

XINQ_2021

XUNTANZA

investigadores novos no ámbito da **Química**

25 e 26 de novembro de 2021
SANTIAGO DE COMPOSTELA

LIBRO DE RESUMOS

Facultade de Química
Universidade de Santiago de Compostela

Xuntanza Investigadores Novos no ámbito da Química
Libro de resumos XINQ_21
Santiago de Compostela, 2021
Universidade de Santiago de Compostela

53 páxinas
Índice: páxina 3

ISBN 978-84-09-35916-5
Materia: PN, Química-PD

Comité organizador: Ana María González Noya, José Benito Quintana Álvarez,
Carlos Vázquez Vázquez, Antonio Rumbo Gómez

Comité científico

Ana María González Noya
José Benito Quintana Álvarez
Carlos Vázquez Vázquez
Antonio Rumbo Gómez

Entidades organizadoras

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



FACULTADE DE QUÍMICA



SERVIZO DE NORMALIZACIÓN
LINGÜÍSTICA

Índice

Presentación.....	5
Estudo dos modos de coordinación da difosfina dppm fronte a compostos ciclo- paladados.....	9
Arquitecturas metalosupramoleculares de tipo helicoidal derivadas dun ligando bistiosemicarbazona	12
Fotocatálise bioortogonal catalizada pola luz visible.....	14
Polímeros helicoidais fluorescentes: propiedades e aplicacións.....	17
Determinación automatizada de pesticidas en mostras de viño mediante SPE on-line con LC-MS/MS.....	19
Desenvolvemento dunha nova metodoloxía analítica para a cuantificación de contaminantes emerxentes en augas.....	22
Preparación de carbóns activados a partir de serraduras de piñeiro para a adsor- ción de contaminantes de efluentes líquidos.....	24
Síntese e caracterización de compósito de poliuretano e magnetita para hiperter- mia magnética.....	27
Un complexo dinuclear de disprosio con ponte fluoruro como imán molecular.....	29
Nanocarbóns microporosos funcionalizados para a eliminación de contaminantes industriais.....	32
Preparación de óxidos semicondutores como soportes de clústeres cuánticos ató- micos.....	36
Síntese de paladaciclos mono e dinucleares derivados de ligandos TSC: Estudo de reactividade fronte a difosfinas de cadea curta.....	38
Paladaciclos como precursores de metaloligandos funcionalizados.....	40

Novos metaloenzimas artificiais unidos a microesferas proteicas como reactores bioortogonais	42
Ás portas da célula coa dinámica molecular	45
Bioaccesibilidade humana de plastificantes presentes nos microplásticos simulando dixestións gastrointestinais	47
Desenvolvemento dunha metodoloxía analítica para a determinación da exposición humana a bisfenois mediante análise de augas residuais con fins epidemiolóxicos	49
Índice de asistentes.....	51
Índice de autores.....	52

Presentación

Esta Xuntanza é un punto de encontro para promocionar a investigación entre a xente nova e en lingua galega en campos de coñecemento próximos á Química.

Xoves 25 de novembro

Primeira sesión

- 16:00** **Presentación da Xuntanza de Investigadores Novos no ámbito da Química**
- 16:20** **Comunicación (O-1) – Marcos Rúa Sueiro**
Estudo dos modos de coordinación da difosfina dppm fronte a compostos ciclopaladados
- 16:40** **Comunicación (O-2) – Isabel Velo Heleno**
Arquitecturas metalosupramoleculares de tipo helicoidal derivadas dun ligando bistiosemicarbazona
- 17:00** **Comunicación (O-3) – Lara Troncoso Afonso**
Fotocatálisis bioortogonal catalizada pola luz visible
- 17:20** **Comunicación (O-4) – Juan José Tarrío**
Polímeros Helicoidais Fluorescentes: Propiedades e Aplicacións
- 17:40** **Comunicación (O-5) – Leticia Pérez Mayán**
Determinación automatizada de pesticidas en mostras de viño mediante SPE on-line con LC-MS/MS
- 18:00** **Comunicación (O-6) – Sandra Méndez Martínez**
Desenvolvemento dunha nova metodoloxía analítica para a cuantificación de contaminantes emerxentes en augas
- 18:20** **Comunicación (O-7) – Catarina Pimentel**
Preparación de carbóns activados a partir de serrín de piñeiro para a adsorción de contaminantes de efluentes líquidos
- 18:40** **Comunicación (O-8) – Ángela Arnosa**
Síntese e caracterización de composites de poliuretano e magnetita para hipertermia magnética
- 19:00** **Comunicación (O-9) – Cristina González Barreira**
Un complexo dinuclear de disprosio con ponte fluoruro como imán molecular

Venres 26 de novembro**Segunda sesión**

- 16:00 Comunicación (O-10) – Lidia Domínguez Ramos**
Nanocarbóns microporosos funcionalizados para a eliminación de contaminantes industriais
- 16:20 Comunicación (O-11) – María Moreno Pérez**
Preparación de óxidos semicondutores como soportes de clústeres cuánticos atómicos
- 16:40 Comunicación (O-12) – Sara Bermúdez Fernández**
Síntese de paladaciclos mono e dinucleares derivados de ligandos TSC: Estudo de reactividade fronte a difosfinas de cadea curta
- 17:00 Comunicación (O-13) – Basma Raad Shakir Aljanabi**
Paladaciclos como precursores de metaloligandos funcionalizados
- 17:20 Comunicación (O-14) – Manuel Rodríguez Romero**
Novos metaloencimas artificiais unidos a microesferas proteicas como reactivos bioortogonais
- 17:40 Comunicación (O-15) – Alexandre Blanco González**
As portas da célula ca dinámica molecular
- 18:00 Comunicación (O-16) – Javier López Vázquez**
Bioaccesibilidade humana de plastificantes presentes nos microplásticos simulando dixestións gastrointestinais
- 18:20 Comunicación (O-17) – Andrea Estévez Danta**
Desenvolvemento dunha metodoloxía analítica para a determinación da exposición humana a bisfenois mediante análise de augas residuais con fins epidemiolóxicas
- 18:40 Clausura da Xuntanza de Investigadores Novos no ámbito da Química**

Comunicacións Orais

Estudo dos modos de coordinación da difosfina dppm fronte a compostos ciclopaladados

M. Rúa-Sueiro

J. M. Vila

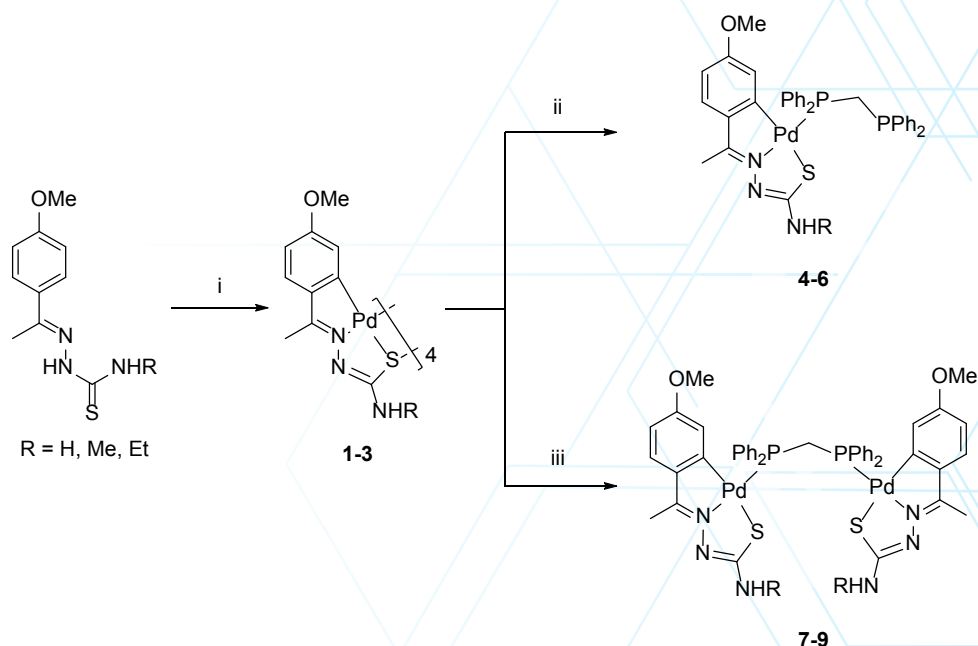
Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química,
Universidade de Santiago de Compostela, Avda. das Ciencias s/n,
15782, Santiago de Compostela, España;
marcos.rua.sueiro@usc.es

Palabras chave: ciclopaladación, tiosemicarbazona, difosfina

Os compostos ciclometalados de metais de transición, particularmente de paladio, son de grande interese debido ás interesantes aplicacións nas que poden ser utilizados. A máis salientable é a utilidade como catalizadores en reaccións de acoplamento cruzado, que favorece a formación de enlaces C-C [1] ou C-N [2]. Ademais, moitos presentan actividade anticancerixena [3]; trátase dunha familia de compostos que obteñen resultados moi prometedores en ensaios biolóxicos.

No grupo de investigación química organometálica e macrocíclica (QUIMAOR, GI-1581) temos ampla experiencia na síntese e caracterización de compostos ciclometalados de paladio e platino con ligandos orgánicos coma tiosemicarbazonas [4], bases de Schiff [5] e iminofosforanos [6], e tamén nas aplicacións destes compostos tanto no campo catalítico [7] coma na avaliación da actividade biolóxica dos complexos ciclopaladados [8].

Neste traballo preséntase a síntese de compostos ciclometalados derivados de ligandos tiosemicarbazona, que actúan como ligandos tridentados [C, N, S] tal e como se amosa no esquema 1. No seguinte paso estudárase a reactividade da difosfina bis(difenilfosfino)metano (dppm) fronte aos compostos ciclometalados, variando a estequiometría da reacción, para intentar obter así compostos mononucleares ou dinucleares. Todos os compostos sintetizados neste traballo serán caracterizados mediante espectroscopia infravermella (IR), espectroscopia RMN de ^1H , espectroscopia RMN de ^{31}P - $\{^1\text{H}\}$ no caso dos compostos coa difosfina dppm e mediante difracción de raios X de monocristal no caso do composto 4.



Esquema 1. (i) K_2PdCl_4 , EtOH/H₂O; (ii) 1:4 $Ph_2PCH_2PPh_2$ /MeCOMe; (iii) 1:2 $Ph_2PCH_2PPh_2$ /MeCOMe.

Agradecementos: Os autores agradecen o financiamento recibido pola Xunta de Galicia baixo o programa de Grupos de Referencia (GRC 2019/014).

Referencias

- [1] a) S. Ramírez-Rave, D. Morales-Morales, J. M. Grévy, *Inorganica Chimica Acta*, **2017**, 462, 249-255; b) D. Zhang, J. Yu, *Organometallics* **2020**, 39, 1269-1280.
- [2] a) H. Veisi, P. Safarimehr, S. Hemmati, *Materials Science and Engineering: C*, **2019**, 96, 310-318; b) I. C. Watson, A. Schumann, H. Yu, E. C. Davy, R. McDonald, M. J. Ferguson, C. Hering-Junghans, E. Rivard, *Chemistry – A European Journal*, **2019**, 25, 9678-9690.
- [3] a) D. Özerkan, O. Ertik, B. Kaya, S. E. Kuruca, R. Yanardag, B. Ülküseven, *Investigational New Drugs*, **2019**, 37, 1187-1197; b) T. A. Yousef, G. M. Abu El-Reash, *Journal of Molecular Structure*, **2020**, 1201, 127180.
- [4] a) J. Martínez, E. M. Cabaleiro-Lago, J. M. Ortiueira, M. T. Pereira, P. Frieiro, F. Lucio, J. M. Vila, *Inorganica Chimica Acta*, **2016**, 449, 20-30; b) A. Fernández-Figueiras, F. Lucio-Martínez, P. Munín-Cruz, J. M. Ortiueira, P. Polo-Ces, F. Reigosa, M. T. Pereira, J. M. Vila, *ChemistryOpen*, **2018**, 7, 754-763.

