Rivadulla,<sup>1</sup> Víctor Pardo,<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Universidade de Santiago de Compostela, Campus Vida s/n, E-15782 Santiago de Compostela

<sup>2</sup> Departamento de Física de Aplicada, Facultade de Física, Universidade de Santiago de Compostela, E-15782, Santiago de Compostela

**Palabras chave:** Química física, química de materiais, condutividade térmica.

Dende os seus inicios, a revolución tecnolóxica foi sempre da man da mellora da rendemento e eficiencia dos diferentes aparellos. Neste contexto, foi fundamental a introdución do transistor, un dispositivo semiconductor que modifica os diferentes sinais eléctricos de entrada producindo á saída do mesmo a resposta desexada. Como canto maior sexa o número de transistores presentes nun aparello maior será o número de procesos que se poden realizar de forma simultánea, dende o inicio da revolución tecnolóxica buscouse ampliar a cantidade destes nos dispositivos. Na procura deste obxectivo final a miniturización dos transistores xurdiu como unha necesidade básica.

Nesta miniturización os materiais bidimensionais -materiais que teñen espesores duns poucos átomos- aparecen como posible solución para a fabricación de transistores de menor tamaño. Entre os materiais bidimensionais, os materiais de *van der Waals* (vdW) -materiais caracterizados por fortes enlaces covalentes no plano e febles interaccións de vdW fóra do mesmo- xorden como unha solución ao problema do escalado. Entre os materiais de vdW atópase o  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$  (FGT), material obxecto deste estudo.

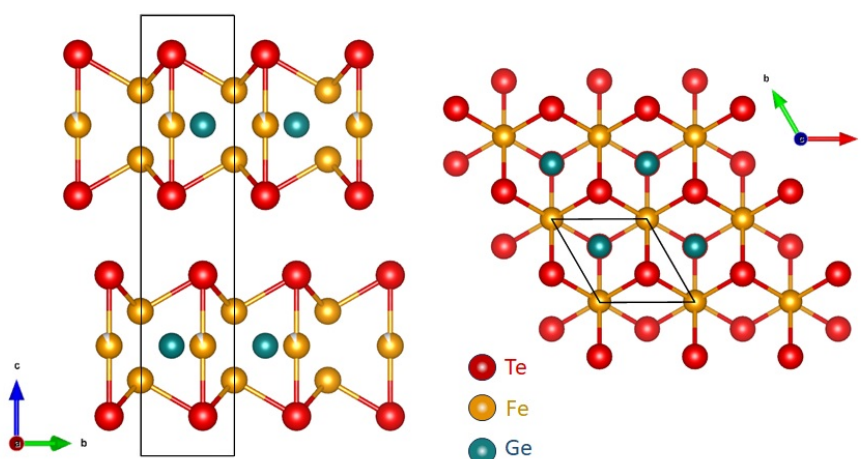


Figura 1: Cella unitaria do  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ . a) vista lateral, e b) vista azimutal.

A lei de Joule establece que o paso dunha corrente eléctrica a través dun condutor produce a liberación de enerxía en forma de calor. Controlar a liberación desta calor torna por tanto nunha necesidade fundamental para poder acadar a máxima eficiencia posible. A propiedade dos materiais que determina o ben que conduce a calor un material é a condutividade térmica. Así, canto maior sexa a condutividade térmica máis rápida será a transferencia de calor tal e como ocorre no caso dos metais.

Por este motivo neste estudo analízase a condutividade do FGT en función do número de capas a través de dous enfoques diferentes: un enfoque experimental, no cal se realiza unha preparación

previa da mostra e unha medida posterior da condutividade térmica a través da técnica de termorefectancia resolta no dominio das frecuencias (FDTR), e un enfoque computacional, no cal se simula mediante a teoría do funcional da densidade (DFT) a condutividade térmica do material, co obxectivo final de poder realizar unha comparación dos resultados e dar unha explicación dos fenómenos que dominan a condutividade térmica no FGT.

