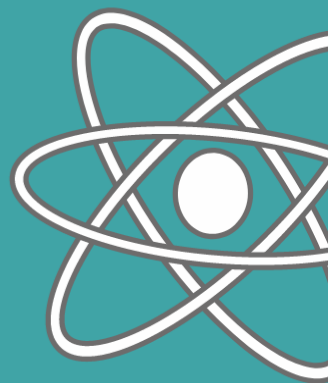


LIBRO DE RESUMOS



II XUNTANZA INVESTIGADOR@S NOV@S NO ÁMBITO DA QUÍMICA

FACULTADE DE QUÍMICA
25-26 XANEIRO 2023



@xinq_usc | i.gal/xinq

II Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da química (XINQ_2)

Libro de resumos

Santiago de Compostela, 2023

Universidade de Santiago de Compostela

HDL: <http://hdl.handle.net/10347/30243>

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



Comité científico

- José Benito Quintana Álvarez (Coordinador)
- Ana M^a González Noya
- Carlos Vázquez Vázquez
- Marta Castiñeira Reis
- Antonio Rumbo Gómez

Comité organizador

- Braulio Casabella Amieiro
- Alfonso Cabezón Vizoso
- Andrea Estévez Danta
- Ana Justo Vega
- Isabel Velo Heleno

Organiza: 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
Programa – Mércores 25 de xaneiro.....	6
Programa – Xoves 26 de xaneiro.....	9
RESUMOS	10
Comunicación C1 — Desenvolvemento dunha novidosa terapia de substitución enzimática para tratar a fenilketonuria usando a tecnoloxía IC-Tagging.....	11
Comunicación C2 — Revestimento polimérico de péptidos modulados por hidrazonas para a entrega de ADN plasmídico.....	13
Comunicación C3 — Construíndo nanorreactores enzimáticos utilizando o sistema IC-Tagging: procura de solucións aos retos da industria dende un enfoque biotecnolóxico	15
Comunicación C4 — Deseño de fase estacionaria para a separación de nanopartículas metálicas mediante cromatografía líquida	17
Comunicación C5 — Evidenciando a presenza de produtos de coidado persoal en xeles hidroalcohólicos mediante o método analítico SPME-GC-MS/MS	18
Comunicación C6 — Desenvolvemento de novas metodoloxías analíticas para a determinación de contaminantes persistentes, móbiles e tóxicos en augas.....	20
Comunicación C7 — O proceso que leva á estimación da exposición humana a substancias prexudiciais a través da análise de augas residuais con fins epidemiolóxicos	22
Comunicación C8 — Simulación da condutividade térmica mediante cálculos <i>ab-initio</i>	24
Comunicación C9 — Catálise de reaccións de polimerización por clústeres de Ag.....	27
Comunicación C10 — Monocapas lipídicas como modelo de membrana en cancro e infección: un estudo sinérxico <i>in vitro/in silico</i>	30
Comunicación C11 — Novas aproximacións para afrontar o desafío das superbacterias: abordando o encima xiquimato quinase.....	32
Comunicación C12 — Moléculas miméticas do PVA, para a inhibición da recristalización do xeo	34
Comunicación C13 — Deseño de novas moléculas fluorescentes para a visualización celular .	36
Comunicación C14 — Inactivando a resistencia innata de <i>Pseudomonas aeruginosa</i> aos antibióticos con sulfonopenicilinas	38
Comunicación C15 — Avaliación da presenza de residuos de fungicidas e insecticidas en cervexa mediante cromatografía de líquidos e espectrometría de masas en tándem.	40

Comunicación C16 — Determinación de axentes químicos procedentes de caucho de pneumáticos en auga	42
Comunicación C17 — Desenvolvemento dun método para a determinación de biomarcadores do uso de cannabinoides mediante a análise de augas residuais con fins epidemiolóxicos	43
Comunicación C18 — Estudo do metabolismo <i>in vitro</i> de contaminantes orgánicos	45
Comunicación C19 — Acetileno: uso na química sintética e potenciais aplicacións en reaccións de carboboración	47
Comunicación C20 — Estudo do proceso de desulfuración dun ligando tiocarbohidrazona para a obtención dun ligando azina	48
Comunicación C21 — Nanomateriais híbridos $\text{TiO}_2/\text{SnO}_2$ – clústeres de prata para o seu uso na degradación fotocatalítica de contaminantes	50
Comunicación C22 — Complexos dinucleares de cobre(II) como modelos de metaloenzimas.	52
Comunicación C23 — Estudo da agregación de péptidos de β -amiloide con técnicas de fluorescencia	54
Comunicación C24 — Amidas anfifílicas e bolanfílicas derivadas do ácido (-)-xiquímico. Síntese e estudo das súas propiedades	56
Comunicación C25 — Exploración estrutural dun ciclopéptido para a súa autoensamblaxe de 1D a 2D.	59
Comunicación C26 — Ciclopéptidos nas portas celulares, unha alternativa ós fármacos convencionais?	61
Comunicación C27 — Estudo da asociación supramolecular de alta afinidade mediante fluorescencia	63
Comunicación C28 — Como usar o intercalador laranxa de tiazol para a detección e cuantificación de ADN de dobre cadea	65
Comunicación C29 — Sondas fluorescentes sensibles á contorna para a caracterización de interaccións biomoleculares	67
COMUNICACIÓNS PREMIADAS	68

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 – Mércores 25 de xaneiro

09:00 Presentación da II Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da química

Jesús Sanmartín Matalobos (decano da Facultade de Química da USC), Manuel Núñez Singala (director do Servizo de Normalización Lingüística) e José Benito Quintana Álvarez (coordinador do Comité Científico da XINQ_2).

Sesión Máster 1

Moderación: Antonio Rumbo Gómez e Braulio Casabella Amieiro

09:15 Comunicación (C-1) – Daniel Abella López

Desenvolvemento dunha novidosa terapia de substitución enzimática para tratar a fenilcetonuria usando a tecnoloxía IC-Tagging

09:30 Comunicación (C-2) – Manuel Pérez Pérez

Revestimento polimérico de péptidos modulados por hidrazonas para a entrega de ADN plasmídico

09:45 Comunicación (C-3) – Adrián López Teijeiro

Construíndo nanorreactores enzimáticos utilizando o sistema IC-Tagging: procura de solucións aos retos da industria dende un enfoque biotecnolóxico

10:00 Debate

Sesión Doutoramento 1

Moderación: José Benito Quintana Álvarez e Andrea Estévez Danta

10:15 Comunicación (C-4) – Iván Lozano González

Deseño de fase estacionaria para a separación de nanopartículas metálicas mediante cromatografía líquida

10:30 Comunicación (C-5) – Ana Castiñeira Landeira

Evidenciando a presenza de produtos de coidado persoal en xeles hidroalcohólicos mediante o método analítico SPME-GC-MS/MS

10:45 Comunicación (C-6) – Sandra Méndez Martínez

Desenvolvemento de novas metodoloxías analíticas para a determinación de contaminantes persistentes, móbiles e tóxicos en auga

11:00 Comunicación (C-7) – Andrea Estévez Danta

O proceso que leva á estimación da exposición humana a substancias prexudiciais a través da análise de augas residuais con fins epidemiolóxicos

11:15 Debate

11:30-12:00 Descanso para café

Sesión Máster 2

Moderación: Marta Castiñeira Reis e María Isabel Velo Heleno

12:00 Comunicación (C-8) – Javier Corral Sertal

Simulación da condutividade térmica mediante cálculos ab initio

12:15 Comunicación (C-9) – Xinran Lu

Catálise de reaccións de polimerización por clústeres de Ag

12:30 Comunicación (C-10) – Paula Antelo Riveiro

Monocapas lipídicas como modelo de membrana en cáncer e infección: un estudo sinérxico in vitro/in silico

12:45 Debate

Sesión Doutoramento 2

Moderación: Antonio Rumbo Gómez e Braulio Casabella Amieiro

13:00 Comunicación (C-11) – Rafael Canabal Falcón

Novas aproximacións para afrontar o desafío das superbacterias: abordando a enzima xiquimato quinase

13:15 Comunicación (C-12) – Sara Falcón Fariña

Moléculas miméticas do PVA, para a inhibición da recristalización do xeo

13:30 Comunicación (C-13) – Patricia Fulias Guzmán

Deseño de novas moléculas fluorescentes para a visualización celular

13:45 Comunicación (C-14) – Braulio Casabella Amieiro

Inactivando a resistencia innata de Pseudomonas aeruginosa aos antibióticos con sulfonopenicilinas

14:00 Debate

14:15-16:00 Descanso para comer

Sesión Máster 3

Moderación: José Benito Quintana Álvarez e Ana Justo Vega

16:00 Comunicación (C-15) – Tania Arias Cailleau

Avaliación da presenza de residuos de funxicidas e insecticidas en cervexa mediante cromatografía de líquidos e espectrometría de masas en tándem

16:15 Comunicación (C-16) – Andrés Duque Villaverde

Determinación de axentes químicos procedentes de caucho de pneumáticos en auga

16:30 Comunicación (C-17) – Carlos Pernas Fraguera

Desenvolvemento dun método para a determinación de biomarcadores do uso de cannabinoides mediante a análise de augas residuais con fins epidemiolóxicos

16:45 Comunicación (C-18) – María Lage Díaz

Estudo do metabolismo in vitro de contaminantes orgánicos

17:00 Debate

Sesión Doutoramento 3

Moderación: Ana María González Noya e María Isabel Velo Heleno

17:15 Comunicación (C-19) – Andrés Manuel Álvarez Constantino

Acetileno: uso na química sintética e potenciais aplicacións en reaccións de carboboración

17:30 Comunicación (C-20) – Uxía Barreiro Sisto

Estudo do proceso de desulfuración dun ligando tiocarbhidrazona para a obtención dun ligando azina

17:45 Comunicación (C-21) – María Moreno Pérez

Nanomateriais híbridos TiO_2/SnO_2 – clústeres de prata para o seu uso na degradación fotocatalítica de contaminantes

18:00 Comunicación (C-22) – María Isabel Velo Heleno

Complexos dinucleares de cobre(II) como modelos de metaloenzimas

18:15 Debate

18:30 Fin do 1ª xornada

Programa – Xoves 26 de xaneiro

09:20 Presentación da segunda xornada da II Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da química

Sesión Doutoramento 4

Moderación: Carlos Vázquez Vázquez e Alfonso Cabezón Vizoso

09:30 Comunicación (C-23) – Sara Illodo Brea

Estudo da agregación de péptidos de β -amiloide con técnicas de fluorescencia

09:45 Comunicación (C-24) – Pablo López Carracedo

Amidas anfifílicas e bolanfílicas derivadas do ácido (-)-xiquímico. Síntese e estudo das súas propiedades

10:00 Comunicación (C-25) – Lucía Méndez Gómez

Exploración estrutural dun ciclopéptido para a súa autoensamblaxe de 1D a 2D

10:15 Comunicación (C-26) – Alfonso Cabezón Vizoso

Ciclopéptidos nas portas celulares, unha alternativa ós fármacos convencionais?

10:30 Debate

Sesión Máster 4

Moderación: Carlos Vázquez Vázquez e Marta Castiñeira Reis

10:45 Comunicación (C-27) – Jesús Seijas Cerceda

Estudo da asociación supramolecular de alta afinidade mediante fluorescencia

11:00 Comunicación (C-28) – Stella Hernández Faria de Moraes

Como usar o intercalador laranxa de tiazol para a detección e cuantificación de ADN de dobre cadea

11:15 Comunicación (C-29) – Diego Cora Calvo

Sondas fluorescentes sensibles ao contorno para a caracterización de interaccións biomoleculares

11:30 Debate

11:45-12:30 Descanso para café

PREMIOS E CLAUSURA

12:30 Votación final

13:00 Entrega de premios

13:15 Acto de clausura da II Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da química

Carlos Vázquez Vázquez (membro do Comité Científico da XINQ_2).

RESUMOS

Comunicación C1 — Desenvolvemento dunha novidosa terapia de substitución enzimática para tratar a fenilcetonuria usando a tecnoloxía IC-Tagging

D. Abella López¹, A. López Teijeiro¹, N. Barreiro Piñeiro¹, G. Eibes González², J.M. Martínez Costas¹

¹ *CiQUS Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares, Rúa de Jenaro de la Fuente s/n 15705, Santiago de Compostela, España*

² *CRETUS Centro Interdisciplinar de Investigacións en Tecnoloxías Ambientais, Rúa de Constantino Candeira 15705, Santiago de Compostela, España*

A fenilcetonuria está dentro das denominadas “enfermidades raras”, malia que é o defecto hereditario máis frecuente no metabolismo dos aminoácidos. É debida á existencia de mutacións en ambos os alelos do xene do enzima fenilalanina hidroxilase (PAH). En condicións normais, este enzima é o responsable de metabolizar o aminoácido fenilalanina da dieta a tirosina no fígado. En consecuencia, esta patoloxía caracterízase pola presenza de niveis excesivos de fenilalanina no sangue e tecidos, o que provoca trastornos neurolóxicos que resultan nas manifestacións clínicas características da enfermidade como a discapacidade intelectual grave, os problemas de comportamento, as dificultades sociais ou os episodios de epilepsia [1].

Na actualidade, o único tratamento universal dispoñible para esta enfermidade baséase nunha dieta moi estrita na que se consomen unicamente alimentos con baixo contido en fenilalanina. Isto supón un gran cambio de vida para os pacientes e adoita asociarse con deficiencias nutricionais. Por esta razón, hai un grande interese en desenvolver tratamentos para esta enfermidade. Aínda que hai varios enfoques para este obxectivo, un dos máis prometedores, sen dúbida, é a terapia de substitución enzimática baseada no enzima fenil amonio liase (PAL). Este enzima ten a capacidade de reducir notablemente os niveis de fenilalanina no sangue e ten unha regulación máis sinxela ca PAH, polo que é un bo candidato para este tipo de tratamentos. Máis en concreto, o PAL procedente da cianobacteria *Anabaena variabilis* (AvPAL) presenta unha elevada resistencia [1]. Por estas razóns, o noso traballo propón o uso do sistema IC-Tagging para o desenvolvemento dunha terapia de substitución enzimática administrable por vía oral, baseada nunha versión estabilizada da AvPAL.

A metodoloxía IC-Tagging patentada polo noso laboratorio é unha ferramenta biotecnolóxica que funciona como un sistema de marcaxe molecular de proteínas. O devandito sistema consta de dous elementos. Por un lado, temos a proteína muNS-Mi derivada dun reovirus aviario, que é capaz de formar por si mesma micro (MS) ou nanoesferas (NS) facilmente purificables en calquera sistema de expresión. E por outro lado, o dominio IC desta mesma proteína que nos permite marcar calquera proteína de interese sen alterar as súas características ou localización celular. No entanto, cando coexpresamos simultaneamente muNS-Mi, xunto coa nosa proteína de interese marcada co IC, isto provoca a relocalización da proteína nas esferas ao tempo que se mantén a súa función, actividade e correcto pregamento (Figura 1). Deste xeito, o sistema IC-Tagging permítenos producir MS ou NS cargadas con calquera enzima de interese mantendo a súa actividade [2]. Ademais, esta tecnoloxía aporta unha maior estabilidade ao enzima, algo moi vantaxoso á hora de propor unha terapia de substitución enzimática [3].

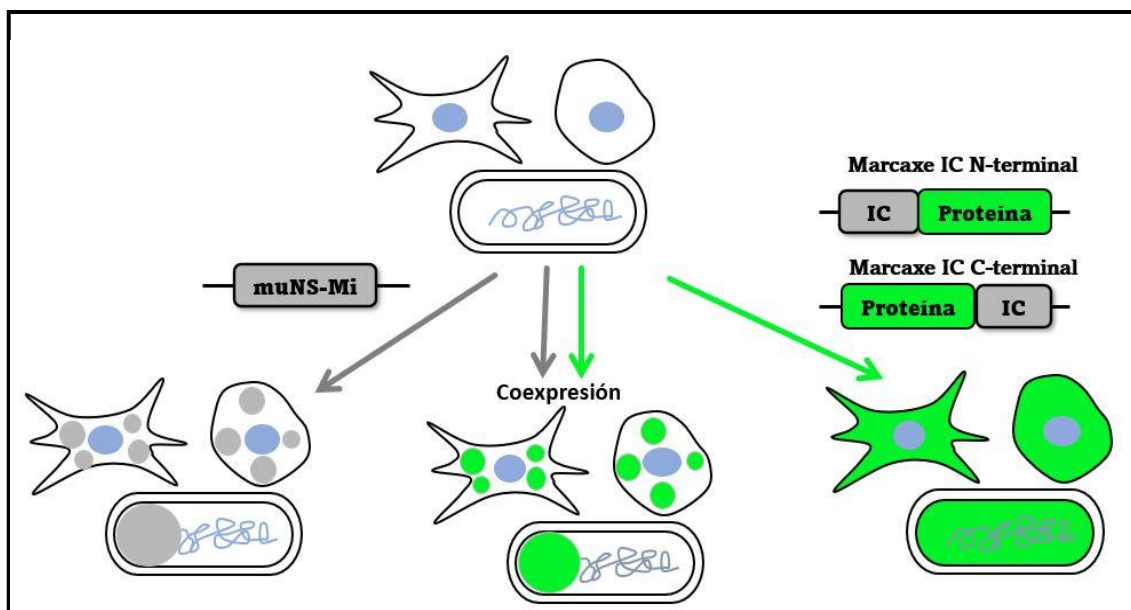


Figura 1. Representación da metodoloxía IC-Tagging

Os nosos resultados amosaron que é posible usar o sistema IC-Tagging para producir NS cargadas co encima AvPAL activo e estabilizado en bacterias dun xeito sinxelo e barato. De feito, o encima presenta unha maior actividade específica cando se atopa cargado nas NS que na súa forma libre. En engadido, fomos capaces de recubrir as NS purificadas con diferente polímeros (como o quitosano de baixo peso molecular ou derivados do polietilenglicol) sen perder actividade específica do encima, para evitar a degradación por proteases pancreáticas e a posible resposta inmune do organismo. Polo tanto, estes resultados *in vitro* abren a porta a unha novidosa e prometedora estratexia de substitución enzimática por vía oral para a fenilketonuria. E tamén suxiren que esta tecnoloxía podería ser aplicada nun futuro para o desenvolvemento de tratamentos para outros trastornos metabólicos para os cales aínda non existe cura na actualidade.

Agradecementos: Quero agradecer especialmente aos meus supervisores, o Prof. José Manuel Martínez Costas e a Dra. Natalia Barreiro Piñeiro. Á Dra. Gemma Eibes pola súa colaboración nos ensaios de actividade enzimática. E por último, a todos os meus compañeiros do Grupo de Viroloxía Molecular do CiQUS polo seu apoio.