- [5] a) D. Vázquez-García, A. Fernández, M. López-Torres, A. Rodríguez, N. Gómez-Blanco, C. Viader, J. M. Vila, J. J. Fernández, *Journal of Organometallic Chemistry*, **2011**, 696, 764-771; b) P. Frieiro-Gomis, F. Lucio-Martínez, P. Munín-Cruz, J. M. Ortigueira, M. T. Pereira, P. Polo-Ces, D. Vázquez-García, J. M. Vila, *Chemical Communications*, **2018**, 54, 2662-2665.
- [6] a) A. Fernández-Figueiras, F. Lucio-Martínez, P. Munín-Cruz, P. Polo-Ces, F. Reigosa, H. Adams, M. T. Pereira, J. M. Vila, *Dalton Transactions*, **2018**, 47, 15801-15807; b) P. Munín-Cruz, F. Reigosa, M. Rúa-Sueiro, J. M. Ortigueira, M. T. Pereira, J. M. Vila, *ChemistryOpen*, **2020**, 9, 1190-1194.
- [7] a) F. Lucio-Martínez, L. A. Adrio, P. Polo-Ces, J. M. Ortigueira, J. J. Fernández, H. Adams, M. T. Pereira, J. M. Vila, *Dalton Transactions*, **2016**, 45, 17598-17601; b) J. M. Vila, M. T. Pereira, F. Lucio-Martínez, F. Reigosa, in *Palladacycles*, Elsevier, **2019**, pp. 1-20.
- [8] F. Reigosa-Chamorro, L. R. Raposo, P. Munín-Cruz, M. T. Pereira, C. Roma-Rodrigues, P. V. Baptista, A. R. Fernandes, J. M. Vila, *Inorganic Chemistry*, **2021**, 60, 3939-3951.

Arquitecturas metalosupramoleculares de tipo helicoidal derivadas dun ligando *bistiosemicarbazona*

Isabel Velo-Helena¹
Sandra Fernández-Fariña¹
Miguel Martínez-Calvo¹
Ana M. González-Noya¹
Rosa Pedrido¹

¹Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Campus Vida
Universidade de Santiago de Compostela, Santiago de Compostela
15782, España
mariaisabel.velo.helena@usc.es

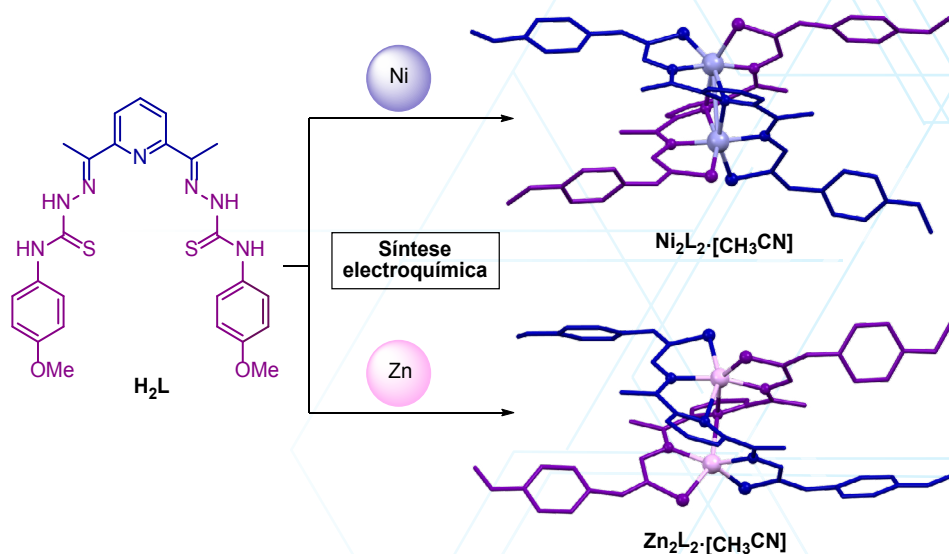
Palabras chave: Bistiosemicarbazona, arquitecturas metalosupramoleculares, helicatos

As arquitecturas metalosupramoleculares obtéñense mediante un proceso de unión espontáneo entre ligandos e ións metálicos denominado autoensamblaxe espontánea dirixida por ións metálicos. Nestes procesos os ións actúan como centros aos que se coordinan os diferentes ligandos, que dan así lugar a un amplo abano de arquitecturas metalosupramoleculares coma son os helicatos [1].

As arquitecturas metalosupramoleculares de tipo helicoidal están formadas por un eixe central constituído polos centros metálicos e por un ou máis ligandos que os envolven, o que dá lugar a estruturas semellantes ás da dobre hélice do ADN [2]. Estas arquitecturas destacan polas súas numerosas aplicacións en áreas como a Química de Materiais ou a Bioloxía Molecular [3].

En particular, os ligandos *bistiosemicarbazona* son de grande interese na preparación de helicatos debido á súa versatilidade como sistemas donantes e ás súas importantes propiedades biolóxicas, entre as que destaca a súa actividade antitumoral, antiviral ou antibacteriana [4].

Neste traballo descríbese a síntese e caracterización dun ligando *bistiosemicarbazona* H₂L e a posterior obtención dos helicatos dinucleares de níquel e zinc mediante unha metodoloxía de síntese electroquímica (Esquema 1).



Esquema 1. Obtención dos helicatos de Ni(II) e Zn(II) derivados do ligando bistiosemicarbazona H_2L .

Agradecementos: Xunta de Galicia (GRC GI-1584-ED431C2018/13 Grupo de Investigación Suprabioin) e MINECO (RED2018-102471-T MultiMetDrugs, CTQ2015-71211 MetalBIO).

Referencias

- [1] J.-M. Lehn, *Pure & Appl. Chem.*, **1978**, 50, 871-892; b) A. Casini, B. Woods, M. Wenzel, *Inorg. Chem.*, **2017**, 56, 14715-14729.
- [2] M. J. Hannon, L. J. Childs, *Supramol. Chem.* **2004**, 16, 7-22.
- [3] A. I. Matesanz, J. M. Pérez, P. Navarro, J. M. Moreno, E. Colacio, P. Souza, *J. Inorg. Biochem.* **1999**, 76, 29-37.

Fotocatálise bioortogonal catalizada pola luz visible

L. Troncoso-Afonso^{1*}

M. Tomás-Gamasa¹

J.L. Mascareñas¹

¹MetBioCat group, CiQUS (Research Centre in Biological Chemistry and Molecular Materials)
Universidade de Santiago de Compostela. Rúa Jenaro de la Fuente s/n
15705 Santiago de Compostela (Spain)

*lara.troncoso@rai.usc.es

Palabras chave: Fotocatálise, luz visible, química biolóxica.

A química biolóxica consiste no estudo dos procesos químicos que acontecen no interior dos seres vivos dende o punto de vista molecular. Entender os mecanismos celulares e moleculares relativos ás funcións biolóxicas é fundamental para o tratamento de moitas enfermidades. É máis, ser capaz de manipular, monitorizar e transformar o comportamento celular é clave para o desenvolvemento da medicina moderna.

Non obstante, interferir nas funcións celulares non é unha tarefa trivial e require o desenvolvemento de novas ferramentas para levar a cabo as transformacións deseñadas baixo o complexo ambiente dos sistemas biolóxicos. As transformacións químicas de substancias exógenas e endógenas no interior dos seres vivos require bioortogonalidade e selectividade. Un modo de levalas a cabo pode basearse no uso de transformacións inducidas fotoquímicamente, promovidas pola luz visible. A combinación da fotoquímica e os métodos bioortogonais abre paso á química fotobioortogonal, un novidoso campo de investigación que se atopa aínda na súa infancia.

O traballo experimental neste proxecto consistiu no estudo de diferentes reaccións fotoinducidas en medio acuoso e en presenza de disolventes biolóxicos. Os procesos intermoleculares estudados incluíron a formación de enlaces C-C e C-heteroátomo para a obtención de estruturas interesantes, como fenantrenos, benzotiofenos e cumarinas.

En primeiro lugar, estudouse a síntese de fenantrenos [1] baixo as condicións que se recollen na figura 1. O traballo experimental consistiu na optimización das condicións de reacción, empregando o complexo de rutenio en PBS e diferentes técnicas como os métodos de adición lenta. Así mesmo, a reacción levouse a cabo en diferentes medios biolóxicos como DEMEM, solución de BSA, lisados celulares e incluso en presenza de células HeLa.

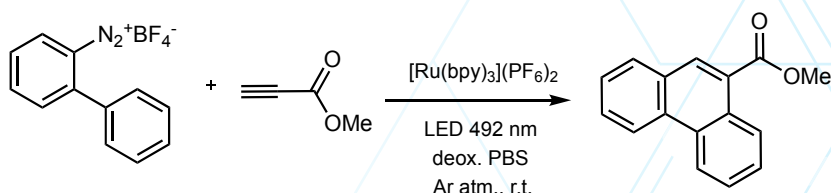


Figura 1. Esquema de reacción para a síntese de fenantrenos.

Por outra banda, explorouse a síntese fotocatalizada de benzotiofenos [2], como se recolle na figura 2. Neste caso, os estudos consistiron en comparar diferentes condicións de reacción para explorar a viabilidade do proceso en medios acuosos, o que supón un primeiro paso para alcanzar a bioortogonalidade.

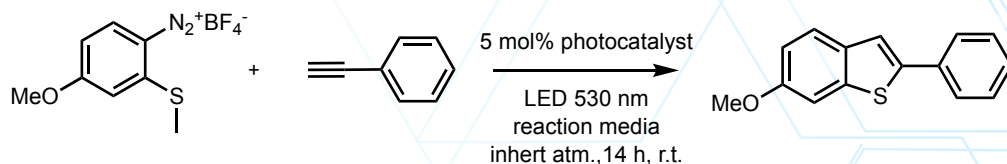


Figura 2. Esquema de reacción para a síntese de benzotiofenos.

Finalmente, en relación a síntese de cumarinas [3], na figura 3 recóllense as condicións de reacción empregadas. Neste caso, explorouse o uso de diferentes condicións de reacción (distintos fotocatalizadores en diferentes medios de reacción). Desafortunadamente, ningunha das combinacións permitiu o illamento do produto.

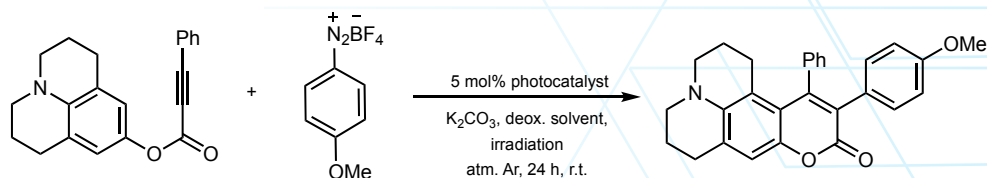


Figura 3. Esquema de reacción para a síntese de cumarinas.

Agradecementos: Este traballo recibiu apoio financeiro de bolsas Españolas (PID2019-108624RB-I00, RTI 2018-093813-J-I00 e rede ORFEO-CINQA

CTQ2016-81797-REDC), da Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria (2015-CP082, ED431C-2017/19 e da acreditación 2019-2022 de Centro Singular de Investigación de Galicia, ED431G 2019/03), da Unión Europea (FEDER correspondente ao marco financeiro multianual 2014-2020), e o European Research Council (Advanced Grant nº 340055). Os autores agradecen o apoio técnico prestado polo persoal xeral do CiQUS.

Referencias

- [1] Xiao, T.; Dong, X.; Tang, Y. and Zhou, L. (2012). *Adv. Synth. Catal.*, **354** (17), 3195-3199.
- [2] Hari, D. P.; Hering, T. and König, B. (2012). *Org. Lett.*, **4** (20), 5334-5337.
- [3] Fu, W.; Zhu, M.; Zou, G.; C., Xu; Wang, Z. and Ji, B. (2015). *Org. Chem.*, **80** (9), 4776-4770.

Polímeros helicoidais fluorescentes: propiedades e aplicacións

Juan José Tarrío

Emilio Quiñoá

Félix Freire

Departamento de Química Orgánica/CIQUS, Santiago de Compostela, España;

juanjose.tarrío@usc.es

Palabras chave: Polímeros, fluorescentes, aplicacións

A enxeñería molecular permite o deseño e creación de novos materiais cunha determinada estrutura e propiedades específicas interrelacionadas entre si. Con isto en mente, tratando de emular as hélices presentes na natureza e as súas propiedades, xorden os polímeros helicoidais sintéticos [1].