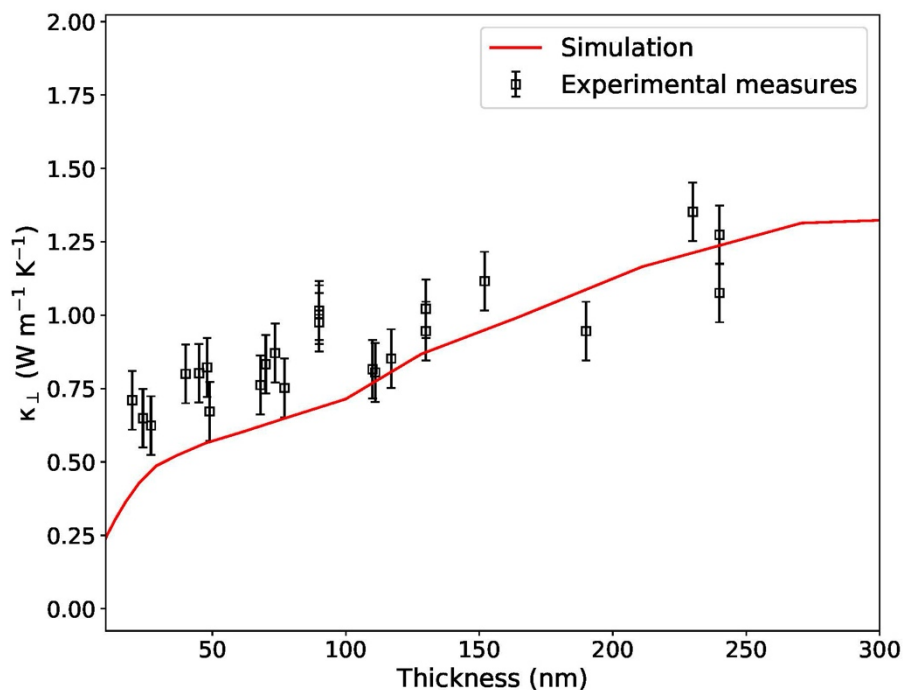


Figura 2: Comparación das condutividades térmicas medidas de xeito experimental e as simuladas mediante DFT.

### Referencias

[1] Claro, M. S., Corral-Sertal, J., Fumega, A. O., Blanco-Canosa, S., Suárez-Rodríguez, M., Hueso, L. E., Rivadulla, F. Temperature and Thickness Dependence of the Thermal Conductivity in 2D Ferromagnet  $\text{Fe}_3\text{GeTe}_2$ . *ACS Applied Materials & Interfaces*, 2023, 15, 49538-49544.

## Comunicación C28 - Evidenciando a presenza de almiscreos sintéticos en augas medioambientais mediante un método analítico baseado na extracción por sorción en fase téxtil (FPSE) e GC-MS/MS

**A. Castiñeira-Landeira<sup>1</sup>, L. Vazquez<sup>1</sup>, A. M. Carro<sup>2</sup>, M. Celeiro<sup>1</sup>, A. Kabir<sup>3</sup>, K. G. Furton<sup>3</sup>, T. Dagnac<sup>4</sup>, M. Llompart<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>CRETUS, Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, Universidade de Santiago de Compostela. E-15782 – Santiago de Compostela (España).

<sup>2</sup>IMATUS, IDIS, Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela, E-15782 – Santiago de Compostela (España).

<sup>3</sup>Instituto Internacional de Investigación Forense, Departamento de Química e Bioquímica, Universidade Internacional de Florida, Miami, FL-33199 (EEUU).

<sup>4</sup>Centro de Investigacións Agrarias de Mabegondo (AGACAL-CIAM), Unidade de Contaminantes Orgánicos, Apartado 10, E-15080, A Coruña (España).

**Palabras chave:** química analítica; almiscreos sintéticos; augas medioambientais.

Os almiscreos sintéticos son unha clase de aditivos de fragancias sintéticas que se empregan en produtos de coidado persoal e domésticos co fin de crear aromas agradábeis e facéndoo máis atractivos para os/as consumidores/as. Con todo, debido á súa toxicidade, desequilibrio estroxiénico e carcinogenicidade, considéranse contaminantes emerxentes, e a súa presenza nalgúns compartimentos medioambientais débese principalmente ós sumidoiros. Segundo a súa estrutura química, estas fragancias pódense clasificar en almiscreos policíclicos, nitroxenados, macrocíclicos e alicíclicos [1].