Referencias

- [1] Van Wegberg, A. M. J., et al. *Orphanet journal of rare diseases*, 2017, 12.1, 1-56.
- [2] Brandariz-Nuñez, A., Menaya-Vargas, R., Benavente, J., Martínez-Costas, J., *PLoS One*, 2010, 5.11, e13961.
- [3] Pose-Boirazian, T., Eibes, G., Barreiro-Piñeiro, N., Díaz-Jullien, C., Lema, J., Martínez-Costas, J., *Scientific reports*, 2021, 11(1), 1-10.

Comunicación C2 — Revestimiento polimérico de péptidos modulados por hidrazonas para a entrega de ADN plasmídico

M. Pérez-Pérez, M. Juanes, A. Fuertes, I. Lostalé-Seijo, J. Montenegro

Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) e Departamento de Química Orgánica. Universidade de Santiago de Compostela

As terapias baseadas en ácidos nucleicos están a revolucionar a medicina nun número crecente de áreas como o tratamento do cancro ou o desenvolvemento de vacinas. Porén, a entrega eficiente dos ácidos nucleicos ás células segue a ser un gran reto aínda por resolver. Os vectores virais son os axentes de transporte de ácidos nucleicos máis utilizados para aplicacións clínicas. Con todo, este tipo de vehículos está suxeito a abundantes limitacións e problemas de seguridade [1]. Nos últimos anos, o transporte non viral de ácidos nucleicos xurdiu como unha alternativa máis segura e eficaz para a entrega de ADN e ARN ás células. Aínda así, estes vehículos deben ser capaces de atravesar unha serie de barreiras extracelulares e intracelulares para unha entrega eficiente *in vivo*. É por iso que se están a facer grandes esforzos no deseño de novos sistemas ou na mellora dos actuais para adaptar estas tecnoloxías ás aplicacións *in vivo* [2].

Neste traballo descríbese a modificación dun péptido penetrante en células (**P**) mediante unha plataforma de modificación por hidrazonas, descrita polo grupo de Javier Montenegro [3], para que incorpore cadeas hidrofóbicas, xerando así distintos anfífilos peptídicos que poden ser usados como vehículos non virais. Comprobase, mediante citometría de fluxo e microscopia de fluorescencia, que un destes anfífilos, **T+2**, foi capaz de superar notablemente a eficiencia de transfección dos métodos comerciais, presentando ademais unha menor toxicidade para o transporte de ADN plasmídico e ARN mensaxeiro a células HeLa *in vitro*.

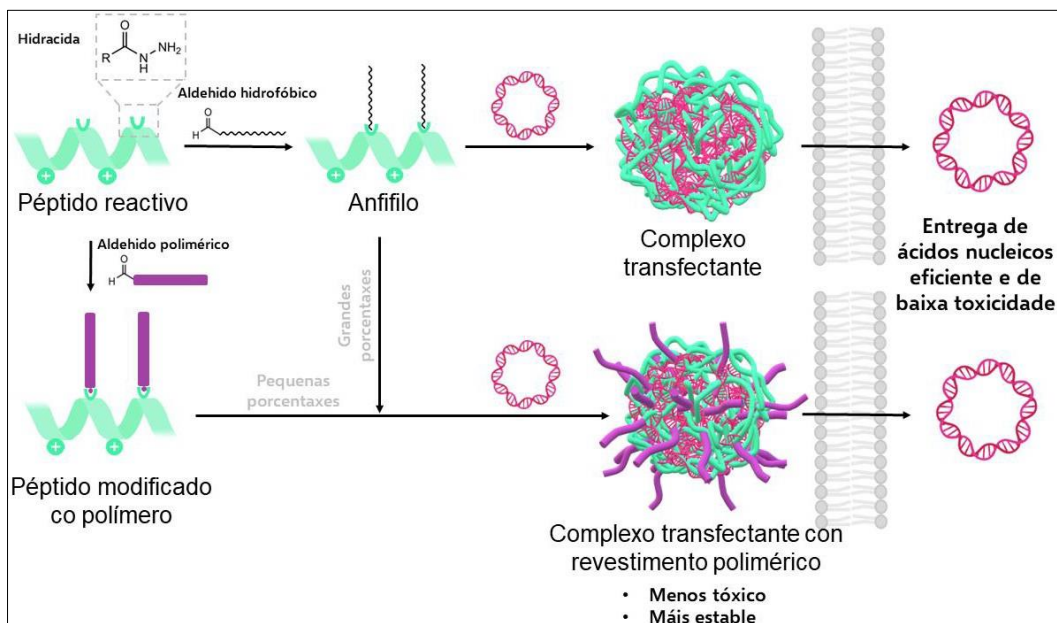


Figura 1

Por outro lado, quíxose comprobar o efecto sobre a transfección dun recubrimento polimérico

sobre os nanocomplexos anfífilo-ADN. Para iso, utilizando a mesma plataforma de modificación por hidrazonas, modificouse o péptido orixinal, **P**, cun polímero hidrofílico (**Pol-P**). Mesturouse unha serie de porcentaxes de **Pol-P** con **T+2** nas formulacións utilizadas como vehículo do ADN plasmídico e observouse que pequenas porcentaxes do péptido modificado co polímero foron capaces de reducir a toxicidade dos complexos sen afectar a eficiencia de transfección. Ademais, mediante DLS, observouse unha redución do tamaño dos complexos ao aumentar a porcentaxe de **Pol-P**, suxerindo que o revestimento polimérico tamén foi capaz de mellorar a estabilidade coloidal.

En definitiva, neste estudo identificouse **T+2** como un anfífilo para o transporte de ADN plasmídico e ARN mensaxeiro a células *in vitro* cunha eficacia maior e unha toxicidade menor que os reactivos comerciais máis utilizados. Ademais, comprobouse que a introdución de pequenas porcentaxes do péptido modificado co polímero hidrofílico nas formulacións foi suficiente para reducir a toxicidade e aumentar a estabilidade dos nanocomplexos sen afectar a eficacia de transfección de ADN plasmídico. Deste xeito, propónse o revestimento polimérico como unha estratexia prometedora para a adaptación destas tecnoloxías a futuras aplicacións *in vivo*.

Referencias

- [1] Yin, H et al. *Nat.Rev.Genet.*, 2014, 15 (8), 541-555.
- [2] Lostalé-Seijo, I. & Montenegro, J. *Nat. Rev. Chem.*, 2018, 2 (10), 258– 277.
- [3] Louzao, I. et al. *J. Mater. Chem.*, 2017, 5 (23), 4426-4434.

Comunicación C3 — Construindo nanorreactores enzimáticos utilizando o sistema IC-Tagging: procura de solucións aos retos da industria dende un enfoque biotecnolóxico

A. López Teijeiro¹, D. Abella López ¹, N. Barreiro Piñeiro ¹, G. Eibes González², J.M. Martínez Costas¹

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

² Centro Interdisciplinario de Investigación en Tecnoloxías Ambientais (CRETUS), Rúa Constantino Candeira 15705, Santiago de Compostela, España.

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, como a produción de biocombustibles, o desenvolvemento de produtos farmacéuticos ou mesmo o procesamento 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 como 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 grande atención na industria. Ese sistema, desenvolto no noso laboratorio, permítenos cargar calquera proteína que nos interese en nanoesferas proteicas formadas por unha proteína dun virus aviario 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.

Por enriba disto, recentemente vimos de desenvolver unha estratexia totalmente novidosa para cargar ao mesmo tempo dúas ou máis proteínas nas esferas proteicas utilizando a nosa metodoloxía. Isto ábrenos as portas a unha infinidade de novas aplicacións en diversos ámbitos, entre elas obter nanoesferas que actúen como verdadeiros nanorreactores multienzimáticos, ao

poder incorporarlles dúas ou máis enzimas que funcionen unha detrás doutra de maneira coordinada e nun microambiente controlado (Figura 1).

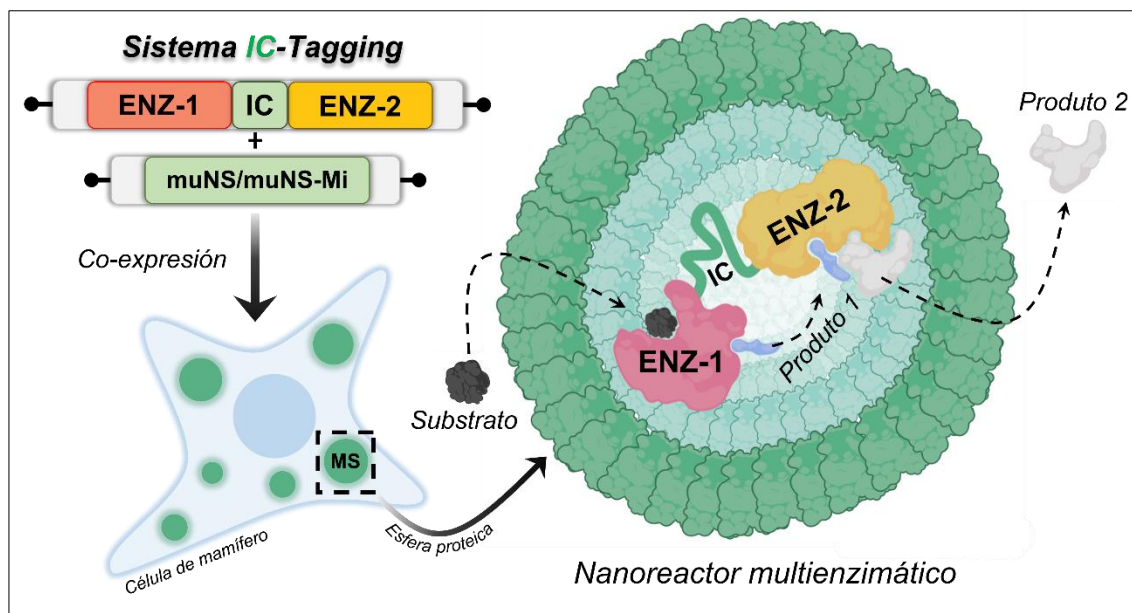


Figura 1. O sistema IC-Tagging como plataforma para a construción de nanorreactores multienzimáticos. Abreviaturas: ENZ-1: Enzima 1; ENZ-2: Enzima 2; IC: Intercoil; MS: Microesfera.

Agradecementos. O traballo desenvolto foi 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 (Daniel Abella, Paula Sánchez, Uxía Grela, Lisa Busch, Nilia Ruíz e Pablo García), así coma a Gemma Eibes González (CRETUS), Rebeca Menaya-Vargas e Roi López Blanco (CiQUS).

Referencias

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

Comunicación C4 — Deseño de fase estacionaria para a separación de nanopartículas metálicas mediante cromatografía líquida

I. Lozano González¹, A. Gil², F. Guitián², P. Bermejo Barrera¹, A. Moreda Piñeiro¹

¹ Grupo de Elementos Traza, Espectroscopia e Especiación (GETEE), Instituto de Materiais iMATUS, Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela, Avenida das Ciencias, s/n 15782 Santiago de Compostela, España

² Instituto de Cerámica, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, España

Durante as últimas décadas, a industria das nanopartículas non fixo máis que crecer ano tras ano, e con este aumento da produción, debemos destacar a necesidade de investigar se estas poden chegar a producir algún tipo de adversidade tanto para o medio ambiente como, finalmente, para a propia saúde humana.

Estas nanopartículas reciben múltiples aplicacións a día de hoxe en campos tales como a medicina (distribución de medicamentos de maneira localizada, terapia antitumoral, terapia antibiótica), a fabricación e materiais (informática, produtos de acotío, sensores químicos e biosensores), o medioambiental (interacción de contaminantes coas nanopartículas para facilitar súa eliminación do medio), a electrónica, a xeración de enerxía (xeración mediante fotoelectroquímica e división electroquímica da auga), as industrias mecánicas (nanopartículas actuando coma recubrimento, lubricante e adhesivos) [1].

Por iso mesmo é importante levar a cabo unha correcta detección e determinación destas nanopartículas que poidan estar presentes nos medios naturais. Para iso, vaise empregar un sistema híbrido de HPLC-ICP-MS. A columna empregada ten unha fase estacionaria a base de esferas de vidro inertes. A mostra que se fai pasar pola columna trátase dunha disolución de nanopartículas de prata de 40 nm a diferentes concentracións, dopada con prata iónica.

Tras varias medidas chegouse a lograr separar as nanopartículas da mostra iónica empregando auga milli-Q como fase móbil e cun fluxo elevado (0,9-1 mL min⁻¹). No cromatograma soamente se obtiña un pico cromatográfico ao inxectar as nanopartículas e, por outra banda, cando se inxecta a prata iónica non se logra rexistrar ningún pico en absoluto. Cando inxectamos unha mestura das dúas mostras o resultado volve ser un único pico que coincide en tempo de retención (t_R) con cando se inxectaron soamente as nanopartículas. Tras estes resultados puidemos determinar que con este método é posible chegar a separar as nanopartículas da forma iónica do propio metal.

Agradecementos: Os autores desexan agradecer o apoio financeiro do Ministerio de Economía e Competitividade (proxecto INNOVANANO, referencia RT2018-099222-B-100) e á Xunta de Galicia (Grupo de Referencia Competitiva, número de subvención ED431C2018/19)

Referencias

[1] Khan, Ibrahim; Saeed, Khaid; Khan, Idrees. 2019. Nanoparticles: Properties, applications and toxicities. *Arabian Journal of Chemistry*. **Vol. 12**. pp. 908-931

Comunicación C5 — Evidenciando a presenza de produtos de coidado persoal en xeles hidroalcohólicos mediante o método analítico SPME-GC-MS/MS

A. Castiñeira-Landeira¹, L. Vázquez¹, M. Celeiro¹, H. González-Leirado¹, M. Llompart¹, T. Dagnac²

¹ CRETUS, Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, Universidade de Santiago de Compostela, E-15782, Santiago de Compostela, España.

² Axencia Galega de Calidade Alimentaria – Centro de Investigacións Agrarias Mabegondo (AGACAL-CIAM) – Unidade de contaminantes orgánicos, apartado 10, E-15080, A Coruña, España.

Os xeles hidroalcohólicos convertéronse en produtos esenciais, sendo unha das ferramentas básicas para previr e mitigar a transmisión da COVID-19. A Organización Mundial da Saúde (OMS) publicou un protocolo para homoxeneizar a formulación dos xeles hidroalcohólicos e para a fabricación dos mesmos, asegurando a súa acción antimicrobiana. A pesar disto, se a finalidade principal é limpar a pel son considerados cosméticos, polo que deben cumprir co Regulamento (UE) No. 1223/2009 e este cumprimento debe ser verificable analiticamente [1-3].

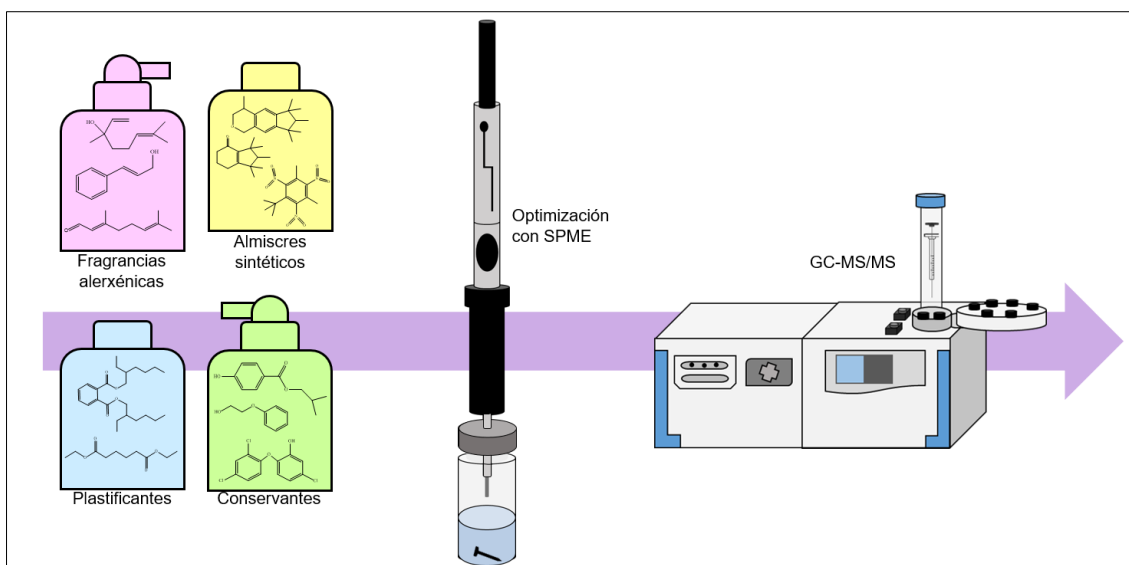


Figura 1. Esquema resumo da metodoloxía analítica SPME-GC-MS/MS.

Neste contexto, o obxectivo deste traballo foi o desenvolvemento e validación dunha metodoloxía verde, simple, miniaturizada e de alto rendemento capaz de determinar simultaneamente 60 produtos para o coidado persoal (PCP), incluídas fragancias alérxicas, almisces sintéticos, conservantes e plastificantes, en mostras de xeles hidroalcohólicos (*Figura 1*). O método analítico basease na microextracción en fase sólida (*Solid Phase Microextraction*, SPME) seguida de cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas en tándem (GC-MS/MS).

Primeiro, leváronse a cabo algunhas probas preliminares comparando as técnicas de extracción SPME e a dispersión en matriz en fase sólida (*Matrix Solid Phase Dispersion*, MSPD).

Optimizáronse diferentes factores que afectan á eficiencia da SPME mediante un deseño experimental que inclúe o tipo de recubrimento da fibra (PDMS/DVB, PA e DVB/CAR/PDMS), o modo de extracción (espazo de cabeza, *Head Space* HS, e por inmersión, *Direct Immersion* DI) e a temperatura de extracción (50°C e 100°C). Unha vez optimizadas as condicións experimentais da SPME, o método analítico SPME-GC-MS/MS validouse satisfactoriamente en termos de linearidade ($R^2 > 0,9900$), precisión media cuns valores de desviación estándar relativa (*Relative Standard Deviation*, RSD) inferiores ao 10% e valores de recuperación entre o 71% e 120% cuns baixos límites de detección (*Limit Of Detection*, LOD), demostrando que o método proposto é adecuado para a determinación simultánea dun elevado número de compostos en xeles hidroalcohólicos. Empregando estándares preparados en auga ultrapura preparouse unha calibración externa que demostra a ausencia de efecto matriz.

Finalmente, analizáronse xeles hidroalcohólicos de procedencia variada, demostrando a presenza de PCPs na totalidade das mostras. Ademais, a maioría das mostras non estaban correctamente etiquetadas atendendo ao Regulamento cosmético (UE) No. 1223/200, e ningún deles segue a recomendación da OMS.