As potenciais aplicacións deste tipo de polímeros é moi ampla e abranguen o uso como sensores, como recheo de columnas cromatográficas para separación de substancias quírais ou mesmo en catálise. Todo isto grazas ao control que se pode exercer sobre a hélice (lonxitude, sentido de xiro...) mediante a aplicación de estímulos externos como adición de metais, disolventes, cambios de pH ou temperatura [2].

Neste traballo farase unha breve revisión das condicións para a obtención de poli(difenilacetileno)s, así como das súas propiedades e posibles aplicacións. Estes polímeros helicoidais presentan unha estrutura ríxida que os fai termo e foto-resistentes. Ademais, posúen a capacidade de emitiren luz, o que os fai aptos para o seu uso en pantallas ou dispositivos fotoelétricos [3,4].

Agradecementos: Agradecemos ao Servizo de Microscopia Electrónica (RIADT, USC). Tamén, o financiamento por parte de AEI (PID2019-109733GB-I00), Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2019-107307RB-I00 e PID2020-117605GB-I00). Xunta de Galicia (ED431C 2018/30, ED431C 2021/40, Centro Singular de Investigación de Galicia acreditación 2019-2022, ED431G 2019/03, Beca Leonardo a Investigadores y Creadores Culturales 2020 da Fundación BBVA e ao European Regional Development Fund (ERDF). J. J. T. agradece ao MICINN por un contrato FPU.

Referencias

- [1] Yashima, E.; Maeda, K.; Iida, H.; Furusho, Y.; Nagai, K. *Chem. Rev.* **2009**, *109*, 6102-62111.
- [2] Yashima, E.; Ousaka, N.; Taura, D.; Shimomura, K.; Ijai, T.; Maeda, K. *Chem. Rev.* **2016**, *116*, 13752-13990.
- [3] Wang, X.; Sun, J. Z.; Tang, B. Z. *Progress in Polymer Science*, **2018**, *79*, 98-120.
- [4] Jin, Y. J.; Kwak, G. *Polymer Reviews*, **2017**, *57*, 175-199.

Determinación automatizada de pesticidas en muestras de vino mediante SPE *on-line* con LC-MS/MS

L. Pérez-Mayán¹

M. Ramil¹

R. Cela¹

I. Rodríguez¹

Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatología
Instituto de Investigaciones en Análisis Químicas e Biológicas (IAQBUS)
Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela
l.perez.mayan@usc.es

Palabras clave: Pesticidas, extracción en fase sólida *on-line*, vino.

A presenza de residuos de pesticidas (insecticidas e fungicidas) en vino é un tema moi estudado, e que preocupa a nivel mundial. Porén, non existe unha regulación europea dos límites máximos de residuos (MRLs) para pesticidas en vinos. De todos os xeitos, estase a traballar no control destas substancias e algúns países xa estableceron límites a nivel nacional para pesticidas nesta matriz. Ademais, a crecente produción e demanda de vinos ecolóxicos tamén fai necesario levar a cabo unha análise en profundidade do produto antes de proceder á súa venda.

A cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS) é o protocolo por excelencia para a determinación de fungicidas e insecticidas en vino. Tamén existen outros métodos de extracción, como QuEChERS, extracción en fase sólida (SPE) e extracción líquido-líquido (LLE). Estas preparacións de mostra supoñen un uso moderado de disolventes orgánicos, o uso de adsorbentes cun custo elevado e limitacións á hora de automatizar o proceso.

Por todo isto, neste traballo preséntase un método automatizado de extracción SPE *on-line* e determinación mediante LC-MS/MS, que permite determinar 48 pesticidas (37 fungicidas e 11 insecticidas) en mostras de vino. Unha vez optimizado o proceso, fíxose unha comparación entre o método automatizado proposto e o equivalente *off-line* desenvolvido previamente no laboratorio [1]. Para iso, comparáronse diferentes parámetros que afectan á extracción e determinación, como son os efectos de matriz durante a ionización por electro-spray (ESI) (figura 1), a exactitude e a sensibilidade. Tamén se tiveron en conta os custos do protocolo, a vida útil dos adsorbentes, o efecto do volume de inxección e os límites de cuantificación (LOQs).

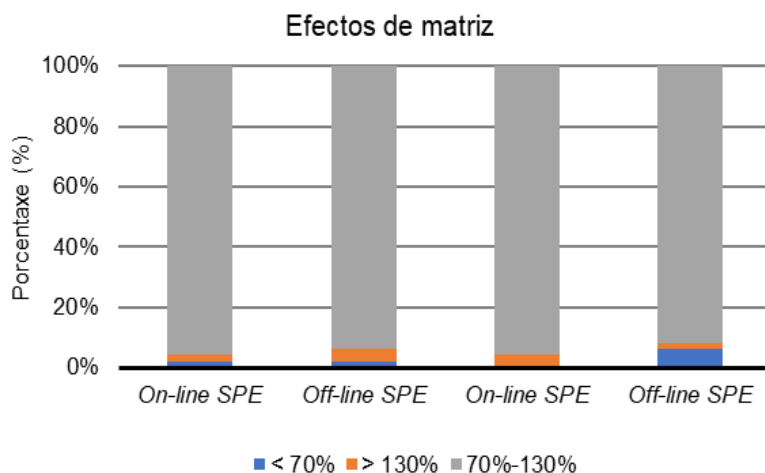


Figura 1. Efectos de matriz para viño branco e tinto, levando a cabo SPE on-line ou off-line.

Finalmente, establecéronse dous protocolos de determinación logo da extracción *on-line*, utilizando 25 ou 3 μL como volume de inxección para viños ecolóxicos ou convencionais, respectivamente. Analizáronse un total de 30 mostras de viño branco e tinto segundo a metodoloxía optimizada, coa presenza por debaixo de 5 ng mL^{-1} de 17 dos analitos, outros 17 compostos por enriba desta concentración e 14 pesticidas non detectados. No referente ás cinco mostras de viño ecolóxico analizadas, dúas delas contiñan residuos de pesticidas en concentracións entre 0.5 e 6 ng mL^{-1} (táboa 1).

Táboa 1. Concentracións dos compostos detectados en mostras de viño tinto coa etiqueta de produción ecolóxica.

Compostos	Códigos dos viños tintos; conc(ng mL^{-1})			
	27	28	29	30
Ametoctradin			0.14	
Benalaxyl			0.28	
Boscalid			6.03	0.26
Carbendazim		0.45	2.50	0.64
Cyprodinil			2.23	0.15
Dimethomorph			1.75	
Fenhexamid			0.86	
Fludioxonil			1.23	
Fluopicolid			0.32	

Compostos	Códigos dos viños tintos; conc(ng mL ⁻¹)			
	27	28	29	30
Imidacloprid			0.72	
Iprovalicarb			0.10	
Mandipropamid			0.12	
Metalaxyl		0.10	5.75	0.56
Metrafenone			0.43	
Myclobutanil		0.20	0.28	0.21
Pyrimethanil			1.00	
Tebuconazole			1.00	0.10
Tebufozide			0.13	
Thiophanate-methyl			0.82	0.16
Triadimenol			0.16	

En resumo, desenvolveuse unha metodoloxía de extracción *on-line* que permite reducir a manipulación, o tempo de extracción e o uso de disolventes orgánicos, ademais de xerar menor cantidade de residuos. O efectos de matriz con esta metodoloxía son mínimos e permite acadar límites de cuantificación dende 2.5 ng mL⁻¹ ata 0.1 ng mL⁻¹, no caso do protocolo con 25 µL de volume de inxección [2].

Agradecementos: L.P.M agradece o contrato predoutoral FPU ó Ministerio de Ciencia e Innovación. Este traballo foi financiado polo goberno de España e pola Xunta de Galicia a través das axudas PGC2018-094613-B-I00 e ED431C 2021/06, ambas cofinanciadas polo programa EU FEDER. Tamén se quere agradecer a Agilent o acceso á instrumentación LC-ESI-MS/MS utilizada para o desenvolvemento deste estudo.

Referencias

- [1] G. Castro, G., L. Pérez-Mayán, T. Rodríguez-Cabo, I. Rodríguez, M. Ramil, R. Cela. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. **2018**, 410, 1139–1150.
- [2] L. Pérez-Mayán, M. Ramil, R. Cela, I. Rodríguez. *Journal of Food Composition and Analysis*. **2021**, 104, 104184. <https://doi.org/10.1016/j.jfca.2021.104184>

Desenvolvemento dunha nova metodoloxía analítica para a cuantificación de contaminantes emerxentes en augas

S. Méndez¹

B. Vázquez¹

R. Montes¹

J.B. Quintana¹

R. Rodil¹

¹Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía
Instituto de Investigación en Análises Químicas e Biolóxicas (IAQBUS)
Universidade de Santiago de Compostela 15782 Santiago de Compostela, España
sandramendez.martinez@usc.es

Palabras chave: Contaminantes emerxentes, cuantificación, cromatografía, espectrometría de masas

O desenvolvemento de novos métodos de análise cada vez máis sensibles nos últimos anos permitiu detectar nas augas un elevado número de compostos, coñecidos globalmente como contaminantes emerxentes (CEs). Co obxecto de obter información sobre os potenciais efectos adversos para a saúde e o ambiente que causan estas substancias [1], é fundamental a detección e, sobre todo, a cuantificación destas en mostras de auga.

Con este fin algúns equipos científicos europeos centráronse en investigar algunhas clases de CEs, e desenvolveron métodos analíticos para determinalos en diferentes matrices ambientais. Así, xorde o proxecto Nor-Water, un programa de cooperación entre España e Portugal que ten como finalidade identificar os principais CEs e as súas fontes nas bacías do norte de Portugal e Galicia, centrándose na presenza destas substancias en augas superficiais.

Neste estudo optimizouse e validouse un método baseado na extracción en fase sólida (SPE) e a determinación mediante cromatografía líquida de alta eficiencia acoplada a espectrometría de masas en tándem (HPLC-MS/MS) para a cuantificación de 52 compostos priorizados en mostras de auga.

Os compostos seleccionáronse, no marco do proxecto Nor-Water, mediante unha estratexia de priorización baseada en criterios de persistencia, mobilidade e toxicidade (PMT) [2] e nos resultados obtidos en estudos de *screening* [3] realizados previamente en mostras de auga de Galicia e do norte de Portugal.

Durante a optimización do método comparáronse diferentes columnas e programas cromatográficos e distintos tipos de adsorbentes para a etapa de preparación de mostra. Como compromiso para poder determinar o maior número de compostos, seleccionáronse os cartuchos Oasis HLB para a SPE e a columna de modo mixto AcclaimTM Trinity P1 [4] para a separación cromatográfica.

O método cromatográfico optimizado presentou unha boa linearidade para todos os compostos ($R^2 > 0,99$) no intervalo entre 0,1 e 100 ng/mL. Tamén presentou unha precisión aceptable (RSD < 20%), repetibilidade e reproducibilidade, estimada a dous niveis de concentración (1 ng/mL e 10 ng/mL).

O método completo de SPE seguido de HPLC-MS/MS validouse obtendo unha exactitude aceptable para un método multi-residuo, con recuperacións superiores ao 60% e límites de detección (LOD) e cuantificación (LOQ) baixos ($1,3 \times 10^{-2}$ -52 ng/L e $4,2 \times 10^{-2}$ -173 ng/L, respectivamente) para a maioría dos compostos en mostras de auga ultra-pura, río, mar e residual (influyente e efluente).

Agradecementos: Os autores agradecen o apoio financeiro fornecido pola Xunta de Galicia (ED431C2021/06) e os fondos FEDER / ERDF. Esta investigación foi cofinanciada polo Fondo Europeo de Desenvolvemento Rexional a través do Programa Interreg V-A España-Portugal (POCTEP) 2014-2020 (ref. 0725_NOR_WATER_1_P). Só reflicte a opinión dos autores; polo tanto, as autoridades do programa non son responsables do uso que se poida facer da información contida nel.

Referencias

- [1] Dulio, V., van Bavel, B., Brorström-Lundén, E., Harmsen, J., Hollender, J., Schlabach, M., Slobodnik, J., Thomas, K., Koschorreck, J. *Environmental sciences Europe*, **2018**, 30(1), 5.
- [2] Arp, H., Brown, T. N., Berger, U., Hale, S. E. *Environmental science. Processes & impacts*, **2017**, 19(7), 939-955.
- [3] Castro, V., Quintana, J.B., Carpinteiro, I., Cobas, J., Carro, N., Cela, R., Rodil, R. *Anal Bioanal Chem*, **2021**, 413, 5607-5618.
- [4] Montes, R., Rodil, R., Cela, R., Quintana, J.B. *Analytical Chemistry*, **2019**, 91(8), 5176-5183.