O obxectivo deste traballo é o desenvolvemento dunha metodoloxía analítica capaz de determinar simultaneamente 12 almiscreos sintéticos, incluíndo os nitroxenados (musk xylene, ambrette, moskene, tibetene e ketone), policíclicos (galaxolide, celestolide, phantolide, cashmeran, traseolide e tonalide) e macrocíclicos (ambrettolide), en mostras de augas medioambientais. A metodoloxía baséase na extracción por sorción en fase téxtil (*Fabric Phase Sorptive Extraction*, FPSE) seguida de cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas en tándem (FPSE-GC-MS/MS). A FPSE é unha técnica recente desenvolvida por A. Kabir e K. G. Furton cuxa flexibilidade e sistema absorbente híbrido sol-gel supera tecnoloxías actuais de preparación de mostra [3]. Os parámetros máis críticos que afectan á eficacia da técnica de extracción (FPSE) foron optimizados mediante un deseño de experimentos, incluíndo o recubrimento de sorbente sol-xel, o modo de axitación, o tempo de extracción e desorción, o efecto *salting-out*, o volume de mostra, o disolvente de desorción e o volume do mesmo. En condicións óptimas, o método validouse en termos de linearidade ( $R^2 > 0.9904$ ), precisión ( $RSD < 12\%$ ) e exactitude (80 - 110%), amosando resultados satisfactorios. Por último, despois de validala, a metodoloxía aplicouse a mostras reais de auga, atopándose 11 dos 12 almiscreos estudados, tres deles prohibidos en produtos cosméticos [2]. Esta metodoloxía demostra ser unha alternativa sostible (*Figura 1*) dada a baixa xeración de residuos, ó emprego dun baixo volume dun disolvente recoñecido como seguro (0,5 mL de etanol), así como un mínimo consumo de enerxía e tempo.

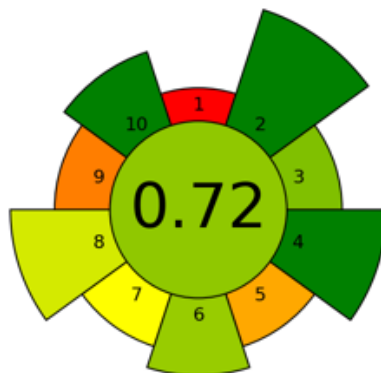


Figura 3. Pictograma que avalía o grao de greenness para a FPSE en condicións óptimas [4]

**Agradecementos:** Esta investigación foi apoiada polos proxectos ED431 2020/06, IN607B 2019/13 e IN607B 2022/15 (Programa de Grupos de Investigación Consolidados, Xunta de Galicia) e polo proxecto UNST10-1E-491 (Programa de Infraestrutura Científico-Tecnolóxica, Ministerio de Ciencia e Innovación, Spain). Este estudo baséase no traballo do Grupo de Estudo e Rede de Preparación de Mostras, apoiado pola División de Química Analítica da Sociedade Europea de Química. Os/as autores/as pertencen á Rede Nacional para a Sustentabilidade na Preparación de Mostra, RED2022-134079-T (Ministerio de Ciencia, Innovación e Universidades, España). A.C.L. agradece a bolsa de Iniciación á Investigación Máster USC (axudas Santander investigación) e a axuda predoutoral da Xunta de Galicia, ED481A e IN606A. Todos os programas están cofinanciados por FEDER (UE).

#### Referencias

- [1] X. Li, Z. Chu, J. Yang, M. Li, M. Du, X. Zhao, Z. J. Zhu, L. Li. *Advances in Marine Biology*. 2018, 81, 213-280.
- [2] Europa. 2009. Regulamento (CE) No 1223/2009 do Parlamento Europeo e do Consello de 30 de novembro de 2009 sobre os produtos cosméticos. *Diario Oficial da Unión Europea*, 22 de decembro de 2019, 342, 59 – 209.
- [3] M. Celeiro, R. Acerbi, A. Kabir, K. G. Furton, M. Llompарт. *M. Anal. Chim. Acta X*. 2020, 4, 100038.
- [4] W. Wojnowski, M. Tobiszewski, F. Pena-Pereira, E. Psillakis. *TrAC-Trend. Anal. Chem.* 2022, 14, 116553.

## COMUNICACIÓNS PREMIADAS

### Premio do público en categoría máster

**Comunicación (C-16) Paula Cambeses Franco**

### Modelos matemáticos para a predicción de parámetros reológicos

### Premio dos comités científico e organizador en categoría máster

### Comunicación (C-14) David Montoto Pintos

### Reaccións abióticas promovidas pola maquinaria celular

### Premio do público en categoría doutoramento

### Comunicación (C-2) Andrés Duque Villaverde

*Desenvolvemento e aplicación dunha metodoloxía analítica para a análise de compostos orgánicos perigosos en partículas de caucho de pneumáticos*

### Premio dos comités científico e organizador en categoría doutoramento

**Comunicación (C-21) Stella Hernández Faria de Moraes**

### ***Detección automática de virus respiratorio***

15-16  
NOVEMBRO  
2023

# XUNTANZA DE I NVESTIGADOR@S N OV@S NO ÁMBITO DA Q UÍMICA

Facultade de Química  
Universidade de Santiago de Compostela

  @xinq\_usc