Agradecementos: Este traballo foi apoiado polo proxecto UNST10-1E-491 (Programa de Infraestrutura, Ministerio de Ciencia e Innovación, España). Os/as autores/as pertencen ao ED431 2020/06 (Programa de Grupos de Investigación Consolidados, Xunta de Galicia) e á Red Nacional para la Innovación en técnicas de preparación de muestras miniaturizadas, RED2018-102522-T (Ministerio de Ciencia, Innovación e Universidades, España). Este estudo baséase no traballo do Sample Preparation Study Group and Network, respaldado pola División de Química Analítica da Sociedade Química Europea. A.C.L. recoñece a axuda para o inicio á investigación para alumnos de máster da USC (Becas Santander) e H.G.L a bolsa de colaboración (Ministerio de Educación e Formación Profesional, España). Estes programas están cofinanciados por FEDER (UE).

Referencias

- [1] Organización Mundial de la Salud, OMS. Guía para la elaboración a nivel local: formulaciones recomendadas por la OMS para la desinfección de las manos. Disponible en: <https://apps.who.int/iris/bitstream/handle/10665/332008/WHO-IER-PSP-2010.5-spa.pdf?sequence=1&isAllowed=y>
- [2] Reglamento (UE) No. 1223/2009 del Parlamento Europeo y del Consejo de 30 de noviembre de 2009 sobre los productos cosméticos (2019). Diario Oficial de la Unión Europea, 22 de diciembre de 2019, 342, pp. 59-209. Disponible en: <https://eur-lex.europa.eu/legal-content/ES/TXT/HTML/?uri=CELEX:32009R1223&from=EN>
- [3] L. Vazquez, M. Celeiro, A. Castiñeira-Landeira, T. Dagnac, M. Llompert. *Analytica Chimica Acta*, 2022, 1203, 339650.

Comunicación C6 — Desenvolvemento de novas metodoloxías analíticas para a determinación de contaminantes persistentes, móbiles e tóxicos en augas

S. Méndez, M. Dieste, R. Montes, R. Rodil, J.B. Quintana

Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, IAQBUS – Instituto de Investigación en Análises Químicas e Biolóxicas, Universidade de Santiago de Compostela, R/ Constantino Candeira SN, 15782 Santiago de Compostela, España

Os contaminantes da auga persistentes, móbiles e tóxicos (PMTs) son unha potencial ameaza para a calidade das augas. A diferenza cos contaminantes regularmente monitorizados e regulados radica na mobilidade que presentan no medio acuático, ligada coa polaridade. Estas propiedades facilitan que os compostos penetren as barreiras naturais e artificiais do ciclo da auga aumentando a presenza destes compostos tanto no medio ambiente coma nos seres humanos, o que pode orixinar efectos prexudiciais para a súa saúde[1] [1] [1] [1] [1].

Diversos estudos realizados pola Axencia Alemaña do Medio Ambiente (UBA) entre 2010 e 2018 dirixíronse á identificación de contaminantes orgánicos (moitos deles PMTs) como produtos farmacéuticos, produtos químicos restrinxidos, substancias perfluoroalquiladas e polifluoroalquiladas, subprodutos de desinfección e disolventes [2,3]. Nestes estudos identificáronse un total de 333 substancias químicas (246 en auga potable e 187 en augas subterráneas). Ante a notoria presenza destes compostos nas augas, faise necesario desenvolver novos métodos que permitan cuantificar os PMTs en augas superficiais e residuais, co obxecto de que as autoridades poidan adoptar novas medidas de control sobre estes compostos no menor tempo posible. No entanto, a determinación destas substancias hidrofílicas representa unha gran dificultade debido á súa tendencia a permanecer na auga [4].

Neste estudo desenvólense e compáranse tres métodos de preparación de mostra seguidos da posterior análise mediante cromatografía líquida de alta eficacia acoplada a espectrometría de masas (HPLC-MS) para a determinación dunha lista de PMTs en auga superficial. Os tres métodos de preparación de mostra que se están optimizando son: a liofilización, a liofilización seguida dun paso de limpeza do extracto mediante extracción en fase sólida (SPE) con cartuchos de interacción hidrofílica (HILIC) e a SPE con cartuchos de carbón grafitizado. Unha vez optimizado o método realizarase a validación deste e así, conseguirase implementar un novo método analítico de determinación dunha lista de PMTs previamente seleccionados en mostras de auga.

Agradecementos: Este traballo está financiado pola Agencia Estatal de Investigación MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (ref. PID2020-117686RB-C32), Xunta de Galicia (ref. ED431C 2021/06) e o programa de investigadores distinguidos da USC-Fundación Santander (R. Montes).

Referencias

- [1] D. Zahn, I.J. Neuwald, T.P. Knepper, *Anal Bioanal Chem*, **2019**, 412, 4763–4784.
- [2] S.E. Hale, H.P.H. Arp, I. Schliebner, et al. *Environ Sci Eur*, **2020**, 32, 155.
- [3] S.E. Hale, H.P.H. Arp, I. Schliebner, *Environ. Sci. Technol.*, **2020**, 54, 23, 14790–14792.

[4] L.F. Angeles, D.S. Aga, *Trends in Environmental Analytical Chemistry*, **2020**, 25.

Comunicación C7 — O proceso que leva á estimación da exposición humana a substancias prexudiciais a través da análise de augas residuais con fins epidemiolóxicos

A. Estévez-Danta, R. Montes, R. Rodil, J.B. Quintana

Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, IAQBUS – Instituto de Investigación en Análises Químicas e Biolóxicas, Universidade de Santiago de Compostela, R/ Constantino Candeira SN, 15782 Santiago de Compostela, España

Dende hai varias décadas, a biomonitoraxe humana é unha ferramenta moi valiosa para estimar os niveis de exposición ou abuso a unha gran variedade de compostos prexudiciais para a saúde do ser humano, a través de campañas de recollida de urina ou sangue, principalmente [1]. Desafortunadamente, esta metodoloxía é invasiva, cara, suxeita a aspectos éticos e limitada a un número de persoas. Nos inicios do século XXI, nace a análise de augas residuais con fins epidemiolóxicos (WBE, do seu nome en inglés). A WBE baséase no feito de que os compostos xenobióticos, como por exemplo as drogas, son excretados nos ouriños na súa mesma forma ou metabolizados. Posteriormente, as mostras de urina combinadas dunha poboación acaban nas estacións de recollida de augas residuais e polo tanto, a análise desas augas residuais permite obter unha imaxe completa dos patróns de exposición ou abuso a nivel local (**Figura 1**) [2].

Debido á grande aportación que pode xerar á sociedade a información extraída das augas residuais é necesario que o proceso ata chegar á aplicación da WBE sexa rigoroso e coas menores incertezas posibles [3]. A selección de biomarcadores específicos para cada analito así como o estudo das diferentes rutas de exposición humana ao composto de interese son factores críticos para desenvolver os estudos de WBE. Por outra parte, cómpre entender o comportamento metabólico e como pode ser finalmente detectado e cuantificado o composto nas augas residuais.

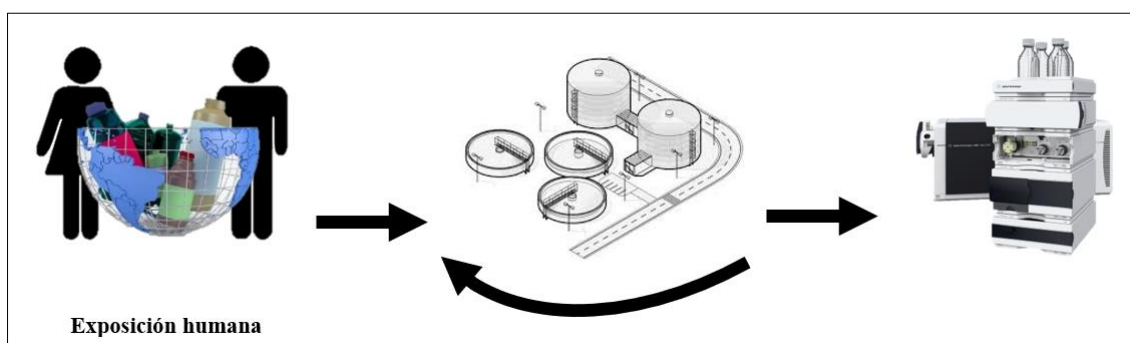


Figura 1. Esquema da metodoloxía da análise de augas residuais con fins epidemiolóxicos (WBE).

Por todo isto, neste traballo preséntase o conxunto de etapas a seguir dende que se selecciona o composto de estudo ata poder finalmente aplicar de maneira eficiente a metodoloxía da WBE, a través de casos prácticos. O proceso consiste nos seguintes pasos: (1) Selección da molécula de estudo, (2) Estudos *in vitro* e *in vivo* para a identificación de biomarcadores, (3) Estudos

farmacocinéticos, (4) Estudo da estabilidade e a exclusividade do biomarcador, (5) Desenvolvimento da metodoloxía para a cuantificación do biomarcador nas augas residuais, (6) Estimación da exposición/consumo ao composto de estudo a través da WBE.

Agradecementos: Este traballo está financiado pola Agencia Estatal de Investigación MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (ref. PID2020-117686RB-C32), Xunta de Galicia (ref. ED431C 2021/06 e ED481A-2020/258) e o programa de investigadores distinguidos da USC-Fundación Santander (R. Montes).

Referencias

[1] AM. Calafat, X. Ye, MJ. Silva, Z. Kuklenyik, LL. Needham, M. Kolossa, *International Journal of Andrology*, 2006; 29, 166-171.

[2] A. Hata, H. Hara-Yamamura, Y. Meuchi, S. Imai, R. Honda. *Science of the Total Environment* 2020, 143578, 143578-143578.

[3] S. Castiglioni, L. Bijlsma, A. Covaci, E. Emke, F. Hernández, M. Reid, *Environmental Science and Technology*, 2013, 47, 1452-1460.

Comunicación C8 — Simulación da condutividade térmica mediante cálculos *ab-initio*

J. Corral Sertal^{1,2}, V. Pardo¹, F. Rivadulla²

¹ Departamento de Física Aplicada, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, España

² Centro de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, España

Os transistores son dispositivos baseados en semicondutores que permiten amplificar, rectificar, conmutar, modular ou oscilar sinais electrónicos. A lei de Moore establece que o número de transistores nos dispositivos electrónicos duplícase cada 18 meses [1]. Coa miniaturización dos dispositivos electrónicos, vese totalmente xustificada a procura de materiais cada vez de menor tamaño que poidan actuar como transistores.

O grosor mínimo que pode ter un destes dispositivos é a monocapa atómica, sendo o representante máis coñecido deste tipo de materiais o grafeno debido á súa estrutura de bandas única e ás súas excepcionalmente altas mobilidades de portadores [2]. Pola contra, por non presentar *gap* de enerxía no plano, a súa aplicación como semiconductor nun transistor é inviable [3].

A necesidade de atopar outro tipo de materiais bidimensionais que poidan actuar como semicondutores levou ao achado dos dicalcoxenuros de metais de transición (*Transition Metal Dichalcogenides*, TMDs), sendo o primeiro deles o MoS₂, resolto por Pauling no ano 1923 [4]. Estes son unha clase de materiais caracterizados por presentar fortes enlaces covalentes no plano e febles interaccións de van der Waals (vdW) fóra del, de tal xeito que sexa posible obter espesores do material duns poucos átomos, permitindo así a súa implementación na micro e nanoelectrónica.

Un destes materiais é o Fe₃GeTe₂ (FGT, Figura 1), un material que no seu estado masivo é metálico e presenta unha temperatura de Curie (aquela baixo a cal aparece un comportamento ferromagnético) de 225 K [5]. Pola contra, conforme mingua o seu espesor, o comportamento metálico parece deixar paso a un comportamento como semiconductor [6], levando á idea de que se pode modular o comportamento do material en función do espesor.

Un dos aspectos fundamentais de toda a electrónica é a disipación da calor das súas compoñentes xerada por efecto Joule ao paso dunha corrente eléctrica. Daquela, é necesario comprender os mecanismos que gobernan a condución de calor nos materiais candidatos a empregarse en circuitos.

A propiedade que define como de ben transmiten a calor os diferentes materiais é a condutividade térmica, de tal xeito que un material cunha alta condutividade térmica é quen de disipar con maior rapidez a calor ca un material cunha menor condutividade térmica. Dentro das tres formas de transferencia de calor —radiación, convección e condución— nos sólidos o mecanismo predominante é a condución [7], é dicir, mediante colisións.

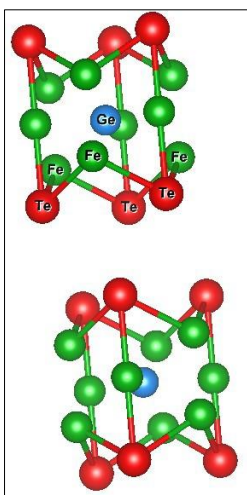


Figura 1. Bicapa de Fe_3GeTe_2 .

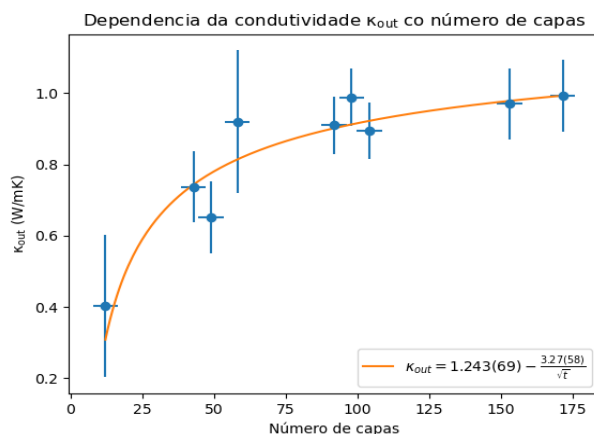


Figura 2. Condutividade térmica fóra do plano en función do espesor para o Fe_3GeTe_2 .

Dentro dos fenómenos de condución de calor nos sólidos diferénciase a contribución electrónica e a contribución fonónica ou de vibracións da rede atómica. A teoría cinética dos gases establece que a condutividade térmica virá dada pola seguinte expresión [7]:

$$\kappa = \frac{1}{2} c_v \bar{v} l$$

onde c_v é a capacidade calorífica, $\bar{v}$ a velocidade media, e l o camiño libre medio. Nos metais, debido a ter un gran número de electróns libres na banda de condución, a contribución electrónica domina sobre a fonónica debido á maior velocidade media que estes presentan na rede por atoparse espaxados na banda de condución. A contribución electrónica, dentro de marcos teóricos como a teoría de bandas ou o de mar de electróns, é relativamente sinxela de estimar. Pola contra, para semicondutores e illantes, caracterizados por dispoñer dun *gap* de enerxía entre a banda de valencia e a de condución, a contribución fonónica gana en importancia, sendo esta segunda moito máis complicada de estimar teoricamente debido aos múltiples fenómenos que inflúen nela.

No laboratorio realizouse un estudo da condutividade térmica na dirección fóra do plano do FGT en función do número de capas (Figura 2) por medio da técnica FDTR (Frequency Domain Thermoreflectance) baseada na variación da reflectividade da superficie dun transdutor en función da súa temperatura superficial. Obtívose un aumento da condutividade térmica co espesor, o cal se asocia para outros materiais de vdW cun transporte balístico de fonóns [8]. Ademais, realizando o estudo da condutividade térmica arredor da temperatura de Curie obsérvase un gran cambio nos valores da condutividade térmica, o cal pode deberse ou ben a un cambio estrutural, e así explicar a condutividade térmica por medio de fonóns, ou ben á aparición dunha orde magnética que sexa suficiente como para xustificar esta diminución na condutividade térmica.

Co fin de constatar estes resultados e entender o mecanismo principal de condución de calor no FGT, realízanse cálculos *ab-initio* de fonóns sobre o material masivo e sobre diferentes espesores de material. Estes cálculos efectúanse baixo o marco da teoría do funcional de densidade (DFT) [9]. En mecánica cuántica, as propiedades dun sistema electrónico veñen dadas pola súa función de ondas. Debido á imposibilidade de obtela para un sistema de moitos electróns por ser a función de ondas un aparello moi complexo (implicaría obter unha función das coordenadas de todas as partículas do sistema, é dicir, $3N$ graos de liberdade), a DFT baséase en que todas as propiedades dun sistema electrónico dependen unicamente da densidade electrónica, que é un escalar que depende do punto do espazo. Deste xeito, redúcese o problema de $3N$ corpos a un problema que depende soamente das tres coordenadas espaciais.

A DFT é unha teoría exacta se se coñece a expresión correcta do funcional de enerxía que representa todas as interaccións dos electróns. No marco desta teoría acádanse moi altas precisións (distancias de enlaces con precisión do 1%), especialmente para sólidos cristalinos e as súas nanoestruturas. Unha vez acadada a solución do sistema, poderán extraerse diferentes propiedades de transporte, entre as que se atopa a condutividade térmica, para finalmente, constatar os resultados experimentais.

Referencias

- [1] Gordon E Moore et al. *Moore's law at 40*. 2006.
- [2] In Edwin Abbott's. "Graphene: exploring carbon flatland". En: *Phys. Today* 60.8 (2007), p. 35.
- [3] Pulickel Ajayan, Philip Kim e Kaustav Banerjee. "van der Waals materials". En: *Phys. Today* 69.9 (2016), p. 38.
- [4] Roscoe G Dickinson e Linus Pauling. "The crystal structure of molybdenite". En: *Journal of the American Chemical Society* 45.6 (1923), pp. 1466–1471.
- [5] Hans-Jörg Deiseroth et al. *Fe₃GeTe₂ and Ni₃GeTe₂—Two New Layered Transition-Metal Compounds: Crystal Structures, HRTEM Investigations, and Magnetic and Electrical Properties*. 2006.
- [6] Suping Ma et al. "2D Magnetic Semiconductor Fe₃GeTe₂ with Few and Single Layers with a Greatly Enhanced Intrinsic Exchange Bias by Liquid-Phase Exfoliation". En: *ACS nano* (2022).
- [7] Neil W Ashcroft, N David Mermin et al. *Solid state physics*. 1976.
- [8] Aditya Sood et al. "Quasi-ballistic thermal transport across MoS₂ thin films". En: *Nano letters* 19.4 (2019), pp. 2434–2442.
- [9] Pierre Hohenberg e Walter Kohn. "Inhomogeneous electron gas". En: *Physical review* 136.3B (1964), B864.

Comunicación C9 — Catálise de reaccións de polimerización por clústeres de Ag

X. Lu

Grupo Nanomag, Instituto de Materiais (iMATUS), Universidade de Santiago de Compostela

Neste proxecto, estudamos o comportamento catalítico de clústeres cuánticos atómicos de prata (Ag AQC's) na polimerización dunha resina epoxi. A resina epoxi refírese a un termo xeral para unha clase de polímeros que conteñen máis de dous grupos epóxido na molécula. É un dos materiais máis utilizados na industria pero as súas propiedades mecánicas óptimas conséguense só despois do proceso de curado. Este proceso de curado produce o endurecemento do material polimérico mediante o entrecruzamento das cadeas. Existen moitos estudos para baixar a temperatura de curado das resinas epoxi ou para simplificar as condicións de reacción. Porén, polo que sabemos, ninguén utilizou clústeres metálicos como catalizador no proceso de curado. A diferenza da estabilidade do material metálico masivo, os clústeres cuánticos atómicos (AQC's) poden presentar algunhas propiedades químicas especiais, entre elas as propiedades catalíticas. Este comportamento xa se vén observando polos científicos desde os anos 60 na súa aplicación en varias reaccións químicas [1,2].