Preparación de carbóns activados a partir de serraduras de piñeiro para a adsorción de contaminantes de efluentes líquidos

C. Pimentel

Departamento de Enxeñaría Química, Escola Técnica Superior de Enxeñaría
Universidade de Santiago de Compostela, Rúa Lope Gómez de Marzoa s/n
15782 Santiago de Compostela, España
catarinahelenada.silveiramirandaguedes@usc.es

Palabras chave: Carbón activado, adsorción, serraduras de piñeiro

Nas últimas décadas, co rápido desenvolvemento industrial, a contaminación das augas resulta cada vez máis preocupante, pois as augas residuais procedentes de diversas industrias como a téxtil, a alimentaria, a cosmética, da madeira e dos plásticos conteñen diferentes tipos de colorantes sintéticos, a maioría dos cales presentan toxicidade. Polo tanto, a súa eliminación dos efluentes faise absolutamente necesaria.

Xa que logo, volveuse fundamental atopar unha solución eficiente tanto a nivel económico como ambiental para purificar os efluentes líquidos. Documentáronse varios métodos para a eliminación de contaminantes do ambiente, maioritariamente tratamentos biolóxicos, químicos e físicos. Algúns dos métodos máis comúns para a purificación das augas son a filtración, a oxidación, a osmose inversa, a floculación, a separación magnética e a adsorción. [1] A adsorción destaca para a eliminación de contaminantes de efluentes líquidos porque é unha técnica económica, fácil de poñer en práctica, ecolóxica, de baixo risco para a saúde e por tratarse dun proceso non destrutivo. Ademais, se se engaden a esta técnica adsorbentes de fontes económicas e sostibles non se compromete o rendemento do sistema. [2]

Investigáronse moitos adsorbentes, entre os cales o carbón activado, que recibe especial atención en sistemas líquidos debido ás súas propiedades químicas e mecánicas. [1] Non obstante, presenta un custo asociado bastante elevado. Precisamente, este traballo céntrase na preparación de carbóns activados a partir de materiais naturais, amplamente dispoñibles, como é o caso de subprodutos da industria da madeira.

Neste traballo propónse a utilización de biomasa residual procedente da industria da madeira (serraduras de *Pinus Radiata*) para a produción de carbóns activados quimicamente, utilizando KOH ou $ZnCl_2$, para eliminar colorantes de augas residuais. A activación química inclúe dúas etapas, unha inicial, que consiste na carbonización da biomasa en presenza dun gas inerte, seguida da activación do carbón resultante. Para a optimizar as condicións de operación na preparación do carbón activado, analiza-

se o efecto da temperatura de activación, así coma o tipo e cantidade de axente de activación no proceso de adsorción indicado. O estudo da capacidade de adsorción realízase en descontinuo, analizando a influencia de diversas variables de operación como a relación sólido-líquido, o tempo de equilibrio, o pH, a concentración inicial etc., para a súa posterior aplicación en operación continua. Ademais estes resultados son comparados cos obtidos coa biomasa orixinal. Para caracterizar estrutural e morfoloxicamente os materiais utilízanse técnicas como SEM-EDX, determinación da superficie específica aplicando o modelo BET e TGA.

Como pode observarse nos resultados da Táboa 1, as áreas superficiais dos carbóns preparados a partir de serraduras de piñeiro e activados con KOH, tanto a 600°C como a 850°C, determinadas por adsorción de N_2 e de CO_2 , son claramente superiores ás do carbón activado comercial e ao das serraduras sen tratamento.

Táboa 1. Área superficial de carbóns activados preparados a partir de serraduras de piñeiro e activados con KOH, dun carbón activado comercial e de serraduras de piñeiro orixinal

Mostra	$S_{BET} N_2 (m^2 g^{-1})$	$S_{BET} CO_2 (m^2 g^{-1})$
Carbón activado comercial	1059,9	350,9
Serraduras de piñeiro carbonizado e activado con KOH a 850°C	2864,5	677,24
Serraduras de piñeiro carbonizado e activado con KOH a 600°C	2437,2	1354,2
Serraduras de piñeiro	0,362	-

As imaxes SEM (Figura 1) tamén demostraron o aumento tanto no número como no tamaño dos poros cando as serraduras son carbonizadas e activadas quimicamente con KOH.

Con respecto á eliminación de colorantes de augas residuais, as probas cun colorante azul empregado industrialmente para o tinguido de madeira, demostraron que as serraduras de piñeiro natural só son eficientes (100% de eliminación) para concentracións iniciais baixas (5 mg L^{-1}) a pH ácido e doses de adsorbente relativamente altas (2 g L^{-1}). A eficiencia redúcese aproximadamente ao 60% cando a dose de adsorbente baixa a $0,5 \text{ g L}^{-1}$. Para concentracións elevadas (300 mg L^{-1}) non é posible obter a eliminación completa aínda cunha dose de adsorbente de 10 g L^{-1} . Polo que respecta aos carbóns activados, encontrouse que co carbón activado con KOH 1:4 (p/p) a 850°C é posible obter unha porcentaxe de eliminación do 100% a pH natural (5,1) e concentracións iniciais de colorante de 5 a 500 mg L^{-1} con doses de adsorbente de 0,1 a $0,4 \text{ g L}^{-1}$, o cal demostra a significativa mellora do proceso de adsorción coa carbonización/activación da biomasa.

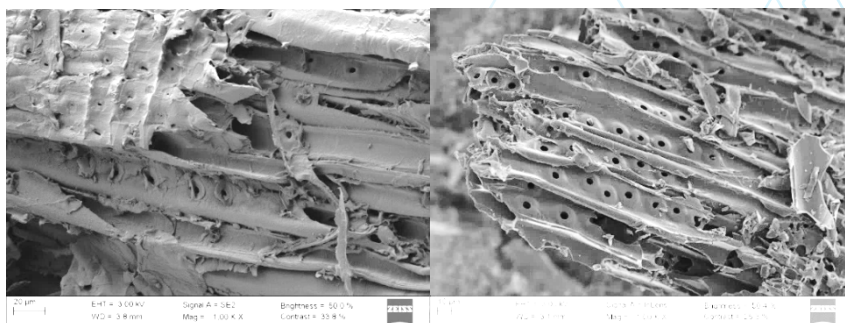


Figura 1. Imaxes SEM de serraduras de piñeiro natural (esquerda) e de carbón activado con KOH 1:4 a 850°C (dereita).

A partir dos estudos de adsorción en descontinuo seleccionaranse aqueles carbóns que presenten as maiores porcentaxes de adsorción para a súa aplicación en operación continua. Ademais, a través de estudos de desorción, estudarase a rexeneración dos carbóns para a súa posterior reutilización. Tamén se prevé o estudo da eliminación de contaminantes de efluentes gasosos como o N_2 e o CO_2 e a eliminación de catións metálicos de augas residuais.

Agradecementos: Ás miñas directoras de tese Julia González Álvarez e María Sonia Freire Leira e ao profesor Diego Gómez Díaz (GI-1612 Intensificación de procesos para un desenvolvemento sostible – PROSUST) pola súa dedicación; sen eles este proxecto non sería posible. Tamén agradezo á Xunta de Galicia a Axuda de Consolidación 2020 GPC (ED431B 2020/039).

Referencias

- [1] R. Chikri, N. Elhadiri, M. Benchanaa, Y. El maguana, *Journal of Chemistry*, **2020**, vol 2020.
- [2] M. S. Reza, C. S. Yun, S. Afroze, N. Radenahmad, M. S. A. Bakar, R. Saidur, J. Taweekun, A. K. Azad, *Arab Journal of Basic and Applied Sciences*, **2020**, 27.1, 208-238.

Síntese e caracterización de compósito de poliuretano e magnetita para hipertermia magnética

Ángela Arnosa¹

Manuel González Gómez¹

Pelayo García Acevedo¹

Yolanda Piñeiro¹

José Rivas¹

¹Departamento de Física Aplicada, Grupo NANOMAG, Instituto de Materiais (iMATUS) da Universidade de Santiago de Compostela (USC)

angela.arnosa@usc.es

Palabras chave: Hipertermia, magnetita, poliuretano

A hipertermia magnética fundaméntase no incremento da temperatura que experimentan as nanopartículas magnéticas (MNPs) cando se someten a un campo magnético alterno, e utilízase como un método de terapia antitumoral que provoca a morte das células tumorais por quencemento [1]. Neste caso, fanse chegar as nanopartículas en disolución ó interior do tumor; porén, existen posibilidades terapéuticas diferentes nas que se pode aproveitar a hipertermia magnética producida por dispositivos implantables constituídos por materiais sólidos dopados con MNPs.

Neste traballo desenvólvese compósitos superparamagnéticos constituídos por unha matriz de poliuretano como materiais biomédicos biocompatibles e implantables con hipertermia magnética. Sintetizáronse varias esponxas de poliuretano con diferentes contidos de nanopartículas magnéticas (Figura 1) a través dun procedemento de química húmida. O material resultante pode cortarse facilmente en anacos de tamaños diversos que se adapten á aplicación requirida.



Figura 1. Compósitos de poliuretano con diferentes nanopartículas magnéticas na súa composición.

As propiedades fisicoquímicas dos compósitos caracterizáronse con diferentes técnicas: microscopía electrónica de varrido (SEM), ICP-OES, magnetometría e hipertermia magnética. O comportamento magnético das esponxas pode apreciarse a simple vista achegando un imán (Figura 2a) e estudouse por magnetometría de mostra vibrante (Figura 2b).

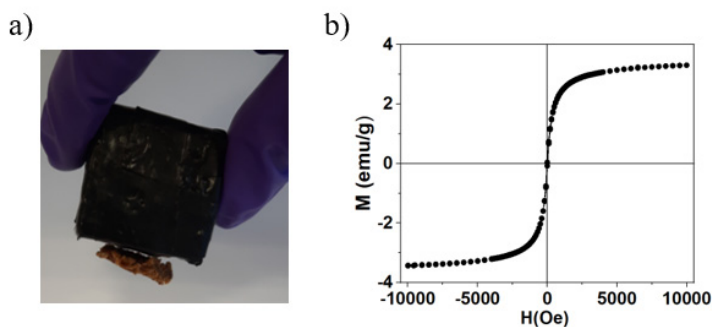


Figura 2. a) Compósito magnético atraído por un imán.
b) Comportamento superparamagnético do compósito.

Agradecementos: Este traballo foi financiado parcialmente mediante o Programa de axudas de apoio á etapa predoutoral 2020 da Xunta de Galicia, Grupos de Referencia Competitiva GRC2021 e o Programa Europeo Horizon2020, (proxectos PANA, Call H2020-NMP-2015-two-stage, Grant 686009, e BOW, FETPROACT-EIC-05-2019, Grant 952183).

Referencias

- [1] Medahoui, A. Meffre, J. Carrey, S. Lachaize, L. Lacroix, M. Gougeon, B. Chaudret, M. Respaud, *Advanced Functional Materials*, **2011**, 21, 4573-4581.

Un complexo dinuclear de disprosio con ponte fluoruro como imán molecular

C. González-Barreira¹

M. Fondo¹

J. Corredoira-Vázquez¹

A. M. García-Deibe¹

J. Sanmartín Matalobos¹

¹Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química
Universidade de Santiago de Compostela, Campus Vida
15782 Santiago de Compostela, España
cristina.gonzalez.barreira@rai.usc.es

Palabras chave: Imán unimolecular, disprosio, ligando fluoruro lineal.

O campo do magnetismo molecular é unha área en crecente expansión, cuxo obxectivo principal é o deseño de imáns moleculares con propiedades melloradas. O fundamental motor no estudo destes imáns é a súa natureza cuántica, o que pode permitir que almacenen a información en cantidades e a velocidades sen precedentes. Dentro deste campo de traballo, a investigación no eido das moléculas imán (SMM) de lantanoides (Ln) incrementouse notablemente dende que Rinehart e Long publicaron o seu modelo electrostático [1], no que se establece que a xeometría arredor dos ións Ln^{3+} pode determinar a anisotropía do sistema, e con iso mellorar as propiedades magnéticas dos SMM. Así, para ións prolato, como Dy^{III} , a anisotropía será máxima cando os ligandos impoñan unha xeometría axial. Unha forma de asegurar a axialidade nestes complexos é o uso selectivo de ligandos aniónicos con dadores duros, como o fluoruro. A idea non é nova, pero a síntese de fluoruro-complexos de lantanoides é unha ardua tarefa, debido á tendencia deste ligando a formar LnF_3 [2], compostos estables e altamente insolubles. Polo tanto, o número de complexos metálicos de lantanoides con ligando fluoruro caracterizados magneticamente é relativamente pequeno [3]. Nesta comunicación descríbese un complexo dinuclear de disprosio con ponte fluoruro lineal, o cal se comporta como se fose un imán molecular en presenza dun campo magnético externo.

O novo composto $[\text{Bu}_4\text{N}]\{\text{[Dy(3NO}_2\text{,5Br-H}_3\text{L}^{1,1,4})]_2(\mu\text{-F})\}\cdot 5\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_5$ ($1\cdot 5\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_5$) obtense a partir do complexo $[\text{Dy(3NO}_2\text{,5BrH}_3\text{L}^{1,1,4})(\text{H}_2\text{O})]$, anteriormente descrito [4], tal e como se resume na figura 1. $1\cdot 5\text{CH}_3\text{C}_6\text{H}_5$, que perde o solvato ao ser secado, é un composto iónico, e a súa caracterización por difracción de raios X de monocristal amosa que o aniión $\{\text{[Dy(3NO}_2\text{,5Br-H}_3\text{L}^{1,1,4})]_2(\mu\text{-F})\}^-$ pode entenderse como dous

bloques mononucleares $[\text{Dy}(\text{3NO}_2\text{,5Br-H}_3\text{L}^{1,1,4})]$ unidos a través dun fluoruro ponte. Nestes bloques, o ligando $\text{3NO}_2\text{,5Br-H}_3\text{L}^{1,1,4}$ compórtase como trianiónico e heptadentado, o cal, unido ao dador fluoruro ponte, leva a que os ións Dy^{3+} acaden un índice de coordinación 8, cunha xeometría altamente distorsionada, entre dodecaedro triangular e prisma trigonal biaumentado, segundo o programa SHAPE [5]. Ademais, a completa caracterización magnética revela que o túnel cuántico evita a observación da relaxación lenta da magnetización en ausencia de campo magnético. Porén, baixo un campo magnético externo de 600 Oe, **1** amosa unha barreira enerxética efectiva para a inversión do espín de 27.5 K (19.1 cm^{-1}).

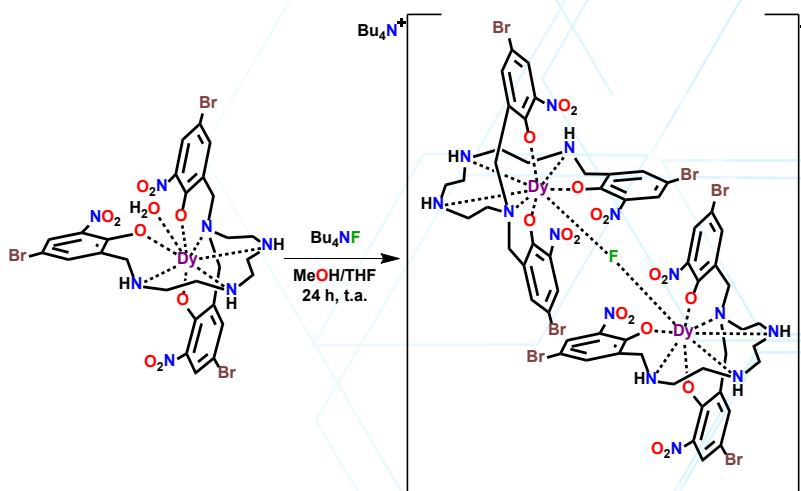


Figura 1. Esquema de obtención de $[\text{Bu}_4\text{N}][\{\text{Dy}(\text{3NO}_2\text{,5Br-H}_3\text{L}^{1,1,4})\}_2(\mu\text{-F})]$

Agradecementos: Este traballo foi financiado polo Ministerio de Innovación, Ciencia e Universidades de España (PGC2018-102052-B-C21) e pola Xunta de Galicia.

Referencias

- [1] J. D. Rinehart, J. R. Long, *Chem. Sci.*, **2011**, 2, 2078-2085.
- [2] K. S. Pedersen, M. A. Sørensen, J. Bendix, *Coord. Chem. Rev.*, **2015**, 299, 1-21.
- [3] (a) Q. Zhou, F. Yang, D. Liu, Y. Peng, G. Li, Z. Shi, S. Feng, *Inorg. Chem.*, **2012**, 51, 7529-7536; (b) G. Brunet, F. Habib, I. Korobkov, M. Murugesu, *Inorg. Chem.*, **2015**, 54, 6195-6202; (c) L. Norel, L. E. Darago, B. L. Guennic, K. Chakarawet, M. I. Gonzalez, J. H. Olshansky, S. Rigaut, J. R. Long, *Angew. Chem., Int. Ed.*, **2018**, 57, 1933-1938; (d) Y. Huo, Y.-C. Chen, S.-G. Wu, J.-L. Liu, J.-H. Jia, W.-B. Chen, B.-L. Wang, Y.-Q. Zhang, M.-L. Tong, *Inorg.*

- Chem.*, **2019**, *58*, 1301-1308; (e) A. B. Canaj, M. K. Singh, E. R. Marti, M. Damjanović, C. Wilson, O. Céspedes, W. Wernsdorfer, G. Rajaraman, M. Murrie, *Chem. Commun.*, **2019**, *55*, 5950-5953; (f) B-K. Ling, Y-Q. Zhai, J. Han, T. Han, Y-Z. Zheng, *Dalton Trans.*, **2020**, *49*, 6969-6973; (g) M. Hojorat, H. A. Sabea, L. Norel, K. Bernot, T. Roisnel, F. Gendron, B. L. Guennic, E. Trzop, E. Collet, J. R. Long, S. Rigaut, *J. Am. Chem. Soc.*, **2020**, *142*, 931-936.
- [4] M. Fondo, J. Corredoira-Vázquez, A. M. García-Deibe, J. Sanmartín-Matalobos, D. Reta, E. Colacio, *Dalton Trans.*, **2021**, artigo avanzado, DOI: 10.1039/D1DT02756E.
- [5] (a) M. Llunell, D. Casanova, J. Cirera, J. M. Bofill, P. Alemany, S. Alvarez, M. Pinsky, D. D. Avnir, SHAPE v1.1b, Barcelona, **2005**; (b) A. Ruiz-Martínez, D. Casanova, S. Alvarez, *Chem. Eur. J.*, **2008**, *14*, 1291-1303; (c) M. Llunell, D. Casanova, J. Cirera, P. Alemany, S. Alvarez, SHAPE: Program for the stereochemical analysis of molecular fragments by means of continuous shape measures and associated tools, University of Barcelona, Barcelona, Spain, **2010**.

Nanocarbóns microporosos funcionalizados para a eliminación de contaminantes industriais

L. Domínguez-Ramos^{1,2,3}

¹Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS)

²Departamento de Enxeñaría Química, Escola Técnica Superior de Enxeñaría

³Departamento de Química Física, Facultade de Química

Universidade de Santiago de Compostela

lidia.dominguez2@usc.es

Palabras chave: Nanocarbóns porosos funcionalizados, adsorción, poliacrilonitrilo

Os materiais de carbono son omnipresentes nas nosas vidas. Estes materiais presentan unha estabilidade química e térmica alta, ademais de posuíren unha superficie axustable e múltiples formas estruturais a escala atómica e nanoescala que definen unha gama ampla de propiedades fisicoquímicas e lles permiten satisfacer diversas aplicacións. Sen dúbida, a presenza de poros de diferentes formas e tamaños inflúe notablemente nas propiedades e funcións dos carbóns, reducindo a súa densidade aparente e expandindo a súa área superficial. O concepto de estruturación xerárquica, con tamaños de poro dende os microporos cun tamaño menores de 2 nm, aos mesoporos 2-50 nm e aos macroporos maiores de 50 nm, móstrase de forma equilibrada nestes materiais. Os macroporos son literalmente unha estrada de transporte, mentres que os micro e mesoporos proporcionan unha gran superficie con sitios activos para reaccións heteroxéneas. Actualmente, os nanocarbóns porosos empréganse amplamente como adsorbentes, soportes e incluso catalizadores libres de metais para abordar desafíos globais urxentes, que inclúen, entre outros, problemas enerxéticos e ambientais. Ademais, grazas ás súas propiedades electrónicas, como a alta condutividade, despertaron o interese en aplicacións como células solares, transistores, supercondensadores, electrodos e baterías [1].

Cómpre subliñar o efecto da dopaxe con heteroátomos, como por exemplo nitróxeno (N), fósforo (P), boro (B), xofre (S) e selenio (Se). Este tipo de átomos poden ser incorporados sós ou conxuntamente na estrutura interna do carbón mediante a carbonización dun precursor rico en heteroátomos ou cunha modificación química posterior dos carbóns porosos. A introdución destes elementos nos carbóns proporciónalles propiedades fisicoquímicas fascinantes grazas á súa electronegatividade, á densidade de carga e ao tamaño dos heteroátomos. Resulta de consideración o potencial dos materiais

carbonosos dopados con heteroátomos como catalizadores libres que poden substituír os custosos catalizadores formados por metais nobres ou de transición, debido á súa estabilidade en condicións extremas. Por outro lado, o uso de nanocarbóns porosos é interesante na eliminación ou separación de gases, como, por exemplo, no tratamento do biogás para obter biometano, onde hai que separar o metano (CH_4) do dióxido de carbono (CO_2) e do sulfuro de hidróxeno (H_2S); os nanocarbóns porosos son moi selectivos do CO_2 en presenza do CH_4 grazas aos microporos e aos grupos superficiais ricos en N [2].

Dentro deste proxecto de tese estúdase a fabricación de diversos nanocarbóns microporosos funcionalizados con grupos superficiais de nitróxeno e xofre derivados de copolímeros de bloque (CB). Os CB son un tipo de polímeros que consisten en dous ou máis fragmentos poliméricos homoxéneos (bloques) unidos por enlaces covalentes. Estes bloques son inmiscibles polo que xeran diferentes estruturas coa modificación do peso molecular e composición de cada un, como configuracións con fases esféricas, cilíndricas, xiroides descontinuas ou laminares. Neste traballo estase a fabricar carbóns que proveñen de copolímeros de bloque como o poliacrilonitrilo-*b*-polimetilmetacrilato (PAN-*b*-PMMA) en diferentes proporcións. O PAN-*b*-PMMA constitúe un modelo para a fabricación do carbón con organización xerárquica, de forma que no proceso de carbonización a alta temperatura o PAN sofre un proceso de ciclación que permite conservar a estrutura do CB mentres o PMMA pérdese formando os poros do carbón. Desta maneira o ideal sería encontrar unha combinación onde o PAN se atope en maior proporción que o PMMA, conformando a matriz para que na carbonización se obteñan poros esféricos ou cilíndricos (figura 1). A caracterización destes carbóns de CB como precursor mediante unha análise BET de adsorción de gases (CO_2 ou N_2) amosa que estes materiais son moi microporosos e mesmo chegan á ultramicroporosidade, o que é moi positivo de cara á adsorción de gases como o CO_2 .

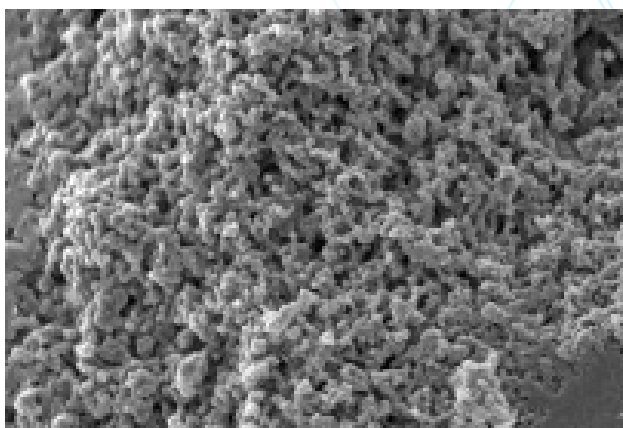


Figura 1. Imaxe SEM dun carbón activado de PAN-*b*-PMMA.