Durante a presente investigación descubrimos un novo procedemento de curado de resinas, usando a resina de diglicidil éter bisfenol A (DGEBA) e unha mostra que contén clústeres de prata de baixa atomicidade, no rango Ag5 - Ag15, dispersados en diacrilato de hexametileno (HDDA). A reticulación durante o curado non require da adición dos axentes endurecedores tradicionais. Ademais, é eficiente e respectuoso co medio ambiente.

O obxecto deste estudo é:

1. Explorar o efecto catalítico dos Ag AQC's, completando a falta de estudos neste campo.
2. Descubrir o posible mecanismo de reacción.
3. Explorar a posibilidade de darlles múltiples funcionalidades ás novas resinas reticuladas.

Primeiro fixemos unha serie de experimentos a temperatura ambiente para demostrar a capacidade catalítica dos clústeres de Ag. Os resultados móstranse na seguinte táboa:

4. Táboa 1. Cambio de estado da mestura nun recipiente pechado a temperatura ambiente.

	HDDA	HDDA + TOAB	HDDA + TOAB + AgAQC's	DGEBA	DGEBA + HDDA	DGEBA + HDDA + TOAB	DGEBA + HDDA + TOAB + AgAQC's
Estado inicial	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido
Estado final	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Líquido	Sólido
Polimerización	Non	Non	Non	Non	Non	Non	Si

Aos clústeres de Ag dispersados en HDDA engádeselles bromuro de tetraoctilamonio (TOAB) para controlar a síntese de clústeres.

Obsérvase que o sistema formado pola resina epoxi e os clústeres de Ag dispersados en HDDA formou un sólido insoluble a temperatura ambiente. Este é o único sistema que polimeriza e non require a participación dos axentes de curado tradicionais; polo tanto, isto suxire que os Ag AQC's poden orixinar o curado da resina epoxi DGEBA cun mecanismo descoñecido.

O proceso termodinámico foi estudado por calorimetría diferencial de varrido (DSC) dinámica, obténdose a temperatura inicial e a entalpía da reacción a diferentes velocidades de quecemento. Cabe sinalar que a unha determinada velocidade de quecemento, a curva DSC presenta dous picos; é dicir, hai dous procesos químicos que se producen entre HDDA e DGEBA.

Para comprender mellor a reacción úsase a espectroscopia infravermella para explorar o mecanismo de reacción. Comparando os espectros da mestura curada e da mestura sen reaccionar, o resultado máis notable é que a banda do grupo epóxido non cambiou dun xeito importante, mentres que a banda do dobre enlace carbono-carbono debilítase significativamente. Noutras palabras, os dobres enlaces do acrilato parecen desaparecer case por completo, ao contrario dos grupos epóxido que permanecen intactos durante a reacción. Isto non é moi habitual porque os grupos epóxido son especialmente propensos a reaccionar neste tipo de resinas. A partir de todos os cambios observados nos espectros, concluímos que a reacción ocorreu entre o dobre enlace carbono-carbono do HDDA e o enlace carbono-osíxeno do DGEBA, catalizado por clústeres de Ag. A reticulación prodúcese entre o dobre enlace do HDDA e o grupo éster do polímero lineal. Para verificar este mecanismo de reacción fixéronse tamén experimentos con outras moléculas pequenas que conteñen enlaces éter ou éster en lugar de DGEBA. Finalmente, para verificar a estrutura, usamos espectroscopia de resonancia magnética nuclear de carbono-13 (^{13}C -RMN). Os resultados obtidos non contradín o mecanismo proposto.

Polo tanto, demostrouse que os clústeres de prata catalizan a polimerización de DGEBA con HDDA para formar un novo tipo de composto reticulado que retén o grupo epóxido. Segundo estas observacións, propónse un novo mecanismo para a produción de polímeros termoestables. Os resultados sentan as bases para máis investigacións de aplicacións da nova resina curada. As propiedades mecánicas e físicas específicas do produto realizaranse en estudos posteriores. Dado que usamos clústeres de prata como catalizadores na reacción, estes tamén pasan a formar parte da composición do produto final. Isto podería darlle ao polímero obtido algunhas propiedades especiais, como antibacterianas [3] e degradación fotocatalítica de materiais [4]. En principio, o sólido termoestable obtido pola adición de clústeres de Ag debería ter tamén estas propiedades antibacterianas. Por outra banda, en vista das propiedades fotocatalíticas que presentan os clústeres, é previsible que a radiación ultravioleta cunha intensidade suficiente poida degradar oxidativamente o sólido de reticulación, degradando así o polímero, o que evita en gran medida o problema da contaminación ambiental ao final da súa vida útil. Estes obxectivos confirmaríanse en estudos posteriores.

Agradecementos: grazas aos meus titores o prof. M. Arturo López Quíntela, o prof. Carlos Vázquez Vázquez e o Dr. David Buceta Fernández. Grazas á Dra. Iria Rodríguez Arias e outros investigadores de Nanogap (<https://nanogap.es/products/antimicrobial-materials/>) polos catalizadores e a axuda facilitada. O traballo realizouse en colaboración coa empresa GAIRESA (<https://gaireisa.com>), líder internacional na formulación de resinas epoxi. Grazas polo seu apoio técnico.

Referencias

- [1] Heiz, U. , Sanchez, A., Abbet, S. , Schneider, W. D. ,1999, J. Am. Chem. Soc., *Catalytic Oxidation of Carbon Monoxide on Monodispersed Platinum Clusters: Each Atom Counts.*, 121,3214-3217
- [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.,2010, Science, *Increased Silver Activity for Direct Propene Epoxidation via Subnanometer Size Effects*, 328,224-228
- [3] Neissa, J.; Pérez-Arnaiz, C.; Porto, V.; Busto, N.; Borrajo, E.; Leal, J. M.; López- Quintela, M. A.; García, B.; Dominguez F. , Chem. Sci., 2015. *Interaction of silver atomic quantum clusters with living organisms: bactericidal effect of Ag₃*, 6, 6717-6724
- [4] Vilar-Vidal, N.; Rivas Rey, J., López Quintela, M. A., 2014, Small, *Green Emitter Copper Clusters as Highly Efficient and Reusable Visible Degradation Photocatalysts*, 10, 3632-3636

Comunicación C10 — Monocapas lipídicas como modelo de membrana en cáncer e infección: un estudo sinérxico *in vitro/in silico*

P. Antelo^{1,2}, E. Lage³, M. Casas³, A. Piñeiro², R. García-Fandiño¹

¹ Departamento de Química Orgánica, Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares, Universidade de Santiago de Compostela, Campus Vida s/n, E-15782 Santiago de Compostela, España

² Departamento de Física de Aplicada, Facultade de Física, Universidade de Santiago de Compostela, E-15782, Santiago de Compostela, España

³ Departamento de Química Física, Facultade de Farmacia, Universidade de Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, E-15782, España

As membranas lipídicas son sistemas complexos e dinámicos formados a partir de centos de diferentes tipos de lípidos combinados en proporcións específicas. Numerosas células patolóxicas presentan significantes alteracións na súa composición lipídica respecto das células sas. Por exemplo, as células infectadas por virus, cancro ou as bacterianas presentan singularidade nos perfís de lípidos, ou incluso en células senís [1].

Todas as propiedades das membranas celulares (a súa estrutura interna, a correlación dinámica entre os diferentes lípidos e a estabilidade termodinámica de todo o sistema) están determinadas a partir da composición molecular. Perturbacións mecánicas poderían destruír a célula de maneira irreversible ou podería ser transitoria se a membrana se repara de xeito espontáneo. Por este motivo, a vulnerabilidade das membranas patolóxicas a certas perturbacións é un interesante obxecto de estudo no ámbito das estratexias terapéuticas. Non obstante, existen poucos estudos sobre a conexión entre a composición da membrana e as propiedades asociadas.

As monocapas lipídicas son usadas habitualmente como modelos minimalistas das membranas celulares, sendo a composición lipídica esencial para a determinación da súa estrutura e propiedades mecánicas. Particularmente, a determinación de isotermas de adsorción para monocapas de Langmuir é sinxela de obter tanto mediante técnicas experimentais como computacionais [2,3]. As simulacións de dinámica molecular (MD) a escala atómica teñen a vantaxe de ser capaces de aportar resultados cunha alta resolución imposible de acadar mediante experimentos [4], o que suxire a potencia dun estudo sinérxico *in vitro/in silico* para a caracterización do proceso de desestabilización mecánica da membrana.

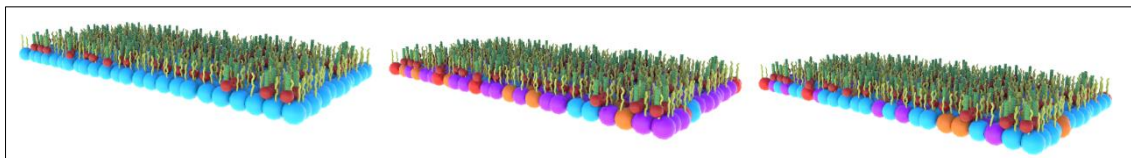


Figura 1

Neste traballo, presentaranse os resultados obtidos mediante simulacións de dinámica molecular e experimentos en balanza de Langmuir, tratando de comprender a resposta de diferentes modelos de células bacterianas e canceríxenas a esforzos mecánicos.

Referencias

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

Comunicación C11 — Novas aproximacións para afrontar o desafío das superbacterias: abordando o enzima xiquimato quinase

R. Canabal-Falcón, M. Pernas, B. Blanco, E. Lence, C. González-Bello

Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela, Jenaro de la Fuente s/n, 15782 Santiago de Compostela, España.

A capacidade dos antibióticos para curar as infeccións bacterianas está en grave perigo, debido á aparición e propagación en todo o mundo das superbacterias, microorganismos resistentes a diversos antibióticos de forma simultánea (multirresistentes). Preocupa en especial a crecente incidencia das bacterias responsables das infeccións asociadas á asistencia sanitaria (nosocomiais). Tal é o perigo que, no ano 2017, a Organización Mundial da Saúde alertou de que, se non se toman medidas urxentes, para o ano 2050 poderían morrer uns 10 millóns de persoas por ano, superando as mortes causadas polo cancro [1].

Urxe por tanto desenvolver terapias alternativas, novas entidades químicas dirixidas a dianas aínda non explotadas, e con novos mecanismos de acción, coas que ser capaces de afrontar este gran desafío.

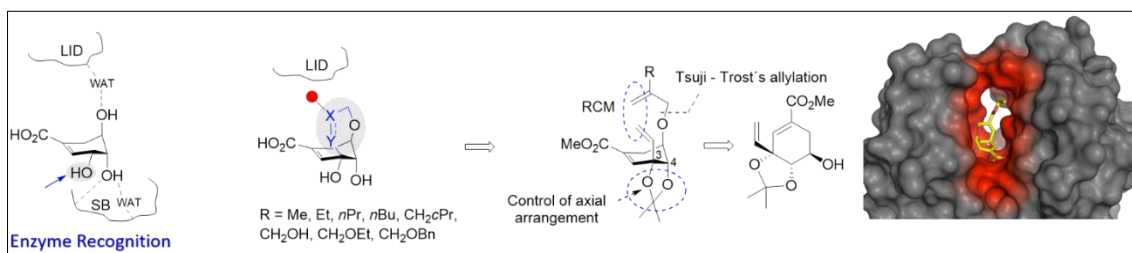


Figura 1

O enzima xiquimato quinase (SK), entre outros, está a ser explorado no noso grupo de investigación como unha destas novas dianas. O SK é un enzima esencial en (i) *Mycobacterium tuberculosis*, responsable da tuberculose; (ii) *Helicobacter pylori*, axente causante das úlceras gástricas e duodenais, e carcinóxeno de tipo I; e (iii) *Pseudomonas aeruginosa*, un dos patóxenos máis comúns nas infeccións asociadas á atención sanitaria. O SK cataliza a fosforilación estereoespecífica do grupo hidroxilo C3 do ácido xiquímico mediante a transferencia do grupo γ -fosfato do ATP ao grupo hidroxilo para proporcionar xiquimato 3-fosfato e ADP. Isto conséguese mediante unha estabilización específica da conformación de alta enerxía do ácido xiquímico. Baseándonos neste recoñecemento, aplicamos unha estratexia moi atractiva e empregada no deseño de fármacos: a preorganización da conformación do ligando e a estabilización das disposicións activas de alta enerxía requiridas por medio de restricións conformacionais [2,3].

Con este fin, sintetizáronse diversos derivados do ácido xiquímico rixidificados, empregando unha reacción de metátese de peche de anel como paso chave. A rixidificación da conformación do ligando empregouse para maximizar a eficacia dos substituíntes introducidos na ponte de

carbono éter, preorientando a súa interacción cos residuos chave e dominios do enzima esenciais para a catálise e o movemento deste. Os estudos de simulación de dinámica molecular sobre os complexos enzima/ligando revelaron marcadas diferenzas no posicionamento do substituínte do ligando no sitio activo dos dous enzimas estudados (SK de *M. tuberculosis* e *H. pylori*), o que explica a súa maior eficacia contra un dos enzimas.

Agradecementos: Agradecemos o apoio financeiro por parte do Ministerio de Ciencia e Innovación de España (PID2019-105512RB-I00), a Xunta de Galicia [ED431C 2021/29 e Centro singular de investigación de Galicia acreditación 2019–2022 (ED431G 2019/03)] e o Fondo Europeo de Desenvolvemento Rexional.

Referencias

- [1] WHO Global priority list of antibiotic-resistant bacteria to guide research, discovery, and development of new antibiotics. http://www.who.int/medicines/publications/WHO-PPL-Short_Summary_25Feb-ET_NM_WHO.pdf?ua=1. February 27, 2017.
- [2] B. Blanco et. al. J. Am. Chem. Soc. 2013, 135, 12366–12376
- [3] M. Pernas et. al. Org. Chem. Front. 2019, 6, 2514–2528.

Comunicación C12 — Moléculas miméticas do PVA, para a inhibición da recristalización do xeo

S. Falcón Fariña

Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares e Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela, Calle Jenaro de la Fuente, s/n, Campus Vida. 15782 Santiago de Compostela

O control do proceso de recristalización do xeo e a capacidade de influír nel é dunha grande importancia científica e tecnolóxica dada a importancia que ten a conxelación en moitos ámbitos da nosa vida.

A recristalización do xeo en disolucións acuosas acontece a través dun proceso denominado maduración de Ostwald [1]. Este é un proceso termodinámico polo cal os cristais de xeo grandes medran a expensas dos máis pequenos (Figura 1). Como resultado temos un aumento do tamaño medio dos cristais de xeo e unha diminución do número total destes, o que resulta, nunha redución xeral da enerxía libre do sistema e nun dano para a conservación dos materiais conxelados.

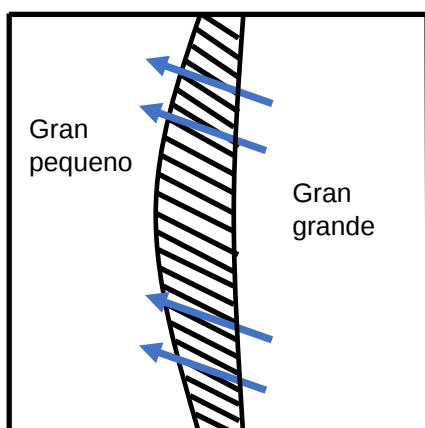


Figura 1

Para evitar o proceso de recristalización do xeo son dunha grande utilidade os inhibidores da recristalización do xeo (IRI). Trátase de sistemas moleculares capaces de evitar o crecemento dos cristais de xeo e son de grande utilidade en medicina (criopreservación de tecidos e células) [2], na agricultura (conservación de alimentos) [3] e noutros tantos campos.

O grande obstáculo para o deseño de moléculas con actividade IRI e a falta dun modelo que explique as interaccións que se producen entre as moléculas e o xeo, o que permitiría explicar por que certas moléculas teñen actividade IRI e outras non.

Este traballo baseámolo en dous tipos de sistemas moleculares que presentan actividade IRI.

Un destes sistemas son os polímeros, onde destaca o PVA [4]], un polímero polidisperso, que amosou unha grande actividade IRI e do que se prepararon e estudaron polímeros de ata 20 unidades, pero do que nunca se prepararon polímeros máis pequenos. (1, Figura 2)

O outro sistema son as moléculas de baixo peso molecular, onde destaca un traballo realizado polo prof. R. Ben [5] sobre a actividade IRI amosada pola n-octilamida da D-glicosa (**2**, Figura 2), sendo esta, ata a data, a molécula de baixo peso molecular con maior actividade IRI.

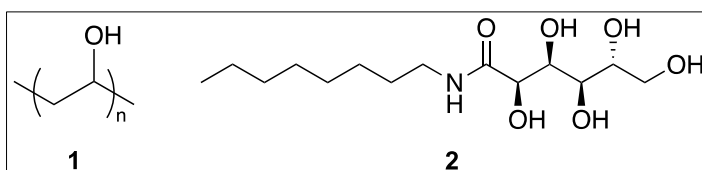


Figura 2

Como consecuencia destes dous resultados de estruturas con actividade IRI, obtidos en paralelo e de xeito individual, propoñemos a síntese e estudo de propiedades IRI de moléculas derivadas da n-octilamida da D-glicosa (**2**) nas que, desosixenando de xeito selectivo a molécula de D-glicosa en diferentes posicións (**3** e **4**, Figura 3), chegamos a mimetizar un dímero de PVA (**5**, Figura 3) para, deste xeito, ver se unidades moleculares moi pequenas que mimeticen a estrutura do PVA son capaces tamén de presentar actividade IRI.