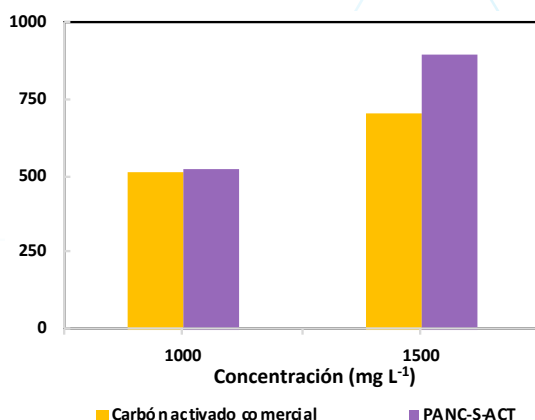


Figura 2. Adsorción de colorante vermello industrial por un carbón sintético de PAN, activado e dopado (PAN-S-ACT) e un carbón activado comercial.

En canto á súa aplicación en medios acuosos, realizouse un estudo previo onde se analizaron diferentes procesos de fabricación de carbóns a partir de poliacrilonitrilo e empregáronse na eliminación de colorantes industriais. Fabricáronse carbóns sen activar e activados empregando hidróxido potásico (KOH) como axente activante e observouse que esta activación aumenta considerablemente a superficie específica ($\approx 3000 \text{ m}^2 \text{ g}^{-1}$) destes materiais, pero reduce os grupos funcionais que se atopan na súa superficie ademais de aumentaren o tamaño dos poros (meso e macroporos). Como se amosa na figura 2, o carbón PAN-S-ACT, despois de 24h de axitación cunha disolución de colorante vermello industrial con concentración inicial de 1500 ppm, ten unha capacidade de adsorción de case 900 mg g^{-1} (99% de eliminación), mentres que o carbón comercial sáturase a esta concentración cunha capacidade de adsorción de $\approx 500 \text{ mg g}^{-1}$ (75%), o cal se debe á maior superficie específica do PAN-S-ACT en comparación co carbón comercial.

Actualmente estase a estudar mediante un deseño experimental o efecto de diferentes variables que afectan á formación dos carbóns, como é a cantidade de axente activante, a temperatura de fabricación e a cantidade de xofre, sobre a capacidade de adsorción de gases e colorantes industriais. Por outro lado, debido á gran cantidade de artigos que evidencian as grandes calidades do carbón en aplicacións tecnolóxicas, comezouse a caracterizar electroquimicamente os carbóns sintetizados. Finalmente, de cara ao futuro, estudarase a introdución de metais na matriz dos nanocarbóns e a súa utilización na eliminación de catións metálicos de medios acuosos.

Agradecementos: Á Axencia Estatal de Investigación (Generación de conocimiento, PGC2018-101047), aos directores de tese Julia González Álvarez e Massimo Lazzari, así como aos profesores María Sonia Freire Leira e Diego Gómez Díaz, pola súa dedicación a este proxecto.

Referencias

- [1] M. Kopec, M. Lamson, R. Yuan, C. Tang, M. Kruck, M. Zhong, K. Matyjaszewski, T. Kowalewski, *Progress in Polymer Science*, **2019**, 92, 89-134.
- [2] M.C. Castrillon, K.O. Moura, C.A. Alves, M. Bastos-Neto, D.C. S. Azevedo, J. Hofmann, J. Mollmer, W.D. Einicke, R. Glaser, *Energy Fuels*, **2016**, 30, 9596-9604.

Preparación de óxidos semicondutores como soportes de clústeres cuánticos atómicos

María Moreno Pérez¹
Carlos Vázquez Vázquez¹
David Buceta¹

¹Laboratorio de Magnetismo e Nanotecnoloxía (NANOMAG)
Departamento de Química Física, Universidade de Santiago de Compostela
Santiago de Compostela, España
maría.moreno.perez@rai.usc.es

Palabras chave: Semiconductor, clúster cuántico atómico, fotocatalíse

No presente proxecto, sintetizáronse e caracterizáronse materiais híbridos $\text{SnO}_2/\text{TiO}_2$ para utilizar en reaccións fotocatalíticas como substratos para os clústeres cuánticos atómicos (AQC).

Os métodos de síntese baseáronse en aproximacións bottom-up en fase líquida, como o método sol-xel ou a precipitación química, os cales son fáciles de escalar [1]. Ademais, os materiais foron caracterizados físico-quimicamente por técnicas como difracción de raios X en po (DRX), espectroscopias FTIR-ATR e Raman, análise elemental (CHNS) e microscopia electrónica de transmisión (TEM), co fin de determinar a estrutura cristalina, a morfoloxía e a composición química destes materiais, é dicir, como están os elementos distribuídos nos materiais híbridos e que está adherido e protexendo a superficie das nanopartículas), así como co fin de predicir as súas propiedades fotocatalíticas mediante espectroscopia de reflectancia difusa e isothermas de adsorción BET.

Un segundo obxectivo deste proxecto foi a utilización destas nanopartículas semicondutoras como substrato para a deposición de AQC mediante impregnación seca ou *incipient wetness impregnation*. Posteriormente, estudouse por espectroscopia UV-Vis como o proceso de deposición favorece as propiedades ópticas dos materiais, incrementando a absorción de luz visible mediante a aparición de *midgaps*, o que fai estes materiais moi interesantes para reaccións fotocatalíticas [2]. Para isto, leváronse a cabo estudos preliminares de actividade fotocatalítica coa degradación dun colorante en auga, empregando un simulador solar.

Agradecementos: Esta investigación foi financiada parcialmente polo proxecto HP-NANOBIO [PID2019-111163RB-I00] concedido polo Ministerio de Ciencia e Innovación (España). Os autores pertencen ao Grupo de Referencia Competitivo ED432C 2021/16, co-financiado por fondos FEDER (UE). Os autores tamén agradecen o uso das instalacións científicas do RIAIDT-USC.

Referencias

- [1] Cargnello, M.; Gordon, T. R.; Murray, C. B. *Chem. Rev.* **2014**, *114*, 19, 9319-9345.
- [2] De Lara-Castells, M. P.; Hauser, A. W.; Ramallo-López, J. M.; Buceta, D.; Giovanetti, L. J.; López-Quintela, M. A.; Requejo, F. G. *J. Mater. Chem. A.* **2019**, *7*, 7489-7500.

Síntese de paladaciclos mono e dinucleares derivados de ligandos TSC: Estudo de reactividade fronte a difosfinas de cadea curta

Sara Bermúdez-Fernández

J. M. Vila

Dpto. Química Inorgánica, Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela

E-15782 Santiago de Compostela, España

sarabegona.bermudez@rai.usc.es

Palabras chave Paladaciclos, tiosemicarbazona, difosfina

Os compostos organometálicos derivados de paladio posúen unha xeometría plano cadrada cando o centro metálico se atopa en estado de oxidación 2+. Esta peculiaridade propiciou o estudo da estrutura e reactividade dun amplo espectro de arquitecturas moleculares, co que se conseguiron resultados de impacto alto en distintas vertentes como son a química médica, na que se atopan exemplos de actualidade patentados con aplicación como fármacos en terapia contra o cancro[1], ou en síntese, como substancias con actividade catalítica, entre as que destacan as reaccións de axuste cruzado C-C.[2]

Os argumentos anteriores xustifican o interese do equipo no deseño e síntese de compostos ciclometalados derivados de metais do grupo 10 con ligandos ricos en átomos dadores como son as bases de Schiff [3], os iminofosforanos [4] e as tiosemicarbazonas [5]. Estas últimas, á súa vez, dependendo das condicións de traballo, poden xerar compostos que amosan distintos modos de coordinación do ligando co centro metálico.

Anteriormente o grupo esclarecera a reactividade de tiosemicarbazonas *para*-substituídas fronte a diversas difosfinas en ausencia de axentes oxidantes [6]. Para ampliar o estudo nesta liña de investigación propónse a posibilidade de partir de compostos con maior impedimento estérico, co fin de coñecer as similitudes estruturais así como as diferenzas cos datos anteriormente colleitados.

Con este obxectivo propónse unha estratexia sintética baseada na reactividade descrita na bibliografía, que procura resultados similares para os compostos tetranucleares de paladio nos que o ligando tiosemicarbazona (TSC) amosa un alto grao de interacción cos centros metálicos de Pd (II) a través dos átomos de carbono, nitróxeno e xofre, caracterizándose, polo tanto, como un ligando tridentado.

Para obter estes compostos levase a cabo inicialmente a síntese dos ligandos mediante unha reacción de condensación entre unha cetona e unha tiosemicarbazida, coa que se obteñen os ligandos tiosemicarbazona 2,3,4-trimetoxi substituída correspondentes.

En canto ó estudo dos compostos ciclopaladados tetranucleares fronte a distintas difosfinas, abordamos os casos concretos da reactividade da dppm, bis(difenilfosfina) metano e da dppma, bis(difenilfosfina)metilamina en relación 1:4, e obtemos distintos resultados estruturais en función da difosfina. Así, xérase o composto mononuclear de paladio coa difosfina coordinada como coligando monodentado no caso dos produtos de reacción constituídos coa dppm, mentres que, para o caso da difosfina dppma, obtivéronse os compostos dinucleares de paladio no que a difosfina actúa como bidentada ponte entre os distintos centros metálicos.

Todos os compostos son caracterizados mediante o emprego das técnicas de análise elemental, espectroscopia infravermella, espectroscopia de resonancia magnética nuclear (RMN) de protón e fósforo, e difracción de raios X, segundo sexa o caso.

Agradecementos: Os autores agradecen o financiamento proporcionado pola Xunta de Galicia (Galicia, España) e a os Grupos de Referencia Competitivos GRC2019/14

Referencias

- [1] M. Crespo, J. *Organomet. Chem.* **2019**, 879, 15.
- [2] Biffis, P. Centomo, A. Del Zotto, M. Zecca, *Chem. Rev.* (Washington, DC, U. S.) **2018**, 118, 2249.
- [3] L. Naya, D. Vazquez-Garcia, A. Fernandez, M. Lopez-Torres, I. Marcos, O. A. Lenis, M. T. Pereira, J. M. Vila, J. J. Fernandez, *J. Organomet. Chem.* **2014**, 772-773, 192.
- [4] Fernandez-Figueiras, F. Lucio-Martinez, P. Munin-Cruz, P. Polo-Ces, F. Reigosa, H. Adams, M. T. Pereira, J. M. Vila, *Dalton Trans.* **2018**, 47, 15801.
- [5] J. Martinez, E. M. Cabaleiro-Lago, J. M. Ortigueira, M. T. Pereira, P. Frieiro, F. Lucio, J. M. Vila, *Inorg. Chim. Acta*, **2016**, 449, 20.
- [6] J. Martinez, M. T. Pereira, J. M. Ortigueira, B. Bermudez, J. M. Antelo, A. Fernandez, J. M. Vila, *Polyhedron* **2012**, 31, 217.

Paladaciclos como precursores de metaloligandos funcionalizados

Basma Raad Shakir Aljanabi
Juan M. Ortigueira, José M. Vila

Dpto. Química Inorgánica, Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela,
E-15782 Santiago de Compostela, España
basma.raad@usc.es

Palabras chave: Paladaciclos, base de Schiff, fosfina

A síntese de compostos ciclometalados[1] é unha área de investigación química en constante expansión. Os seus continuos desenvolvementos, así como as súas aplicacións ao longo dos anos, rexistráronse en numerosos artigos e revisións; tal é o caso do seu uso como catalizadores activos[2], como intermedios na síntese de novos compostos organometálicos e orgánicos[3] na resolución de mesturas racémicas nos correspondentes compoñentes puros opticamente activos[4], no deseño de complexos con prometedoras propiedades fotoquímicas e electroquímicas[5] e actividade antitumoral específica fronte a varias formas de cancro. [6]

Os compostos ciclometalados implican a formación de ligazóns s M- C e a coordinación adicional do átomo metálico cun átomo doante do ligando adecuado. O átomo doante, así como o metal e o tamaño do anel do quelato, serven de base para a súa clasificación; os exemplos máis estudados son, con moito, os paladaciclos de cinco membros que conteñen ligazóns Pd- N e C(fenilo)- Pd.

As bases de Schiff potencialmente tetradentadas derivadas do 1,4-(COH)₂C₆H₄ (tereftalaldehído) e do 1,3-(COH)₂C₆H₄ (isofalaldehído) dan lugar a diferentes produtos. Así, a reacción de 1,4-(CyN=CH)₂C₆H₄ con acetato de paladio(II) en ácido acético glacial proporciona o composto monociclometalado no que a natureza aceda do disolvente promove a hidrólise dunha das dobres ligazóns C= N. O segundo grupo C= N parece estar protexido contra a hidrólise debido á coordinación intramolecular co átomo de paladio. Tendo isto en conta, parece razoable pensar que a apertura do anel ciclometalado debería facer que o segundo grupo imina fose susceptible de hidrólise.

Consecuentemente, a reacción do complexo dinuclear de paladio con ligandos cloruro ponte con fosfinas monodentadas en relación 1:4 orixina compostos cun grupo formilo libre e un grupo C= N non coordinado. Posteriormente a reacción con ácido nas condicións apropiadas conduce a especies con dous grupos formilo sobre o anel metalado.

Todos os compostos que se preparen serán caracterizados mediante o emprego das técnicas de análise elemental, espectroscopia infravermella, espectroscopia de resonancia magnética nuclear (RMN) de protón e fósforo, e difracción de raios X, segundo sexa o caso.

Agradecementos: Os autores agradecen o financiamento fornecido pola Xunta de Galicia (Galicia, España) e aos Grupos de Referencia Competitivos GRC2019/14

Referencias

- [1] I. Omae, *Organometallic Intramolecular-Coordination Compounds*, in *Journal of Organometallic Chemistry Library*, Elsevier, Amsterdam, **1986**.
- [2] J. Dupont, M. Pfeffer, J. Spencer, *Eur. J. Inorg. Chem.* **2001**, 1917.
- [3] A.D. Ryabov, *Synthesis* **1985**, 3, 233.
- [4] S.B. Wild, *Coord. Chem. Rev.* **1997**, 166, 291-311.
- [5] A. von Zelewski, P. Belser, P. Hayos, R. Dux, X. Hua, A. Suckling and H. Stoeckli-Evans, *Coord. Chem. Rev.* **1994**, 132, 75.
- [6] C. Navarro-Ranninger, I. Lopez-Solera, V.M. Gonzalez, J.M. Perez, A. Alvarez-Valdes, A. Martin, P. Raithby, J.R. Masaguer, C. Alonso, *Inorg. Chem.* **1996**, 35, 5181.

Novos metaloencimas artificiais unidos a microesferas proteicas como reactores bioortogonais

M. Rodríguez-Romero^{1,2,*}

M. Tomás-Gamasa¹

N. Barreiro-Piñeiro²

J. M. Martínez-Costas²

J. L. Mascareñas¹

¹ Grupo MetBioCat, CiQUS

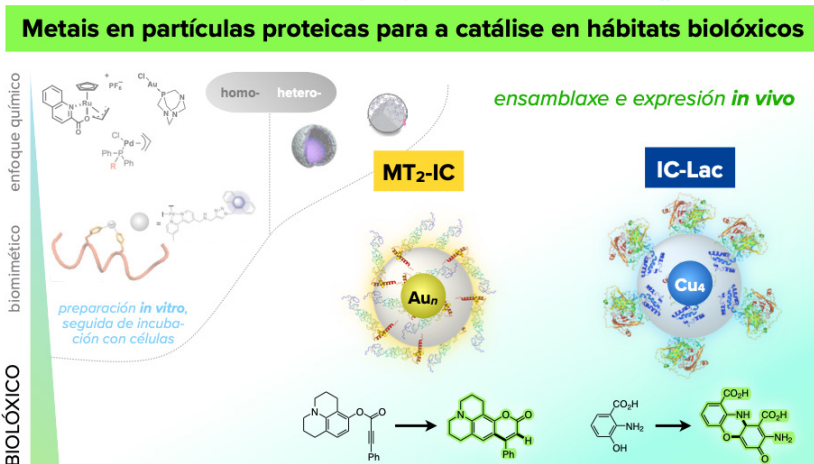
(Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares)
Universidade de Santiago de Compostela. Rúa Jenaro de la Fuente s/n
15705 Santiago de Compostela (España)

² Grupo de Viroloxía Molecular, CiQUS

(Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares)
Universidade de Santiago de Compostela. Rúa Jenaro de la Fuente s/n
15705 Santiago de Compostela (España)

*manuel.rodriguez.romero@rai.usc.es

Palabras chave: Química biolóxica, metaloencimas, catálise bioortogonal.



Neste traballo adoptouse un enfoque transversal baseado nas liñas de traballo desenvolvidas en cadanseu grupo de investigación: deste xeito, aplicouse a metodoloxía

IC-Tagging, evolucionada mediante enxeñaría xenética a partir do estudo dun virus aviar, para así desenvolver unha nova plataforma catalítica capaz de realizar transformacións bioortogonais, cuestión na que se está a traballar intensamente no campo da química biolóxica.

A metodoloxía *IC-Tagging* permite a encapsulación de case calquera proteína de interese, o que permite simplificar a purificación destas ao tempo que estabiliza as súas propiedades [1]. Esta metodoloxía está baseada na proteína μ NS-Mi, que por si soa forma estruturas esféricas nas células bacterianas (nanoesferas, NS) ou eucariotas (microesferas, MS) doadamente purificables, e na xeración de proteínas de fusión cunha etiqueta peptídica (denominada IC), que determina a inclusión nas devanditas esferas. Esta metodoloxía permitiu previamente a obtención de proteínas difíciles de expresar e incluso se aplicou na produción de vacinas [2] e encimas inmovilizados [3].

O enfoque bioortogonal na química biolóxica busca o deseño de reaccións *in cellulo* que non per-turban o metabolismo e a viabilidade celular, ao tempo que se aproveita o ambiente intracelular para obter produtos de valor [4]. Este enfoque foi xa utilizado no desenvolvemento de diversos tipos de catalizadores, desde complexos discretos [5] até mini-proteínas [6] e cápsulas/MOFs.

A sinerxía entre ambos os conceptos permite o deseño de catalizadores artificiais híbridos —mediante o uso de técnicas de ADN recombinante— que constan de novos encimas (catalizadores biolóxicos) confinados ás esferas, en lugar de distribuírense libremente no interior celular como no caso dos catalizadores químicos clásicos. Escoléronse dúas proteínas para esta fin: a metalotioneína, pola súa capacidade de unir e detoxificar metais esóxenos como o ouro [7], e a lacase, cuproencima de tipo oxidase de fungos e bacterias [8].

Após a construción dos correspondentes vectores de expresión eucariota, a selección e síntese de substratos, e a preparación de proteínas purificadas e células para ensaios químicos *in vitro* e *in cellulo*, respectivamente, puido establecerse que estes novos metaloencimas demostraron ser un sistema efectivo *in vitro* e *in vivo* (segundo os resultados preliminares) para a catálise. Concretamente, o encima artificial baseado en ouro (bis(metalotioneína)-IC) complexado a ouro e encapsulado en nanosferas de μ NS-Mi foi válido para a catálise da reacción de anelación cumarínica por hidro-arilación de alquino, inicialmente desenvolvido en catalizadores discretos de ouro(I) bioortogonais. Así mesmo, observouse en resultados preliminares *in vitro* que o cuproencima IC-lacase é outra plataforma catalítica válida, neste caso para o acoplamento oxidativo de substratos aromáticos que conteñen grupos hidroxilo e amina.

Agradecementos: Este traballo recibiu apoio financeiro de bolsas Españolas (PID2019-108624RB-I00, RTI 2018-093813-J-I00 e rede ORFEO-CINQA CTQ2016-81797-REDC), da Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria (2015-CP082, ED431C-2017/19 e da acreditación 2019-2022 de

Centro Singular de Investigación de Galicia, ED431G 2019/03), da Unión Europea (FEDER correspondente ao marco financeiro plurianual 2014-2020), e o European Research Council (Advanced Grant nº 340055). Os autores agradecen o apoio técnico prestado polo persoal xeral do CiQUS, en especial, Rebeca Menaya, e da RIAIDT, concretamente para as análises de ICP (Verónica Piñeiro, Unidade de Lugo), así como da unidade de análise MALDI-TOF da Universidade de Vigo (Manuel Marcos). O autor principal recibiu apoio económico dunha bolsa de colaboración USC-Banco Santander.

Referencias

- [1] Brandariz-Núñez, A.; Menaya-Vargas, R.; Benavente, J.; Martínez-Costas, J. *PLoS ONE*, **2010**, *5*, e13961.
- [2] Barreiro-Piñeiro, N.; Lostalé-Seijo, I.; Varela-Calviño, R.; Benavente, J.; Martínez-Costas, J., *Scientific Reports* **2018**, *8*, 16286.
- [3] Pose-Boirazian, T.; Eibes, G.; Barreiro-Piñeiro, N.; Díaz-Jullien, C.; Lema, J.; Martínez-Costas, J. *Scientific Reports*, **2021**, *11*, 2802.
- [4] Prescher, J.; Bertozzi, C. *Nature Chemical Biology*, **2005**, *1*, 13-21.
- [5] Vidal, C.; Tomás-Gamasa, M.; Destito, P.; López, F.; Mascareñas, J. *Nature Communications*, **2018**, *9*, 1913.
- [6] Learte-Aymamí, S.; Vidal, C.; Gutiérrez-González, A.; Mascareñas, J. *Angewandte Chemie International Edition*, **2020**, *59*, 9149-9154.
- [7] Capdevila, M.; Bofill, R.; Palacios, Ò.; Atrian, S. *Coordination Chemistry Reviews*, **2012**, *256*, 46-62.
- [8] Witayakran, S.; Ragauskas, A. *Advanced Synthesis & Catalysis*, **2009**, *351*, 1187-1209.

Ás portas da célula coa dinámica molecular

A. Blanco-González¹

R. García-Fandiño¹

A. Piñeiro²

¹CiQUS, R/ Jenaro de la Fuente, s/n, Campus Vida

Universidade de Santiago de Compostela

15782, Santiago de Compostela, España.

²Fac. de Física, R/ Xosé María Suárez Núñez, s/n, Campus Vida

Universidade de Santiago de Compostela

15782, Santiago de Compostela, España

Palabras chave: Simulación computacional, dinámica molecular, membranas lipídicas.

De xeito clásico, o estudo da interacción entre moléculas centrouse en técnicas experimentais e empíricas que permitiron acadar un profundo nivel de coñecemento e detalle sobre a materia e a radiación nun amplo abano de escalas. Coa aparición da computación a mediados do século XX, abriuse unha nova porta para o estudo e caracterización físico-química dos materiais dende un punto de vista semi-empírico e teórico. Malia que a posibilidade de realizar estes cálculos fora xa predita con anterioridade á aparición do primeiro ordenador, foi a chegada destes a que permitiu realizalos con velocidade e precisión abundas como para converterse nunha técnica rendible e xeneralizada.

Así pois, no noso grupo de investigación aplicamos distintas técnicas de simulación centradas na dinámica molecular[1] para estudar materiais orgánicos dende distintas perspectivas e contextos. A dinámica molecular é unha técnica que permite simular un amplo rango de materiais valéndose da física clásica ou newtoniana, que fornece información a niveis de resolución atómica ou próxima a ela, e que resolve a evolución dos sistemas no tempo. Esta técnica permite obter datos moi valiosos que a día de hoxe non son facilmente accesibles con aproximacións empíricas, como información detallada a nivel molecular da interacción dun fármaco cunha ciclodextrina[2], permeabilidade á auga dun nanotubo peptídico inserido nunha membrana celular[3] ou obtención de marcadores dinámicos dunha colección de membranas lipídicas en función da súa composición[4].

Uns dos últimos avances feitos no grupo radica no estudo do comportamento de membranas lipídicas de gran tamaño sen presenza de ningún axente externo máis aló da auga como disolvente. As membranas son unha potencial diana terapéutica moi atractiva que relaciona varias familias de enfermidades coma o cancro e diversos procesos infecciosos[5,6]. De feito, o sistema inmune innato dos seres vivos presenta

unha primeira liña de defensa que actúa sobre as membranas, os péptidos de defensa do anfitrión[7,8] (*Host Defense Peptides*, HDPs, en inglés), en función de seren estas afectadas por diversos patóxenos[9]. Con todo, existe moi pouco coñecemento do mecanismo de interacción a nivel molecular destes péptidos coas membranas[10], e mesmo temos un entendemento moi limitado da propia estrutura interna destas últimas. Xa que logo, é necesaria unha comprensión máis robusta destes obxectos en solitario para poder describir os mecanismos de acción doutros posibles axentes sobre eles. É, pois, neste marco no que obtemos predicións de estruturas de orde superior (análogas por exemplo á estrutura secundaria das proteínas), incluso nos modelos de membrana máis simples estudados, co que abrimos o camiño cara a unha mellor comprensión das membranas e as súas interaccións.