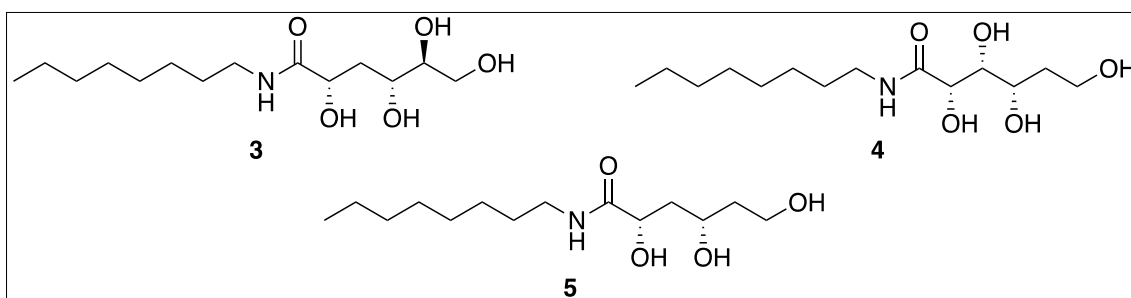


Figura 3

Referencias

- [1] Budke, C.; Heggemann, C.; Koch, M.; Sewald, N.; Koop, T. *Ice Recrystallization Kinetics in the Presence of Synthetic Antifreeze Glycoprotein Analogues Using the Framework of LSW Theory*. *J Phys Chem B* 2009, 113 (9), 2865–2873.
- [2] Jang, T. H.; Park, S. C.; Yang, J. H.; Kim, J. Y.; Seok, J. H.; Park, U. S.; Choi, C. W.; Lee, S. R.; Han, J. *Cryopreservation and Its Clinical Applications*. *Integr Med Res* 2017, 6 (1), 12–18.
- [3] Ustun, N. S.; Turhan, S. *Antifreeze Proteins: Characteristics, Function, Mechanism of Action, Sources and Application to Foods*. *J Food Process Preserv* 2015, 39 (6), 3189–3197
- [4] Bachtiger, F.; Congdon, T. R.; Stubbs, C.; Gibson, M. I.; Sosso, G. C. *The Atomistic Details of the Ice Recrystallisation Inhibition Activity of PVA*. *Nat Commun* 2021, 12 (1), 1323
- [5] Nagao, M.; Sengupta, J.; Diaz-Dussan, D.; Adam, M.; Wu, M.; Acker, J.; Ben, R.; Ishihara, K.; Zeng, H.; Miura, Y.; Narain, R. *Synthesis of Highly Biocompatible and Temperature-Responsive Physical Gels for Cryopreservation and 3D Cell Culture*. *ACS Appl Bio Mater* 2018, 1 (2), 356–366

Comunicación C13 — Deseño de novas moléculas fluorescentes para a visualización celular

P. Fulias, A. Rioboo, J.J. Reina, I. Lostalé, J. Montenegro

Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Universidade de Santiago de Compostela (USC), 15782, A Coruña

A fluorescencia é unha técnica de caracterización moi empregada en química biolóxica polas múltiples vantaxes que presenta (sinxeleza, baixo custo, sensibilidade...). Para entender o fundamento desta técnica temos que irnos aos espectros moleculares dos compostos, é dicir, ao “documento de identidade” molecular. En cada un destes espectros temos diferentes niveis enerxéticos, sendo o nivel fundamental, o nivel no que están as moléculas cando non teñen exceso de enerxía. Para que as moléculas poidan cambiar de nivel necesitan un axente externo que as promova, neste caso, irradiación de luz, que non é máis ca unha forma de enerxía. Unha vez que conseguen chegar a algún dos niveis superiores excitados (o nivel acadado vai depender sempre da enerxía inicial irradiada) estas van perder a enerxía adquirida e van volver ao estado fundamental, o que se traduce en emisión fluorescente (Figura 1).

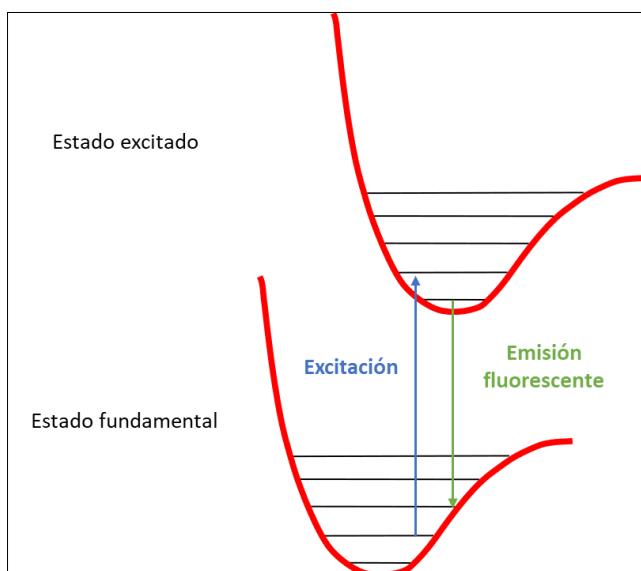


Figura 1. Esquema do diagrama enerxético molecular para a emisión fluorescente dos fluoróforos.

O emprego destas moléculas, fluoróforos, como etiquetas moleculares permite marcar moléculas e a súa visualización en tempo real para analizar mellor o comportamento delas. Na biomedicina empréganse para marcar fármacos e coñecer a ruta de internalización, para deste xeito mellorar a eficacia [1]. Dentro da familia dos fluoróforos temos moitas categorías, no entanto, os fluoróforos sensibles ao pH e/ou ratiométricos son especialmente útiles para o seguimento da internalización e os ensaios *in vivo* con sondas inofensivas no organismo obxecto de estudo. Este tipo de probas fluorescentes van permitir detectar cambios de pH do medio no que se atopa a nosa molécula marcada grazas a que vai emitir de xeito diferente se está en medio ácido ou se está en medio básico. É por iso que imos ver cores distintas dependendo do pH (Figura 2). Polo

tanto, estas moléculas son excelentes ferramentas para obter información valiosa sobre as vías de internalización e as áreas diana dos novos axentes terapéuticos [2]. Non obstante, o difícil acceso sintético a estas sondas ratiométricas dificulta a súa incorporación nas moléculas de interese como fármacos hidrófilos, péptidos, proteínas ou ácidos nucleicos.



Figura 2. Comportamento ácido-base dun fluoróforo observado baixo luz natural (esquerda) e luz ultravioleta (dereita).

Neste proxecto imos comparar dúas probas fluorescentes ratiométricas e sensibles ao pH, unha comercial (C5.6. SNARF-1) e outro derivado sintetizado por nós (C5. SNARF-2F). Fíxose un estudo químico-físico das propiedades de ambos e analizouse o seu custo sintético.

Referencias

- [1] Cheng, Z., Kuru, E., Sachdeva, A. et al. *Nat. Rev. Chem.* 2020, 4, 275–290. b) Fernández A., Vendrell, M. *Chem. Soc. Rev.* 2016, 45, 1182-1196 c) Lavis L.D., Raines R. T. *Acs Chem. Biol.* 2014, 9, 855–866.
 [2] Méndez-Ardoy, A., Reina, J. J., Montenegro, J., *Chem. Eur. J.* 2020, 26, 7516-7536.

Comunicación C14 — Inactivando a resistencia innata de *Pseudomonas aeruginosa* aos antibióticos con sulfonopenicilinas

B. Casabella¹, D. Rodríguez¹, E. Lence¹, J. Arca-Suarez², A. Beceiro², C. González-Bello¹

¹ Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela, 15705 Santiago de Compostela.

² Servizo de Microbioloxía do Complexo Hospitalario Universitario da Coruña (CHUAC), Instituto de Investigación Biomédica da Coruña (INBIC), 15006 A Coruña.

A Organización Mundial da Saúde identificou a *Pseudomonas aeruginosa* como un patóxeno multirresistente de prioridade crítica contra o cal urxen novas terapias. Esta ameaza emerxente é o resultado da complexa interacción entre mutacións cromosómicas deste patóxeno resultando na resistencia antimicrobiana innata, o aumento da transmisión horizontal de elementos xenéticos desencadeando mecanismos de resistencia de amplo espectro, e a irrupción de cepas de alto risco en hospitais de xeito global. Estes mecanismos permítenlles ás bacterias escapar non soamente das comunmente usada penicilinas e cefalosporinas, senón tamén dos carbapenems, o último recurso para o tratamento de cepas multirresistentes. *P. aeruginosa* é capaz de regular os niveis de resistencia baixo demanda pola hiperprodución da b-lactamase de clase C codificada no seu cromosoma (AmpC), e a inhibición desta enzima por inhibidores de b-lactamases converteuse nunha estratexia florecente para restaurar a eficacia dos antibióticos. No noso grupo de investigación desenvóléronse recentemente diversas 6-arilmetilidensulfonopenicilinas cun mecanismo de acción innovador capaz de bloquear a resistencia innata de *P. aeruginosa* dirixíndose cara a un peto enzimático inexplorado. Un aducto de indolicina resistente á hidrólise xérase *in situ* logo da unión enzima-inhibidor, capaz de interaccionar coa entrada de tipo túnel do centro activo inducindo un pregamento da hélice H10, indicando o potencial deste peto pouco explorado no deseño de fármacos.¹ A optimización deste esqueleto permitiunos mellorar e ampliar o espectro de acción destes compostos.

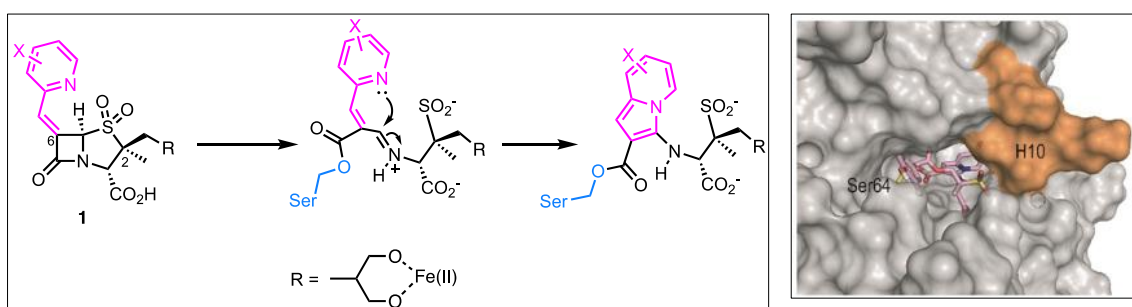


Figura 1

Agradecementos: Apoio económico do Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2019-105512RB-I00), Xunta de Galicia [ED431c 2021/29 e acreditación Centro singular de investigación de Galicia 2019-2022 (ED431G 2019/03)] e ao ERDF.

Referencias

[1] J. C. Vázquez-Ucha et al. *J. Med. Chem.* 2021, 64, 6310-6328.

Comunicación C15 — Avaliación da presenza de residuos de funxicidas e insecticidas en cervexa mediante cromatografía de líquidos e espectrometría de masas en tándem.

T. Arias, M. Ramil, I. Rodríguez

Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, IAQBUS – Instituto de Investigación en Análises Químicas e Biolóxicas, Universidade de Santiago de Compostela, R/ Constantino Candeira SN, 15782 Santiago de Compostela, España

Os pesticidas úsanse extensivamente para protexer os cultivos na agricultura. O uso de fitosanitarios está regulado a nivel europeo polo Regulamento (CE) nº 1107/2009 e o Regulamento (CE) nº 396/2005 [1,2]. A lexislación vixente fai referencia a compostos autorizados para o seu uso, doses recomendadas, e valores máximos de residuos (MRLs) en produtos de orixe vexetal, entre eles froitas, verduras e cereais [3]. Durante a produción de alimentos elaborados, unha fracción dos pesticidas presentes nas materias primas usadas poden pasar ao produto final. Nestes casos, a normativa non establece valores límites para os produtos elaborados. Ao obxecto de fixar estes valores nun futuro, e avaliar o risco para os consumidores, están a tratarse de establecer os denominados factores de transferencia, que fan referencia á relación de concentracións existentes no produto elaborado fronte ás medidas nas materias primas de orixe vexetal.

A cervexa é a bebida de fermentación máis consumida a nivel mundial. O seu proceso de elaboración é relativamente complexo, e multietapa, empregando dous grupos diferentes de materias primas de orixe vexetal: o cereal (normalmente cebada) e as flores de lúpulo. Tanto o cultivo de cereais como do lúpulo emprega cantidades considerables de diversos pesticidas, e máis concretamente de insecticidas e funxicidas. Unha parte destes compostos podería alcanzar o produto final.

O obxectivo deste estudo é desenvolver un método multi-analito, que permita a determinación de residuos de pesticidas en mostras de cervexa con diferentes características en canto á súa orixe, contido en etanol, etc, con límites de cuantificación inferiores a 1 ng/mL. A selección de compostos realizouse en función dos datos de consumo no cultivo do cereal, dispoñibles en MAPA. O procedemento deseñado contempla unha etapa de concentración das mostras mediante extracción en fase sólida, seguida do uso UPLC-QqQ-MS como técnica de determinación. En comparación con procedementos previos, como o método QuEChERS, reduciuse o consumo de disolventes orgánicos e a manipulación das mostras, mantendo valores de exactitude no rango de 80%-120% e alcanzando LOQs inferiores a 1 ng/mL, para a maioría dos compostos considerados. Unha vez validado o protocolo analítico, procesáronse mostras de diferentes orixes, identificando varios compostos presentes de forma habitual en cervexas comerciais. Entre eles destacan os funxicidas boscalid, dimethomorph, miclobutanil e mandipropamida.

Agradecementos: Programa Investigo para a contratación de persoas mozas demandantes de emprego (MRR) na realización de iniciativas de investigación e innovación, no marco do Plan de Recuperación, Transformación e Resiliencia. Xunta de Galicia polo financiamento recibido mediante o Programa de apoio a Grupos de Referencia Competitiva (ED431C 2021/06).

Referencias

[1] Regulation (EC) No 1107/2009 of the European Parliament and of the Council of 21 October 2009 concerning the placing of plant protection products on the market and repealing Council Directives 79/117/EEC.

[2] Regulamento (CE) nº 396/2005 do Parlamento Europeo e do Consello, do 23 de febreiro de 2005 relativo aos límites máximos residuais de plaguicidas en alimentos e piensos de orixe vexetal e animal e que modifica a Directiva 91/414/CEE do Consello Texto pertencente a efectos do EEE.

[3] Sante, D.G. (n.d.) EU Pesticides Database (v.2.2) Search Pesticide Residues. Retrieved October 3, 2022, from <http://ec.europa.eu/food/plant/pesticides/eu-pesticides-database/mrls/?event=search.pr>

Comunicación C16 — Determinación de axentes químicos procedentes de caucho de pneumáticos en auga

A. Duque-Villaverde¹, D. Armada¹, L. Vázquez¹, C. Nogueira-Blanco¹, T. Dagnac², M. Llompart¹

¹ CRETUS, Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, Universidade de Santiago de Compostela, E-15782, Santiago de Compostela, España

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

O caucho dos pneumáticos contén unha gran cantidade de axentes químicos necesarios para a súa duración e resistencia. Estes compostos poden introducirse no medio ambiente mediante as partículas de desgaste. Unha forma de reciclado dos pneumáticos fóra de uso é a súa trituración para obter un granulado de caucho utilizado en campos de céspede artificial ou en pavimentos de parques infantís. Os lixiviados de auga deste tipo de superficie contribúen á introdución dos axentes químicos do caucho nos ecosistemas acuáticos [1,2]. Entre as substancias de estudo neste traballo atópanse o antiozonante 6PPD (N-(1,3-dimethylbutyl)-N'-phenyl-p-phenylenediamine) a partir do que se pode formar como produto de degradación a 6PPDq (N-(1,3-Dimethylbutyl)-N'-phenyl-p-phenylenediamine-quinone), cuxa presenza no medio acuático parece estar asociada coa morte do salmón prateado (*Oncorhynchus kisutch*) no noroeste do Pacífico [3]. Os aditivos vulcanizantes e reticulantes son, entre outros, axentes químicos de interese polas súas implicacións no medio ambiente e na saúde humana [4,5].

O obxectivo deste traballo é o desenvolvemento dunha metodoloxía analítica para a detección simultánea de axentes químicos do caucho de pneumáticos en auga baseada na microextracción en fase sólida (SPME), seguida de cromatografía acoplada a espectrometría de masas en tándem. Para levar a cabo a optimización do proceso utilizarase deseño factorial. Tras a optimización, procederase á validación da metodoloxía. Posteriormente, aplícase a mostras reais de auga que poden estar afectadas por contaminación debida ao caucho, determinando a presenza e concentración destas substancias perigosas.

Agradecementos: Este traballo é financiado polos proxectos RETOS PID2019-104336RB-I00, UNST10-1E-491 (Ministerio de Ciencia e Innovación, España), e ED431 2020/06, IN607B 2019/13 e IN607B 2022/15 (Xunta de Galicia). Este estudo baséase no traballo e Rede de Estudo de Preparación de Mostras apoiado pola División de Química Analítica da Sociedade Europea de Química. A.D.V. agradece a axuda da bolsa de colaboración (Ministerio de Educación e Formación Profesional, España). C.N.B. agradece á bolsa para a iniciación a investigación no CRETUS (Consellería de Cultura, Educación e Universidade da Xunta de Galicia). Todos estes programas están cofinanciados por FEDER (UE).

Referencias

- [1] M. Celeiro, T. Dagnac, M. Llompart, *Chemosphere*, 2018, 195, 201-211
- [2] M. Celeiro, D. Armada, N. Ratola, et. al., *Chemosphere*, 2021, 270, 128610.
- [3] Z. Tian, H. Zhao, K. T. Peter, et al., *Science*, 2021, 371 (6525), 185-189
- [4] K. Müller, D. Hübner, S. Huppertsberg, *Science of The Total Environment*, 2022, 802, 149799
- [5] C. Johannessen, P. Helm, C. D. Metcalfe, *Environmental Pollution*, 2021, 287, 117659

Comunicación C17 — Desenvolvemento dun método para a determinación de biomarcadores do uso de cannabinoides mediante a análise de augas residuais con fins epidemiolóxicos

C. Pernas-Fraguela, X. González-Gómez, A. Estévez-Danta, R. Montes, R. Rodil, J. B. Quintana

Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, IAQBUS – Instituto de Investigación en Análises Químicas e Biolóxicas, Universidade de Santiago de Compostela, R/ Constantino Candeira SN, 15782 Santiago de Compostela, España

O cánnabis é a substancia ilegal máis consumida en España e, practicamente, en todo o mundo. Nos últimos anos diversos países e territorios legalizaron o consumo desta droga con fins terapéuticos e/ou recreativos. Ademais, comezaron a comercializarse diversos produtos con cannabidiol (CBD) polos seus supostos beneficios para a saúde, dado que este composto non presenta actividade psicoactiva. Por outra banda, o 9-tetrahidrocannabinol (Δ^9 -THC) é o composto presente no cánnabis con propiedades psicoactivas, o cal está relacionado con numerosos efectos prexudiciais para a saúde [1].

Por todo isto, cómpre dispoñer de metodoloxías que permitan seguir de forma veraz e rápida o consumo de cannabinoides. Neste sentido a análise de augas residuais con fins epidemiolóxicos [2] é unha ferramenta altamente útil e complementaria a outros indicadores, como poden ser as enquisas. Por tanto, o obxectivo deste traballo foi o desenvolvemento dunha metodoloxía analítica para a determinación dos metabolitos hidroxilados e carboxilados do CBD e Δ^9 -THC, ademais das propias substancias e os seus ácidos precursores, o ácido tetrahidrocannabinólico (THCA) e o ácido cannabidiólico (CBDA). Tamén se determinou a presenza de cannabinol (CBN), de maneira que se poida ter unha visión o máis completa posible do consumo deste tipo de substancias.