Agradecementos: CESA; Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades; Agencia Estatal de Investigación; ERDF (RTI2018-098795-A-I00, and PID2019-111327GB-I00, RYC-2016-20335); Xunta de Galicia (ED431F 2020/05); Centro singular de investigación de Galicia (2016-2019, ED431G/09)).

Referencias

- [1] Molecular Dynamics, Y. Kwon, Cham, Springer International Publishing, 2015.
- [2] Á. Piñeiro, J. Pipkin, V. Antle, R. García-Fandiño, *Journal of Molecular Liquids*, **2021**, 343, 117588.
- [3] M. Calvelo, C. I. Lynch, J. R. Granja, M. S. P. Sansom, R. García-Fandiño, *ACS Nano*, **2021**, 15, 7053-7064.
- [4] F. Suárez *et al*, <https://supepmem.com/>, *En revisión para publicar*.
- [5] M. Azevedo, C. Pina-Vaz, F. Baltazar, *International Journal of Molecular Sciences*, **2020**, 21, 3115.
- [6] R. Vance, M. Eichberg, D. Portnoy *et al.*, *Science Immunology*, **2017**, 2, N/A.
- [7] D. Wu, Y. Gao, Y. Qi *et al.*, *Cancer Letters*, **2014**, 351, 13-22.
- [8] S. Marqus, E. Pirogova, T. J. Piva, *Journal of Biomedical Science*, **2017**, 24, 1-15.
- [9] N. Mookherjee, M. Anderson, H. Haagsman *et al.*, *Nature Reviews Drug Discovery*, **2020**, 19, 311-332.
- [10] J. Li, J. Koh, S. Liu, *et al.*, *Frontiers in Neuroscience*, **2017**, 11, 73.

Bioaccesibilidade humana de plastificantes presentes nos microplásticos simulando dixestións gastrointestinais

J. López-Vázquez¹,

M. Trujillo²

J. B. Quintana¹

R. Cela¹

M. Miró²

R. Rodil¹

¹ Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, Instituto de Análises Químicas e Biolóxicas da Universidade de Santiago de Compostela (IAQBUS), Universidade de Santiago de Compostela E-15782, España
j.lopez.vazquez@usc.es

² FI-TRACE, Departamento de Química, Universitat de les Illes Balears Palma de Mallorca, España

Palabras chave: Bioaccesibilidade, microplásticos, plastificantes

Os plastificantes úsanse amplamente para aumentar a flexibilidade e suavidade dunha gran variedade de produtos plásticos. A exposición humana aos plastificantes a través de microplásticos pode producirse por inxestión, inhalación ou absorción dérmica. No primeiro caso, a bioaccesibilidade oral pódese definir como a porcentaxe dunha substancia extraíble no tracto gastrointestinal (GIT) e que se fai accesible para a absorción despois da inxestión [1], dependendo de factores bióticos e abióticos.

Os ensaios de extracción con base fisiolóxica *in vitro* (PBETs) como os propostos por Versantvoort *et al* [2] en 2004 para produtos alimenticios no GIT humano simulan tres compartimentos diferentes (boca, estómago e intestino superior), coa secreción de fluídos GIT. Ademais, o *Unified Fasted BARGE Method* (UBM) [3] lanzado en 2009 converteuse nun PBET estandarizado, no que se simulan as condicións fisiolóxicas durante as dixestións humanas usando tres compartimentos en condicións de xaxún.

O obxectivo deste traballo é avaliar a bioaccesibilidade humana tanto nas fases gástricas como nas gastrointestinais con modelos de dixestión *in vitro*, é dicir, ensaios Versantvoort (estado alimentado) e UBM (estado en xaxún) para plastificantes presentes en polietileno de baixa densidade (LDPE) e microplásticos de cloruro de polivinilo (PVC) (tamaño de partícula $\leq 150 \mu\text{m}$). Estes plastificantes analizáronse mediante cromatografía de líquidos e gases combinados con espectrometría de masas.

Agradecementos: Os autores recoñecen o apoio financeiro do Goberno galego (Consellería de Economía e Industria, Xunta de Galicia, ref. ED431C2017 / 36), do Goberno español (CTM2017-84763-C3-2-R, CTM2017-84763-C3-3 -R e CTM2017-90890-REDT) e fondos FEDER.

Referencias

- [1] Trujillo-Rodríguez, M. J., et al. Combining in vitro oral bioaccessibility methods with biological assays for human exposome studies of contaminants of emerging concern in solid samples. *TrAC Trends in Analytical Chemistry*, **2020**, 132, 116040-116070.
- [2] Versantvoort, C., et al. Applicability of an in vitro digestion model in assessing the bioaccessibility of mycotoxins from food. *Food and Chemical Toxicology*, **2004**, 43, 31-40.
- [3] BARGE. Bioaccessibility Research Group of Europe (BARGE) - Institut National de l'Environnement Industriel et des Risques (INERIS), UBM procedure for the measurement of inorganic contaminant bioaccessibility from solid matrices., **2010**. https://www.bgs.ac.uk/barge/docs/BARGE_UBM_DEC_2010.pdf.

Desenvolvemento dunha metodoloxía analítica para a determinación da exposición humana a bisfenóis mediante análise de augas residuais con fins epidemiolóxicos

A. Estévez-Danta¹

R. Rodil¹

R. Montes¹

R. Cela¹

J. B. Quintana¹

¹ Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía,
Instituto de Investigación en Análises Químicas e Biolóxicas (IAQBUS),
Universidade de Santiago de Compostela E-15782, España
andreaestevez.danta@usc.es

Palabras chave: Exposoma, bisfenóis, epidemioloxía das augas residuais.

Os bisfenóis son compostos químicos empregados a grande escala en moitos procesos industriais e produtos orientados ao consumidor, e relacionados cunha gran variedade de efectos adversos para o ser humano. O bisfenol A é un disruptor endócrino que pode causar efectos no sistema inmunolóxico e reprodutivo [1]. O bisfenol S e o bisfenol F emerxen como alternativas ao bisfenol A, mostrando efectos menos danosos para o ser humano. Porén, existe pouca información sobre estas novas alternativas, polo que non se pode descartar que produzan efectos que non se recoñeceron ata agora. Por todo isto, cómpre desenvolver novos métodos que permitan determinar cuantitativamente a exposición a estas substancias nunha poboación concreta da forma máis rápida e efectiva. Neste contexto, a análise de augas residuais con fins epidemiolóxicos (WBE, do seu nome en inglés) é un método moi prometedor que pode complementar a clásica monitoraxe biolóxica (análises de sangue ou urina). A WBE baséase no feito de que os compostos químicos xenobióticos, como por exemplo os bisfenóis, se excretan como metabolitos nos ouriños. Posteriormente, as mostras combinadas de urina dunha cidade acaban nas depuradoras de augas residuais. Finalmente, a análise desas augas residuais, como mostras compostas de urina diluídas, permítenos calcular a exposición media dunha cidade dunha maneira rápida, barata e non invasiva para o ser humano, en comparación coa monitoraxe biolóxica [2]. Con esta finalidade, desenvolveuse unha metodoloxía analítica para a extracción e determinación de metabolitos de

bisfenóis nas augas residuais. En primeiro lugar, optimizáronse a detección por espectrometría de masas en tándem e a separación cromatográfica mediante cromatografía líquida de ultra-alta resolución. Seguidamente, púxose a punto un protocolo de extracción en fase sólida empregando os cartuchos de modo mixto Oasis WAX, e estudouse a estabilidade dos metabolitos e dos bisfenóis en auga residual. O método foi validado en termos de recuperación, repetibilidade e límites de detección e cuantificación, e aplicouse á análise de mostras compostas de 24 horas de auga residual de diferentes localizacións para a estimación de exposición humana a bisfenóis mediante WBE.

Agradecementos: Os autores agradecen o financiamento proporcionado pola Axencia Española Estatal de Investigación (AEI) a través do proxecto PID2000-117686RB-C32/AEI/10.13039/501100011033, ao Goberno Galego (Consellería de Cultura, Educación e Universidades, ref. ED481A-2020/258 e ED431C2021/06) e o financiamento FEDER.

Referencias

- [1] Chen, D., K. Kannan, H. Tan, Z. Zheng, Y.-L. Feng, Y. Wu and M. Widelka, *Environmental Science & Technology*, **2016**, 50, 5438-5453.
- [2] González-Mariño, I., L. Ares, R. Montes, R. Rodil, R. Cela, E. López-García, C. Postigo, M. López De Alda, E. Pocurull, R. M. Marcé, L. Bijlsma, F. Hernández, Y. Picó, V. Andreu, A. Rico, Y. Valcárcel, M. Miró, N. Etxebarria and J. B. Quintana, *Journal of Hazardous Materials*, **2021**, 401, 123272.

Índice de asistentes

Arnosa, A.

Departamento de Física Aplicada, Instituto de Materiais (iMATUS)

Bermúdez-Fernández, S.

Departamento Química Inorgánica, Facultade de Química

Blanco-González, A.

Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CIQUS)

Domínguez-Ramos, L.

CIQUS; Departamento de Enxeñaría Química, Escola Técnica Superior de Enxeñaría; Departamento de Química Física, Facultade de Química

Estévez-Danta, A.

Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía. Instituto de Investigacións en Análises Químicas e Biolóxicas (IAQBUS)

González-Barreira, C.

Departamento Química Inorgánica, Facultade de Química

López-Vázquez, J.

Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía. Instituto de Investigacións en Análises Químicas e Biolóxicas (IAQBUS)

Méndez, S.

Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía. Instituto de Investigacións en Análises Químicas e Biolóxicas (IAQBUS)

Moreno Pérez, M.

Departamento de Química Física, Universidade de Santiago de Compostela

Pérez-Mayán, L.

Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía. Instituto de Investigacións en Análises Químicas e Biolóxicas (IAQBUS)

Pimentel, C.

Departamento de Enxeñaría Química, Escola Técnica Superior de Enxeñaría

Raad Shakir Aljanabi, B.

Departamento Química Inorgánica, Facultade de Química

Rodríguez-Romero, M.

Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CIQUS)

Rúa-Sueiro, M.

Departamento Química Inorgánica, Facultade de Química

Tarrío, J. J.

Departamento Química Orgánica/ Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CIQUS)

Troncoso-Afonso, L.

Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CIQUS)

Velo-Helena, I.

Departamento Química Inorgánica, Facultade de Química

Índice de autores

Arnosa, A.
Barreiro-Piñeiro, N.
Bermúdez-Fernández, S.
Blanco-González, A.
Buceta, D.
Cela, R.
Corredoira-Vázquez, J.
Domínguez-Ramos, L.
Estévez-Danta, A.
Fernández-Fariña, S.
Fondo, M.
Freire, F.
García Acevedo, Pelayo,
García-Deibe, A. M.
García-Fandiño
González-Barreira, C.
González-Gómez, M.
González-Noya, A. M.
López-Vázquez, J.
Martínez-Calvo, M.
Martínez-Costas, J. M.
Mascareñas, J. L.
Méndez, S.
Miró, M.
Montes, R.
Moreno Pérez, M.
Ortigueira, J. M.
Pedrido, R.
Piñeiro, A.
Piñeiro, Y.
Quintana, J. B.
Quiñoá, E.
Raad Shakir Aljanabi, B.
Ramil, M.
Rivas, J.
Rodil, R.
Rodil, R.
Rodríguez, I.
Rodríguez-Romero, M.
Rúa-Sueiro, M.
Sanmartín-Matalobos, J.
Tarrío, J. J.
Tomás-Gamasa, M.
Troncoso-Afonso, L.
Trujillo, M.
Vázquez Vázquez, C.
Vázquez, B.
Velo-Helena, I.
Vila, J. M.



FACULTADE DE QUÍMICA



SERVIZO DE NORMALIZACIÓN
LINGÜÍSTICA