Con este fin, estudáronse etapas críticas do proceso analítico como son a filtración e o axuste do pH das mostras, así como as diferentes condicións da extracción en fase sólida (*online* e *offline*), e a posterior determinación mediante cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS). Desta forma, observouse que era necesario lavar os filtros con metanol e engadir patróns marcados isotopicamente antes desta etapa para minimizar e corrixir, respectivamente, a perda por adsorción dos analitos máis hidrófobos na etapa de filtración.

Tras desenvolver a metodoloxía analítica, esta validouse obténdose límites de cuantificación do método inferiores a 5 ng/L e recuperacións analíticas no rango 102–130 %, cunha desviación estándar relativa inferior ao 25 %.

Finalmente, analizáronse mostras de tres localidades españolas distintas. Os resultados amosan presenza de Δ^9 -THC (10–47 ng/L), dos seus metabolitos (23–201 ng/L) e do seu precursor ácido (34–141 ng/L). No caso do CBD, só foi posible detectar este composto (9–55 ng/L), non sendo posible detectar nin o seu precursor ácido nin os seus metabolitos, o que pode indicar unha exposición tópica pero non un consumo oral nin por inhalación. Pola súa parte, o CBN foi atopado tamén nas tres localizacións (3–14 ng/L).

Agradecementos: Este traballo está financiado polo Instituto de Salud Carlos III e os fondos da Unión Europea do Plan de Recuperación y Resiliencia-NextGenerationEU (ref. RD21/0009/0012), a Agencia Estatal de Investigación MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (ref. PID2020-117686RB-C32) e a Consellería de Cultura, Educación e Universidades da Xunta de Galicia (ref. ED431C 2021/06). Carlos Pernas-Fraguela agradece ao Ministerio de Educación y Formación Profesional o financiamento da súa bolsa de colaboración.

Referencias

- [1] L. Bijlsma, D. A. Burgard, F. Been, C. Ort, J. Matías, V. Yargeau, in *Comprehensive Analytical Chemistry* vol. 90, I. Ferrer, E. M. Thurman (Eds.), Amsterdam, Elsevier, 2020, pp. 453-482
- [2] L. Bijlsma, A. Celma, I. González-Mariño, C. Postigo, V. Andreu, M.J. Andrés-Costa, F. Hernández, M. López de Alda, E. López-García, R.M. Marcé, R. Montes, E. Pocurull, Y. Picó, R. Rodil, J.L. Rodríguez-Gil, Y. Valcárcel, J.B. Quintana, *Revista Española de Salud Pública*, 2018, 92 (2018) e201808053

Comunicación C18 — Estudo do metabolismo *in vitro* de contaminantes orgánicos

M. Lage-Díaz, A. Estévez-Danta, I. Riveiro, R. Montes, R. Rodil, J. B. Quintana

Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, IAQBUS – Instituto de Investigación en Análises Químicas e Biolóxicas, Universidade de Santiago de Compostela, R/ Constantino Candeira SN, 15782 Santiago de Compostela, España

Hoxe en día estamos expostos a unha grande cantidade de substancias químicas resultado do importante papel que xogan no desenvolvemento da nosa sociedade. Como contrapartida, estas substancias supoñen un potencial perigo para a nosa saúde e o medio natural. Ante esta situación, a biomonitoraxe humana (BMH) é unha ferramenta de grande interese xa que vai reportar información sobre a nosa exposición a diversos contaminantes. Para levar a cabo a BMH débese facer uso de mostras biolóxicas como sangue, urina, pelo... De entre todas, a máis empregada é a urina xa que se trata dunha mostra que se obtén facilmente ao ser non invasiva. Con todo, para poder obter datos dela debemos coñecer cales son os produtos de excreción dos contaminantes estudados, de tal xeito que o coñecemento do metabolismo humano tórnase fundamental.

O metabolismo humano é sumamente complexo e nel interveñen enzimas moi diferentes, pero é posible levar a cabo unha aproximación a ese metabolismo mediante experimentos *in vitro* ou *in silico*. Os experimentos *in vitro* baséanse na recreación do metabolismo a través da combinación de material biolóxico (por exemplo microsomas hepáticos humanos), enzimas, cofactores e as condicións de pH e temperatura adecuados [1]. Pola súa banda, nos experimentos *in silico* empréganse softwares que, a través de ecuacións matemáticas, deducen os posibles metabolitos a formar. Así pois, debido a que estes últimos non reportan información experimental son interesantes en combinación cos experimentos *in vitro* ou *in vivo* [2].

Para coñecer cales son os metabolitos formados nos experimentos *in vitro* precisamos analizar as mostras mediante cromatografía acoplada a espectrometría de masas co fin de separar e detectar os diferentes metabolitos. Neste punto pódese levar a cabo o tratamento de datos mediante *suspect screening* ou *non target screening* [3]. No primeiro caso buscarase nas mostras os metabolitos preditos cos experimentos *in silico* mentres que no segundo caso farase unha análise estatística para detectar diferenzas significativas entre as mostras nas que non se deben observar metabolitos (controis negativos) e as mostras nas que sería posible atopalos. Tras estas análises obterase unha listaxe dos metabolitos formados nos experimentos *in vitro* coa que se poderá comprobar se en mostras reais (urina) tamén se detectan, permitindo levar a cabo a biomonitoraxe humana dos contaminantes de interese.

Agradecementos: María Lage Díaz agradece á Fundación Segundo Gil Dávila o financiamento da súa bolsa de ampliación de estudos en química. Este traballo está financiado pola Agencia Estatal de Investigación MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (ref. PID2020-117686RB-C32), Xunta de Galicia (ref. ED431C 2021/06 e ED481A-2020/258) e o programa de investigadores distinguidos da USC-Fundación Santander (R. Montes).

Referencias

- [1] C. Gysa, A. Kovačičb, C. Huberd, F. Y. Laia, E. Heathb, A. Covacia, *Toxicology Letters*, 2018, 295, 115-123.
- [2] E. Benfenati, G. Gini, S. Hoffmann, R. Luttk, *Alternatives to laboratory animals*, 2010, 38, 153-166.
- [3] P. Vervliet, O. Mortelé, C. Gys, M. Degreef, K. Lanckmans, K. Maudens, A. Covaci, A. L.N. van Nuijs, F. Y. Lai, *Drug testing and analysis*, 2019, 11, 479-491.

Comunicación C19 — Acetileno: uso na química sintética e potenciais aplicacións en reaccións de carboboración

A.M. Álvarez-Constantino, A. Chaves-Pouso, M. Fañanás-Mastral

Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Universidade de Santiago de Compostela, 15705 Santiago de Compostela, España.

O deseño e desenvolvemento de métodos sintéticos para acadar produtos de alto valor engadido, dende moléculas simples e abundantes, sitúase como unha das máis importantes misións da química sintética. Neste contexto, o acetileno, o alquino máis simple con fórmula molecular C_2H_2 , sitúase como unha molécula interesante para o seu uso como materia prima.

Este obtívose historicamente mediante o *procesamento do carburo cálcico*, o cal usa o carbón como fonte de carbono e dá lugar a acetileno como único produto. Porén, dende a segunda metade do século 20, a economía moveuse cara ao uso do petróleo e como conseqüente impúxose o craqueo como fonte de hidrocarburos [1].

Con este cambio de dinámica, o interese do acetileno diminuíu, tornándose o seu aproveitamento nunha aplicación de nicho. Pola contra, dada a actual crise petrolífera e as abundantes reservas de carbón de países como China, a obtención de acetileno dende o carbón volveu gañar posicións como método alternativo de produción de hidrocarburos [1].

Por outra banda, cómpre resaltar a versatilidade dos alquinos como substancias de partida para dar lugar a moléculas complexas e multifuncionais [2]. Recentemente, o noso grupo publicou a alilboración de alquinos, catalizada por cobre, usando bromuros alílicos e dicloruros alílicos xeminais cun excelente control sobre a enantio- e a diastereoselectividade [3,4].

Neste contexto, imaxinamos o uso do acetileno como material de partida neste tipo de reaccións, o que nos permitiría acceder a 1,4-dienos, estruturas de especial relevancia dada a súa presenza en multitude de produtos naturais [5]. Ademais, resultaría na formación de dúas olefinas disubstituídas con dous grupos funcionais ortogonais, con total control da diastereoquímica e un novo centro quiral definido.

Referencias

[1] P. Pässler, W. Hefner, K. Buckl, H. Meinass, A. Meiswinkel, H.-J. Wernicke, G. Ebersberg, R. Müller, J. Bässler, H. Behringer, D. Mayer *Acetylene in Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*; Wiley VCH: Weinheim, 2011

[2] T. R. Pradhan, Prof. J. K. Park *Chem Chem. Eur. J.*, 2022, 28, e202202120

[3] E. Rivera-Chao, M. Mitxelena, J.A. Varela, M. Fañanás-Mastral *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2019, 58, 18230-18234

[4] A. Chaves-Pouso, A.M. Álvarez-Constantino, M. Fañanás-Mastral *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2022, 61, e202117696

[5] G. Petruncio, Z. Shellnutt, S. Elahi-Mohassel, S. Alishetty, M. Paige *Nat. Prod. Rep.* 2021, 38, 2187-2213

Comunicación C20 — Estudo do proceso de desulfuración dun ligando tiocarbohidrazona para a obtención dun ligando azina

U. Barreiro-Sisto, S. Fernández-Fariña, I. Velo-Helene, M. Martínez-Calvo, A. M. González-Noya, R. Pedrido

Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Campus Vida, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 ,Santiago de Compostela, España

A desulfuración é un proceso que consiste nunha reacción de oxidación na cal ten lugar a eliminación dun átomo de xofre dando lugar á formación dun novo esqueleto orgánico e dun composto xofrado. Este proceso, amplamente estudado para os ligandos tiosemicarbazona e os seus complexos derivados, ten interese tanto polo produto de xofre liberado, como polo esqueleto orgánico resultante [1]. Neste último caso destaca a utilidade da desulfuración para xerar diferentes heterociclos orgánicos nitroxenados.

Ata hai pouco, só se atopara na literatura un exemplo deste proceso para ligandos tiocarbohidrazona [2]. O noso grupo de investigación atopou que, tras a síntese dun ligando tiocarbohidrazona funcionalizado con grupos ter-butilo, formábase como subproduto un ligando azina. Os ligandos azina presentan grande interese dentro do campo da química de coordinación debido á súa capacidade para coordinarse a diversos ións metálicos mediante interaccións covalentes e non covalentes dando lugar a unha ampla variedade de complexos derivados con diferentes nuclearidades e estruturas [3].

Tendo isto en conta, nesta comunicación preséntase o estudo do factor tempo na obtención dun ligando azina H_2L^1 por medio dun proceso de desulfuración dun ligando tiocarbohidrazona H_2L (Figura 1). Ademais, as diferentes técnicas de caracterización empregadas e a bibliografía consultada [4] permitiron propoñer un mecanismo plausible para o proceso de desulfuración.

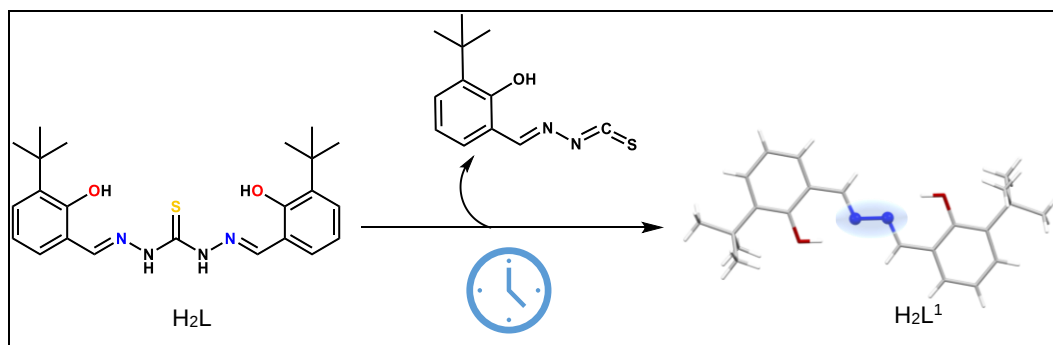


Figura 1. Obtención do ligando azina H_2L^1 por medio da desulfuración da tiocarbohidrazona H_2L .

Agradecementos: Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria, Xunta de Galicia, 2017GRCGI-1682 (ED431C2017/01), 2018GRCGI-1584 (ED431C2018/13), MetalBIONetwork (ED431D2017/01). Do Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades, METALBIO (CTQ2017-90802-REDT). Do Ministerio de Ciencia e Innovación (MCIN), MultiMetDRUGS (RED2018-102471-T) e Proxecto PID2021-127531NB-I00 (AEI/10.13039/501100011033/FEDER, UE).

Referencias

- [1] R. Pedrido, M. J. Romero, M. R. Bermejo, M. Martínez-Calvo, A. M. González-Noya, G. Zaragoza, *Dalton Trans.*, **2009**, 39, 8329–8340.
- [2] K. Kassim, M. A. Hamali, B. Yamin, *J. Chem.*, **2019**, 1-6.
- [3] L. Wang, Q. Su, Q. Wu, W. Gao, Y. Mu, *Comptes Rendus Chimie*, **2012**, 12, 463–470.
- [4] I. Chaaban, E. S. M. El Khawass, M. A. Mahran, H. A. Abd El Razik, N. S. El Salamouni, *J. Saudi Chem. Soc.*, **2016**, 20, 547–552.

Comunicación C21 — Nanomateriais híbridos $\text{TiO}_2/\text{SnO}_2$ – clústeres de prata para o seu uso na degradación fotocatalítica de contaminantes

M. Moreno Pérez¹, C. Vázquez Vázquez¹, D. Buceta Fernández², M. A. López Quintela¹

¹ Laboratorio de Magnetismo e Nanotecnoloxía (NANOMAG), Instituto de Materiais da USC (iMATUS), Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela

² NANOGAP SUB-NM POWDER S.A., Polig. Ind. Novo Milladoiro, 15895 Milladoiro, Ames.

Os microcontaminantes consisten nunha gran cantidade de substancias de orixe natural e antropoxénico, presentes en concentracións traza, principalmente en augas residuais. Estes contaminantes poden alterar os procesos bioquímicos, o crecemento e a reprodución dos organismos vivos do medio [1].

Os fotocatalizadores tradicionais empregados para a súa eliminación, como o TiO_2 , teñen o inconveniente de que só absorben na rexión ultravioleta, con eficiencias moi baixas pola rápida recombinación electrón-oco fotoxerados cando se irradian cunha luz ultravioleta. Demostrouse recentemente que os clústeres cuánticos atómicos (AQC's) poden modificar a banda prohibida do TiO_2 , facendo que os semicondutores tradicionais absorban na rexión visible [2].

No presente traballo, sintetizáronse e caracterizáronse nanomateriais híbridos $\text{SnO}_2/\text{TiO}_2$ para o seu uso en reaccións fotocatalíticas como substratos para os clústeres. Para a deposición dos clústeres empregouse a técnica de impregnación seca ou *incipient wetness impregnation*.

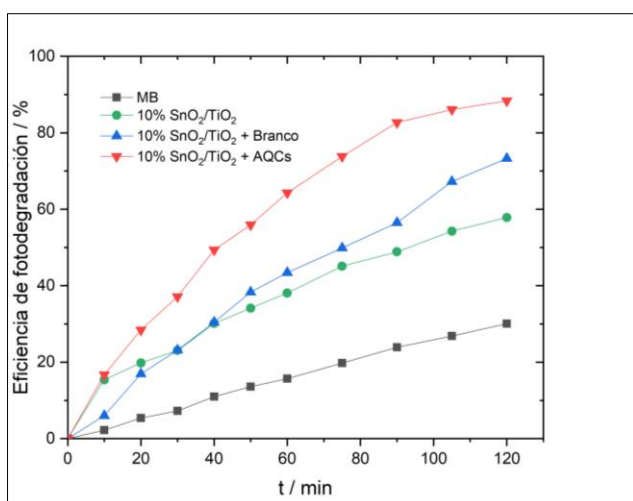


Figura 2. Eficiencia de fotodegradación do azul de metileno só (MB), en presenza do catalizador de 10% $\text{SnO}_2/\text{TiO}_2$, e con branco e mostra de AQC's depositados no substrato 10% $\text{SnO}_2/\text{TiO}_2$.

Posteriormente, estudouse por espectroscopia UV-Vis e reflectancia difusa como o proceso de deposición mellora as propiedades ópticas dos materiais, incrementando a absorción de luz visible mediante a aparición de estados de enerxía intermedios permitidos (*midgaps*) na banda prohibida dos semicondutores, o que fai a estes materiais moi interesantes para reaccións fotocatalíticas [2]. Como aplicación destes nanomateriais, estudouse a fotodegradación de azul

de metileno en auga empregando un simulador solar. Ademais, optimizáronse parámetros importantes en fotocátalise, como a deposición dos AQCs, a concentración de catalizador, ou a estabilidade temporal do catalizador.

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 ED431C 2021/16, cofinanciado por fondos FEDER (UE). Os autores tamén agradecen o uso das instalacións científicas do RIAIDT-USC e a NANOGAP SUB-NM-POWDER S.A. a subministración dos AQCs de prata.

Referencias

[1] Å. Bergman, J. J. Heindel, T. Kasten, K. A. Kidd, S. Jobling, M. Neira, R. T. Zoeller, G. Becher, P. Bjerregaard, R. Bornman, et al., *Environ. Health Perspect.* 2013, 121, 104.

[2] M. Pilar de Lara-Castells, A. W. Hauser, J. M. Ramallo-López, D. Buceta, L. J. Giovanetti, M. A. López-Quintela, F. G. Requejo, *J. Mater. Chem. A* 2019, 7, 7489.

Comunicación C22 — Complexos dinucleares de cobre(II) como modelos de metaloenzimas

I. Velo-Helena, U. Barreiro-Sisto, S. Fernández-Fariña, M. Martínez-Calvo, R. Pedrido, A. M. González-Noya

Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Campus Vida, Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago de Compostela, España

O deseño e a síntese de arquitecturas metalosupramoleculares que imitan os sitios activos de metaloenzimas suscitaron grande interese nos últimos anos, xa que estes modelos artificiais permítenos comprender a función e o mecanismo de acción destas enzimas. O estudo destes modelos biomiméticos podería permitir o desenvolvemento de sistemas con propiedades semellantes ás das metaloenzimas naturais [1,2].

Na natureza existe unha ampla variedade de enzimas derivadas de ións metálicos, capaces de catalizar unha ampla gama de reaccións en condicións suaves e con alta selectividade [3,4]. Neste traballo, preséntase a síntese e caracterización de complexos dinucleares de cobre(II) como posibles modelos de metaloenzimas redox naturais como a catalase, a superóxido dismutase ou a peroxidase.

Para isto deseñouse unha familia de ligandos bistiosemicarbazona H_3L^n ($n=1$, $R=Me$; $n=2$, $R=Et$; $n=3$, $R=Ph$) pentadentados $[N_2S_2O]$ capaces de estabilizar complexos de cobre(II). Os complexos dinucleares neutros de cobre(II) $[Cu_2L^n(OH)]$ (Figura 1) preparáronse mediante unha metodoloxía electroquímica. Estes complexos foron caracterizados en estado sólido e en disolución, resultando ser entidades tetranucleares de tipo $[Cu_2L^n(OH)]_2$.

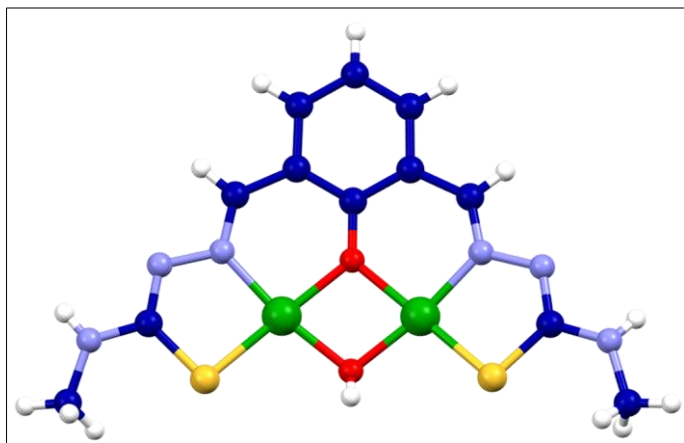


Figura 1. Complexo dinuclear de cobre(II) $[Cu_2L^1(OH)]$.

Agradecementos: Este traballo está financiado pola Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria, Xunta de Galicia, 2017 GRC GI-1682 (ED431C 2017/01), 2018 GRC GI-1584 (ED431C 2018/13), MetalBIO Network (ED431D 2017/01); pola CDTI e Fondos Tecnolóxicos, co apoio do Ministerio de Economía, Industria e Competitividade IISCIII/PI19/001248; polo Ministerio de Ciencia, Innovación e Universidades, MultiMetDRUGS (RED2018-102471-T); pola Unión Europea, Interreg AlertoxNet EAPA-317-2016, Interreg Agritox EAPA-998-2018, e H2020 778069-EMERTOX. FECYT por Efervescencia e Regueifas de Ciencia.

Referencias

- [1] J. N. Rebilly, B. Colasson, O. Bistrí, D. Over, O. Reinaud, *Chem. Soc. Rev.*, 44 (2015) 467.
- [2] L. Rouco, A.M. González-Noya, R. Pedrido, M. Maneiro, *Antioxidants*, 9 (2020) 727.
- [3] T. Himiyama, Y. Okamoto, *Molecules*, 25 (2020) 2989.
- [4] S. M. Jung, M. Yang, W. J. Song, *Inorg. Chem.*, 61, (2022) 12433.

Comunicación C23 — Estudo da agregación de péptidos de β -amiloide con técnicas de fluorescencia

S. Illodo^{1,2,3*}, H. Lee³, F. Rodríguez-Prieto¹, M. Novo², W. Al-Soufi², S. Lee³

¹ Centro de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Departamento de Química Física, Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago de Compostela, España.

² Departamento de Química Física, Facultade de Ciencias, Universidade de Santiago de Compostela, 27002, Lugo, España.

³ Pusan National University, Department of Chemistry, 46241, Busan, Corea do Sur.

O número de doentes con enfermidades neurodexenerativas como o Alzheimer leva en continuo ascenso durante as últimas décadas. Porén, hoxe en día non existe ningunha cura para esta. Uns dos principais responsables da aparición desta doenza son os β -amiloides, proteínas presentes no noso organismo cuxos agregados se poden atopar nos cerebros das persoas con dita patoloxía [1-3].

Os amiloides son proteínas altamente desordenadas cunha gran tendencia á agregación en fibras. Crese que é durante as etapas temperás desta agregación onde se producen as especies neurotóxicas que provocan a aparición do Alzheimer. Debido a isto, o estudo do proceso da agregación e da inhibición dos amiloides, en todos os estadios desta, para a súa caracterización é de grande interese.

Por iso, leváronse a cabo estudos tanto de agregados iniciais como de fibras de amiloide con técnicas de fluorescencia. Por unha banda, a microscopia de alta resolución de fluorescencia permite o estudo e a caracterización da agregación dos amiloides a fibras mediante a adquisición de imaxes e vídeos tanto *in vitro* como *in vivo*. Pola outra, a espectroscopia de correlación de fluorescencia (FCS) permite a caracterización de agregados máis pequenos, incluso a nivel de moléculas individuais [4].

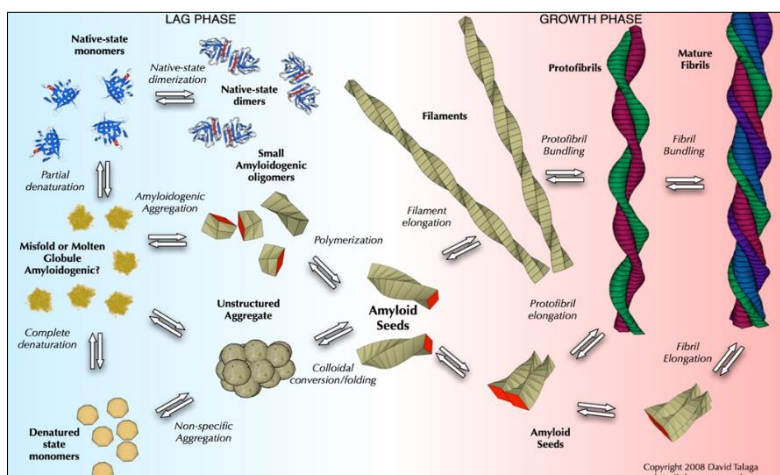


Figura 1. Esquema da agregación dos amiloides [5].

Agradecementos: *S.I agradécelle á Xunta de Galicia polo contrato predoutoral e á Xunta de Galicia e á Fundación Nacional de Investigación de Corea do sur (National Research Foundation of Korea-NRF) o financiamento da estadía predoutoral. Ademais, agradecemos tamén o financiamento do Ministerio (Proxecto PID2020-120378RB-I00), da Xunta de Galicia (ED431B 2019/18 e ED431G 219/03) e da Unión Europea (FEDER).*

Referencias

- [1] S. J. C. Lee, E. Nam, H. J. Lee, M. G. Savelieff, M. H. Lim, *Chem Soc Rev*, 2017, 46, 310-323.
- [2] P.T. Lansbury, H. A. Lashuel, *Nature*, 2006, 443, 774-779
- [3] J. C. Lee, S. J. Kim, S. Hong, Y. S. Kim, *Experimental and Molecular Medicine*, 2019, 51
- [4] M. Novo, S. Freire, W. Al-Soufi, *Sci Rep*, 2018, 8, 1783
- [5] *Investigation of amyloid beta peptide aggregation by small angle neutron scattering and complementary methods.* B. Zhang-Haagen, Düsseldorf, Heinrich Heine de Düsseldorf, 2016

Comunicación C24 — Amidas anfifílicas e bolanfílicas derivadas do ácido (-)-xiquímico. Síntese e estudo das súas propiedades

P. López Carracedo

Centro de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Rúa de Jenaro de la Fuente, s/n, 15705 Santiago de Compostela, A Coruña, Galicia, España

A parede celular é un dos maiores limitantes á hora de empregar fármacos, pois o paso dunha molécula dende o exterior da célula ao interior está moi restrinxido. O método empregado polo propio corpo humano é o transporte transmembrana, proteínas que se encontran na parede celular con sitios de recoñecemento, que permiten o paso de certas moléculas segundo o receptor que presentan. Baseándose neste método, pódense crear células dendríticas con receptores moi variados, que permiten o recoñecemento mediante as proteínas transmembrana e facilitan o seu paso a través da parede celular. Desta maneira, modificando os receptores de células dendríticas artificiais segundo a proteína transmembrana diana, pódense xerar vacinas ou medicamentos que só se dirixan a certo tipo de células, como poden ser as tumorais [1-3].

Os receptores de D-manosa son receptores transmembrana que están expresados na superficie das células. Estes actúan recoñecendo os grupos manosa terminais en proteínas, abrindo unha canle de paso ao interior da célula. Empregando estes receptores como diana, demostrouse que liposomas con grupos cabezas de manosa son moi prometedores como transportadores transmembrana de fármacos.

Derivado destes resultados, pensouse no uso de grupos que imiten a D-manosa (**1**) para crear novos liposomas que melloren o recoñecemento e así o transporte dos fármacos ao interior da célula. Para isto, os grupos xiquimoílo **2** e quinoílo **3**, que teñen a mesma estereoquímica que a D-manosa en 3 dos seus hidroxilos, foron os mellores candidatos (Figura 1). Tras probar varios liposomas con grupos cabeza xiquimoílo e quinoílo, observouse que ambos foron máis eficaces á hora de xerar unha resposta en células dendríticas *ex vivo* que os propios grupos manoílo [4].

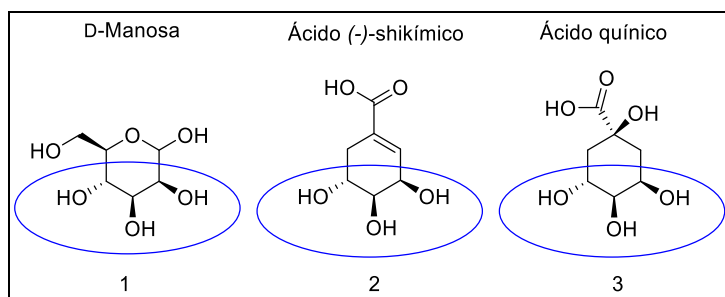


Figura 3. Estruturas de D-manosa, ácido (-)-xiquímico e ácido quínico

Baseándonos nestes resultados, decidimos tratar de xerar liposomas partindo de moléculas anfifílicas e bolanfílicas sinxelas derivadas do ácido (-)-xiquímico, co obxectivo final de poder probalas como portadores transmembrana de fármacos.

Sintetizamos unha serie de amidas anfifílicas e bolanfílicas, acoplado ao ácido (-)-xiquímico (**2**) unha serie de amidas alquílicas con diferente lonxitude de cadea (8, 12 e 16). Obtivemos así

as amidas recollidas na Figura 2, sendo o grupo de amidas **4** derivadas de alquilaminas, e o grupo de amidas **5** derivadas de alquildiaminas.

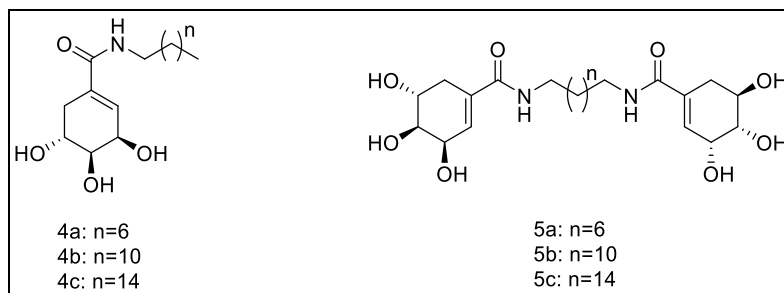


Figura 4. Amidas anifílicas (**4**) e bolanfílicas (**5**) derivadas do ácido (-)-xiquímico

Estas moléculas sometéronse a probas de nucleación co fin de obter liposomas non catiónicos, atopándose que a molécula bolanfílica **5b** xera liposomas en disolucións acuosas. Este descubrimento foi confirmado por microscopia (Figura 3) e DLS.

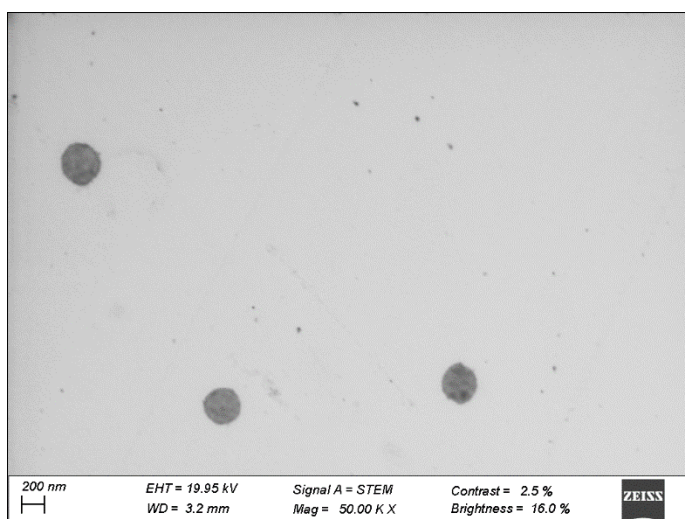


Figura 5. Liposomas da molécula **5b**, de 200 nm de diámetro.

A estrutura e actividade destes liposomas está aínda a ser investigada.

Referencias

- [1] R.C. reddy, S. Mukherjee, C. R. Patra and A. Chaudhuri, *Nanoscale*, 2019, DOI: 10.1039/C8NR10293G
- [2] D.C. Díaz-Quiroz, C.S. Cardona-Félix, J.L. Viveros-Ceballos, M.A.Reyes-González, F. Bolívar, M. Ordoñez and A. Escalante, *Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry*, 2018, 33:1, 397-404, DOI: 10.1080/14756366.2017.142225
- [3] F. Girardin, *Dialogues Clin Neurosci.*, 2006, 8(3), 311-321, DOI: 10.31887/DCNS.2006.8.3/fgirardin

[4] C. Voshavar, R.C.R. Meka, S. Samanta, S. Marepally and A. Chaudhuri, *Journal of Medicinal Chemistry*, 2017, 60, 1605-1610, DOI: 10.1021/acs.jmedchem.6b01556

Comunicación C25 — Exploración estrutural dun ciclopéptido para a súa autoensamblaxe de 1D a 2D.

L. Méndez, S. Díaz, I. Insua, J. Montenegro.

*Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS).
Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela.*

Os péptidos e as proteínas son biomoléculas esenciais que participan nunha ampla gama de funcións biolóxicas, dende o transporte a través das membranas ata a comunicación celular. As proteínas poden realizar estas sofisticadas tarefas aproveitando o preciso ordenamento espacial dos seus bloques de construción, os aminoácidos. Neste sentido, unha secuencia específica de aminoácidos pode orixinar motivos de pregamento secundario (por exemplo, hélice ou folla), que se combinan secuencialmente nos diferentes dominios dunha estrutura proteica terciaria. Ademais, a ensamblaxe de varias unidades proteicas conduce á orde máis alta na organización dos aminoácidos: as estruturas proteicas cuaternarias. Así, a natureza aproveita a ordenación xerárquica das funcionalidades químicas no espazo para dotar ás proteínas de estruturas e funcións moi específicas. A pesar da nosa comprensión do pregamento das proteínas, o deseño racional de pequenos péptidos sintéticos que poidan someterse a unha autoensamblaxe con niveis crecentes de complexidade expón un gran reto dende o punto de vista supramolecular.

Neste traballo descríbese a autoensamblaxe xerárquica dun octapéptido cíclico en nanotubos unidimensionais (1D), cuxa superficie anfifílica impulsa a súa asociación lateral como nanofollas bidimensionais (2D). As transicións reversíbeis entre os estados de ensamblaxe, dispersión e agregación das nanofollas dotan a estes materiais 2D dun comportamento *self-healing* desencadeado por estímulos externos. A exploración estrutural desta secuencia de péptidos permitiu establecer as relacións básicas de estrutura-ensamblaxe que rexen a autoensamblaxe xerárquica de 1D a 2D destes péptidos sintéticos.

Este traballo non só constitúe un novo mecanismo de autoensamblaxe supramolecular en dúas dimensións, senón que tamén dá acceso a unha nova clase de biomateriais 2D con núcleos ocultos compostos por nanotubos peptídicos aliñados, o que pode abrir o acceso a novos biomateriais supramoleculares cunha estrutura sen precedentes e potenciais aplicacións biomédicas e tecnolóxicas.

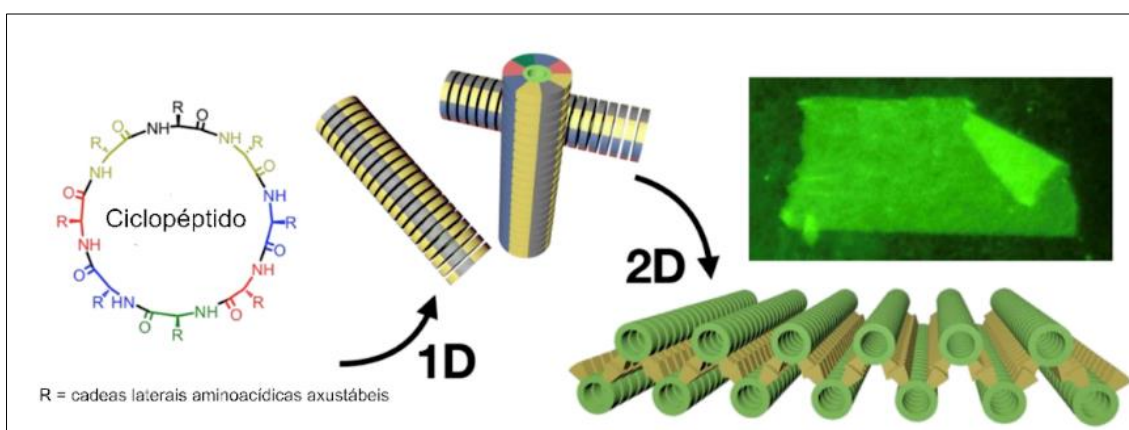


Figura 1

Referencias

[1] Insua I., Montenegro J., *J. Am. Chem. Soc.*, 2020, 142, 300-307.

[2] Díaz S., Insua I., Bhak G., Montenegro J., *Chem. Eur. J.*, 2020, 26, 14765.

Comunicación C26 — Ciclopéptidos nas portas celulares, unha alternativa ós fármacos convencionais?

A. Cabezón¹, J. Granja¹, A. Pineiro², R. Garcia-Fandino¹

¹ Departamento de Química Orgánica, Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Universidade de Santiago de Compostela, CiQUS, España.

² Grupo de Materia Branda e Biofísica Molecular, Departamento de Física Aplicada, Facultade de Física, Universidade de Santiago de Compostela, España.

O número crecente de patóxenos capaces de resistir os antibióticos empregados na actualidade creceu nos últimos anos ata converterse, para a OMS, nun dos problemas principais no ámbito da saúde a nivel global [1]. Este fenómeno, malia ser un proceso natural, estase vendo acelerado polo mal uso dos fármacos tanto en persoas como en animais, e está a dificultar o tratamento de enfermidades infecciosas, que poden chegar a converterse en intratables. En consecuencia, moita investigación estase a dedicar á busca de novos fármacos que presenten un mecanismo de acción diferente e, por tanto, non sexan propensos a inducir a aparición de resistencia nas bacterias [2]. Nesta liña, emerxeu nos últimos tempos unha nova clase de moléculas coñecidas como péptidos terapéuticos, os cales terían como diana específica a composición lipídica tanto de células cancerixenas como de bacterias. Entre os péptidos terapéuticos podemos atopar os ciclopéptidos (CPs), os cales idealmente serían inocuos en disolución, pero en presenza dun ambiente que favoreza os enlaces de hidróxeno intermoleculares, serían capaces de formar a especie activa, os nanotubos peptídicos (SCPNS). Os CPs presenta a peculiaridade de estar formados por aminoácidos *D* e *L* alternados. Esta alternancia na quiralidade dá lugar a unha estrutura de anel plano na que os grupos amino e carbonilo quedan perpendiculares ó plano do anel permitindo a autoensamblaxe por medio da formación de enlaces de hidróxeno semellantes ós dunha lámina β [3].

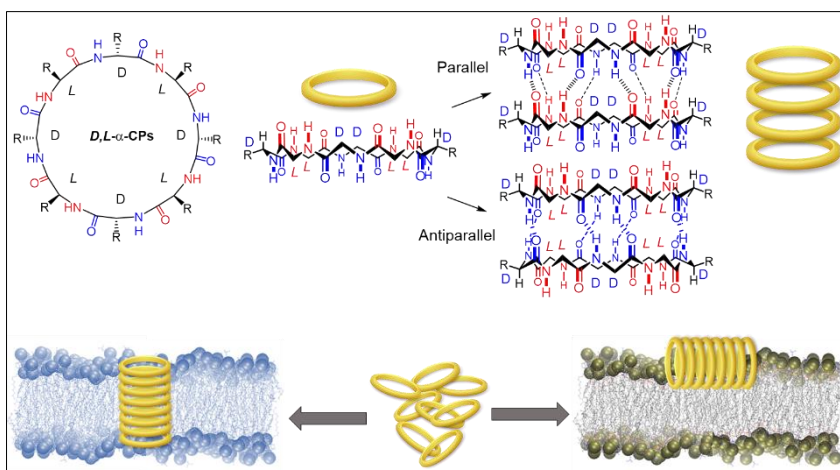


Figura 1. Representación en 2D e esquemática (anel dourado) dun ciclopéptido con quiralidade alternante *D/L* e as interaccións tipo lámina β que pode presentar. Abaixo, represéntanse as disposicións que pode adoptar respecto a unha membrana.

Aínda que se propuxeron varios mecanismos de acción para explicar o funcionamento dos CPs, aínda non se coñece con claridade como estas moléculas son capaces de matar bacterias. Ata agora, o baixo grao de resolución a nivel molecular das técnicas experimentais non permite

acadar un entendemento completo do funcionamento destas moléculas. Neste respecto, as simulacións de dinámica molecular emerxeron como unha ferramenta que pode proporcionar a información necesaria para acadar un entendemento completo e de alta resolución sobre os mecanismos de acción dos CPs [4]. Por tanto, simulacións de dinámica molecular de CPs en presenza de membranas con diferente composición lipídica estanse levando a cabo co obxectivo de elucidar os mecanismos de acción destas moléculas o que permitirá nun futuro mellorar o seu deseño e efectividade.

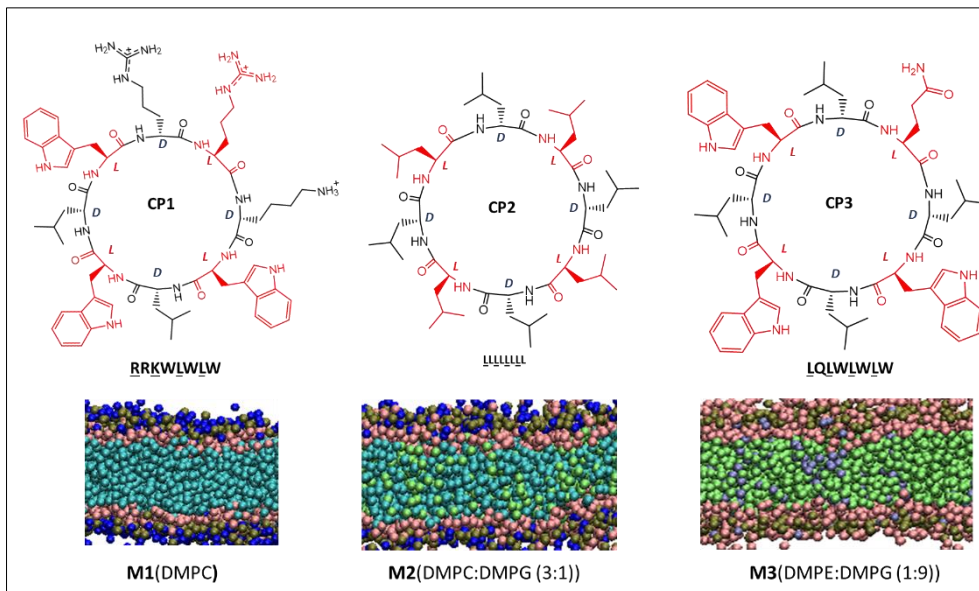


Figura 2. Arriba represéntanse as secuencias en 2D dos ciclopéptidos empregados neste estudo. Abaixo, represéntase unha visión lateral das membranas empregadas na simulación.

Agradecementos: Este traballo foi financiado pola Axencia Estatal de Investigación (AEI) e o ERDF (RTI2018-098795-A-I00, PID2019-111327GB-I00, PID2019-111126RB-I00 e PDC2022-133402-I00), pola Xunta de Galicia e o ERDF (ED431F 2020/05, ED431B 2022/36, ED431C 2017/25 e a acreditación como Centro singular de investigación de Galicia 2016-2019, ED431G/09). R.G.-F. agradece ó Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades polo contrato “Ramón y Cajal” (RYC-2016-20335). Todos os cálculos foron levados a cabo no Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA).

Referencias

- [1] WORLD HEALTH ORGANIZATION. Antibiotic Resistance. Dispoñible en: <https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/antibiotic-resistance>
- [2] Lohner, K. *General Physiology and Biophysics*, 2009, 28, 105-106.
- [3] Fernandez-Lopez, S., Kim, H.S., Choi, E.C, et al. *Nature*, 2001, 412, 452-455
- [4] Claro, B., González-Freire, E., Calvelo, M., et al. *Colloids Surfaces B Biointerfaces*, 2020, 196, 111349

Comunicación C27 — Estudo da asociación supramolecular de alta afinidade mediante fluorescencia

J. Seijas^{1,2*}, F. Rodriguez², W. Al-Soufi¹, M. Novo¹

¹ Departamento de Química Física, Facultade de Ciencias, Universidade de Santiago de Compostela, Lugo, España

² Centro de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Departamento de Química Física, Universidade de Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, España

TX-100 é un surfactante non iónico (Figura 1) con tendencia a formar micelas en medios acuosos debido á súa estrutura molecular, na que conta cunha zona hidrofóbica e unha zona hidrofílica. Por outra banda, o NBD-PC é un fosfolípido marcado co fluoróforo NBD (Figura 2), polo que é altamente hidrofóbico, con propiedades espectroscópicas que permiten o seu estudo mediante técnicas de fluorescencia. Nun medio acuoso e en presenza de TX-100 o NBD-PC entraría dentro da micela formada polo surfactante cunha gran constante de asociación o que levará a unha dinámica lenta de intercambio entre o fosfolípido dentro das micelas e o fosfolípido fóra das micelas (Figura 3).

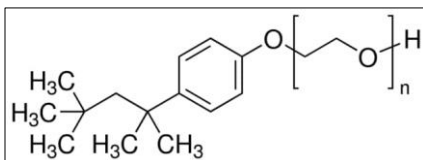


Figura 1.: Molécula de TX-100

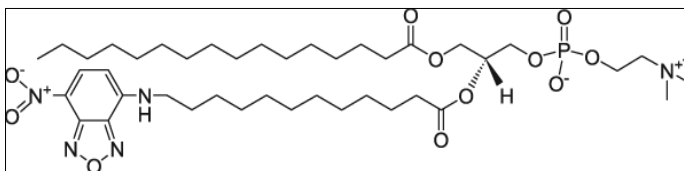


Figura 2. Fosfolípido marcado con NBD

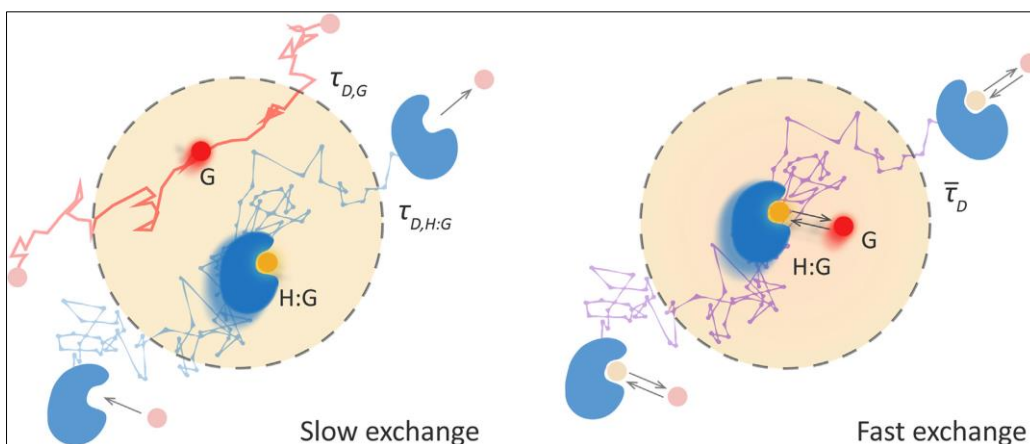


Figura 3: Esquema dos procesos de intercambio supramolecular lento (esquerda) e rápido (dereita) pasando polo foco dun detector de FCS [1].

O estudo desta interacción entre as devanditas moléculas empregando técnicas espectroscópicas convencionais, como a fluorescencia de estado estacionario, a anisotropía de fluorescencia e a fluorescencia resolta no tempo, así como técnicas de moléculas individuais

como a espectroscopia de correlación de fluorescencia (FCS) permitiu caracterizar este proceso de asociación supramolecular.

Agradecementos: Agradecemos o financiamento da Xunta de Galicia—Axencia Galega de Innovación (proxectos ED431B 2016/024, R2016/007, ED431B 2019/18 e IN852D 2021/5).

Referencias

[1] M. Novo, W. Al-Soufi, *Front. Chem.*, 2022, 10:1042658.

Comunicación C28 — Como usar o intercalador laranxa de tiazol para a detección e cuantificación de ADN de dobre cadea

S. Hernández, L. Piñeiro, M. Novo, W. Al-Soufi

Departamento de Química Física, Facultade de Ciencias, Universidade de Santiago de Compostela, E-27002 Lugo, España

O desenvolvemento de técnicas para a detección e cuantificación eficientes e rápidas vén crescendo nos últimos anos, considerando a súa aplicación en diagnósticos clínicos e descubrimento de fármacos [5,6]. O uso da detección por fluorescencia ofrece unha serie de vantaxes como unha técnica relativamente simple, sensible e selectiva [6].

As sondas de oligonucleótidos usadas para a detección de cadeas hibridadas e non hibridadas non distinguen a fluorescencia dunha sonda unida (hibridada) de outra non unida, por isto é necesaria unha hibridación en fase sólida seguida dun lavado para eliminar as sondas non unidas. Este tipo de detección require tempo e fai que sexa máis complicado un seguimento a tempo real [6]. Por esta razón o uso de técnicas de fluorescencia con intercaladores como o laranxa de tiazol (TO) presentan vantaxes e ter unha boa aplicación para a detección e cuantificación de ADN hibridado.

O TO é un colorante intercalador de ADN con potencial aplicación para a detección de dobres cadeas de ADN (dsDNA) e para a súa cuantificación durante a amplificación mediante a reacción en cadea da polimerase (PCR). Isto débese a que o TO practicamente non emite fluorescencia cando está en disolución acuosa pero emite case 20000 veces máis cando está unido ao dsDNA [1]. Na bibliografía descríbense altas constantes de afinidade para a complexación do TO co dsDNA, así como estudos da selectividade do TO para avaliar o seu potencial como intercalador [2,3]. Tamén se estudaron as interaccións do TO con outras conformacións do ADN como os G-cuadruplexos [4].

A intercalación ocorre cando o ligando ten un tamaño óptimo e unha natureza química tal que lle permite ao intercalador encaixar entre os pares de base do ADN. Aínda así, a afinidade entre o intercalador (TO no noso caso) e a dsDNA pode variar debido ás condicións experimentais, especialmente a carga e a concentración do catión presente na solución.

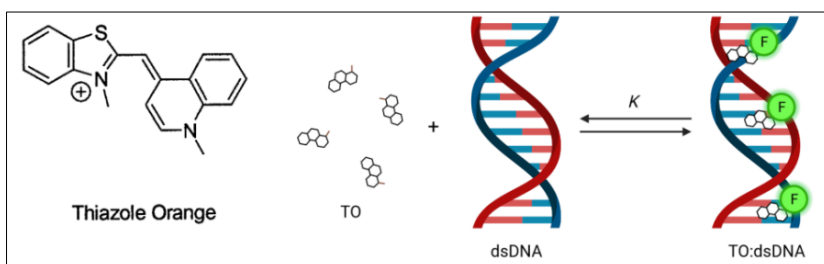


Figura 1. Esquerda: Estrutura molecular do TO. Dereita: Esquema da interacción entre TO e dsDNA.

Neste traballo realizamos medidas de espectroscopia de fluorescencia de estado estacionario e de tempos de vida de fluorescencia para estudar a interacción entre o TO e o dsDNA e analizar

os efectos da concentración e carga do catión na constante de unión usando NaCl e MgCl₂. Tamén se estudou o posible efecto do tamaño das cadeas de dsDNA na constante de afinidade, usando cadeas cortas tipo *hairpin* ou cadeas longas como o Lambda-DNA.

Agradecementos: Esta investigación foi financiada polo Goberno de España—Ministerio de Economía e Competitividade (proxecto CTQ2014-59020-R) e pola Xunta de Galicia—Axencia Galega de Innovación (proxectos ED431B 2016/024, R2016/007, ED431B 2019/18 e IN852D 2021/5).

Referencias

- [1] H. S. Rye, S. Yue, D. E. Wemmer, M. A. Quesada, R. P. Haugland, R. A. Mathies, A. N. Glazer, *OUP*, 1992, 20, 2803-2812.
- [2] J. Nygren, N. Svanvik, M. Kubista *Biopolymers* 1998, 46, 39-51.
- [3] D. L. Boger, W. C. Tse, *Bioorganic Med. Chem.* 2001, 9, 2511–2518.
- [4] D. Monchaud, C. Allain, M. P. Teulade-Fichou, *Nucleosides Nucleotides Nucleic Acids* 2007, 26, 1585–1588.
- [5] T. Vilaivan, *Beilstein J. Org. Chem.*, 2018, 14, 253-281.
- [6] N. Svanvik, G. Westman, D. Wang, M. Kubista, *Analytical Biochemistry*

Comunicación C29 — Sondas fluorescentes sensibles á contorna para a caracterización de interaccións biomoleculares

D. Cora¹, A. Arias Rodríguez¹, A. Hervés Pardavila¹, M. Novo², F. Rodríguez Prieto¹

¹ 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.

² Departamento de Química Física, Facultade de Ciencias, Universidade de Santiago de Compostela, E-27002 Lugo, España.

As sondas fluorescentes sensibles á contorna poden cambiar a súa intensidade de fluorescencia ou lonxitude de onda de emisión como resposta a cambios na polaridade, viscosidade ou orde molecular da microcontorna [1]. Isto fainas de especial interese na monitorización de interaccións ou caracterización de biomoléculas, con numerosas aplicacións como a investigación biomédica ou a diagnose clínica [2].

Nesta comunicación intentamos describir os mecanismos que lle dan ás sondas a súa sensibilidade á contorna, e expoñemos un exemplo concreto coa sonda 6-amino-2-ciano-1,3-benzotiazol (ACB), amplamente estudada no noso grupo.

O ACB sofre un proceso de transferencia de carga no estado excitado que aumenta o seu momento dipolar, o que fai que a súa emisión cambie coa polaridade da contorna. Deste xeito, o ACB é un bo candidato para a cuantificación de proteínas, como a seroalbumina bovina e humana e proteínas amiloides, formadas por 40 ou 42 aminoácidos, en distintos graos de agregación, estando estas proteínas relacionadas coa orixe de enfermidades dexenerativas como o Alzheimer [3,4].

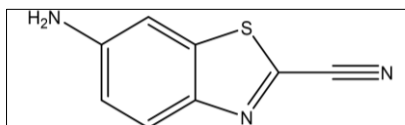


Figura 1. Estrutura molecular do 6-amino-2-ciano-1,3-benzotiazol.

Agradecementos: Agradecemos a financiación deste traballo ao Goberno de España (Proxecto PID2020-120378RB-I00), á Xunta de Galicia (Proxecto ED431B 2019/18 e Acreditación de Centro Singular de Investigación de Galicia ED431G 2019/03), e á Unión Europea (FEDER).

Referencias

- [1] A. S. Klymchenko, *Acc. Chem. Res.*, 2017, 50, 366-375.
- [2] A. S. Klymchenko & Y. Mely, *Prog. Mol. Biol. Transl. Sci.*, 2013, 113, 35-58.
- [3] J. Cummings et al., *Alzheimer's Dement.*, 2022, 8(1), 2352-8737.
- [4] M. Boada et al., *Alzheimer's Dement.*, 2020, 16(10), 1412-1425

COMUNICACIÓNS PREMIADAS

Comunicacións premiadas

Premio do público en categoría máster

Comunicación (C-3) — Adrián López Teijeiro

Construíndo nanorreactores enzimáticos utilizando o sistema IC-Tagging: procura de solucións aos retos da industria dende un enfoque biotecnolóxico

Premio dos comités científico e organizador en categoría máster

Comunicación (C-8) – Javier Corral Sertal

Simulación da condutividade térmica mediante cálculos *ab initio*

Premio do público en categoría doutoramento

Comunicación (C-5) – Ana Castiñeira Landeira

Evidenciando a presenza de produtos de coidado persoal en xeles hidroalcohólicos mediante o método analítico SPME-GC-MS/MS

Premio dos comités científico e organizador en categoría doutoramento

Comunicación (C-25) – Lucía Méndez Gómez

Exploración estrutural dun ciclopéptido para a súa autoensamblaxe de 1D a 2D