

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

11-12
NOVEMBRO
2024

XINQ 4

Instagram X @xinq_usc

LIBRO DE RESUMOS

Facultade de Química
Universidade de Santiago de Compostela



Máis información



IV Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da Química

LIBRO DE RESUMOS

11 e 12 de novembro de 2024

Facultade de Química da USC

Web: <https://i.gal/QTOUK>

Enderezo electrónico: xinq.secretaria@usc.gal



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

Santiago de Compostela, 2024

Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela

HDL: <https://hdl.handle.net/10347/38256>

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



COMISIÓN DE NORMALIZACIÓN LINGÜÍSTICA DA FACULTADE DE QUÍMICA, integrada por:

Presidente: *Jesús Sanmartín Matalobos*

Secretaria: *María Carmen Barciela Alonso*

Vogal: *Luis Alberto García Suárez*

Vogal: *Benito Quintana Álvarez*

Vogal: *Ana M^a González Noya*

Vogal: *Guerra Santamarina, Ana*

COMITÉ CIENTÍFICO

Martínez Calvo, Miguel

Montes Goyanes, Rosa María

Carlos Vázquez Vázquez

Antonio Rumbo Gómez (coordinador)

COMITÉ ORGANIZADOR

Cora Calvo, Diego

Domínguez Carbón, Paula

Duque Villaverde, Andrés

Hernández Faria de Moraes, Stella

Marcos Atanes, Daniel

Maza Barón, Álvaro

Montoto Pintos, David

Rivas Saborido, Adrián

Vale Gómez, Alejandra

Vázquez Carballo, Irene

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



ÍNDICE

ÍNDICE

ÍNDICE	4
PRESENTACIÓN	7
PROGRAMA.....	9
RESUMOS.....	13
C1- Determinación de THC mediante microextracción líquido-líquido dispersiva asistida por aire (AALLME).	14
C2- Desenvolvemento dun método de determinación de prata en fraccións proteicas de mostras de algas expostas a nanopartículas.....	15
C3- Determinación de fármacos e outros contaminantes emerxentes empregados como indicadores do tratamento cuaternario das augas residuais urbanas.....	16
C4- Catálise de Rutenio en Química Bioortogonal: Viabilidade de novos métodos baseados en intermedios vinilidénicos.	18
C5- Reaccións en cascada promovidas por ouro en medios biolóxicos.	20
C6- Hidrocarbonación Intermolecular de Alenos Rexioselectiva mediante Catálise de Ir(I): Acceso Sinxelo a Estructuras con C-Cuaternarios.....	22
C7- Síntese de composites de tipo Celulosa/MOF/Ftalocianinas: Procesamento por impresión 3D e avaliación como catalizadores heteroxéneos na síntese de fármacos.....	23
C8- Estudo sobre o desenvolvemento de tecnoloxías antieutrofizantes a través da redución abiótica do nitrato mediante óxidos de Fe e ácidos orgánicos.	24
C9- Uso combinado de tecnosoles e especies de plantas con potencial fitorremediador como estratexia cara a recuperación ambiental da mina de Touro.....	26
C10- Terapia fotodinámica dirixida contra células nai do cancro autofluorescentes.	27
C11- Detección de contaminantes persistentes, móbiles e tóxicos en mostras de auga de rexións de España mediante cromatografía líquida de alta resolución acoplada a espectrometría de masas.	29
C12- Un proxecto educativo sustentable e lúdico que da visibilidade aos Obxectivos de Desenvolvemento Sustentables nas aulas de química.....	31
C13- Valorización de CO ₂ : Unha nova alternativa a través da catálise de moléculas de Ag e Cu.	33
C14- Optimización da edición xenética CRISPR/Cas9 mediante novas nanopartículas lipídicas: un enfoque fisicoquímico e funcional.	35
C15- Efectos do sal en colorantes de detección de dsDNA.....	36
C16- Usando δ-aminoácidos para crear estruturas supramoleculares.....	37
C17- Metalopéptidos para catálises en medios biolóxicos.	38

C18- Creación de circuitos metabólicos artificiais mediante a combinación de catálise encimática e metálica.....	39
C19- Transformacións bioortogonais promovidas por luz visible.....	40
C20- Síntese dunha arquitectura meso-helicoidal de prata derivada dun ligando fosfino-azina.	41
C21- Obtención de compostos helicoidais con potencial actividade biolóxica.	42
C22- Complexos bidentados derivados de carborano coma potenciais activos biolóxicos.	43
BASES,ACTAS e PREMIADOS	44
Bases dos premios das IV Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da Química (XINQ_4).....	45
Acta do premio do público	45
Acta do premio do xurado	46
GALERIA DE FOTOS.....	47

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. A xuntanza está pensada para que @s nov@s investigador@s entendan que se pode explicar a ciencia, a química no noso caso, en lingua galega ao mesmo tempo que desenvolven as súas capacidades de comunicación en público.

A xuntanza desenvólvese a través dunha serie comunicacións orais de carácter divulgativo onde, en galego, expoñen os aspectos mais significativos e xerais da investigación que realizan no seu máster ou doutoramento.

Nesta cuarta edición, o comité organizador considera que a XINQ consolidouse xa como un espazo para a difusión da investigación no ámbito da química na nosa universidade en galego. Nesta xuntanza pódense encontrar participantes procedentes da maioría dos centros de investigación e facultades da nosa institución, pero ten máis importancia, na nosa opinión, a participación de estudantes que non teñen o galego como lingua materna. El@s ofrécenos o exemplo da importancia que lle dan as persoas á lingua no proceso de integración e como ven nela un vínculo sentimental fundamental na nosa sociedade.

Dende a Comisión de Normalización Lingüística da Facultade de Química débese reflexionar sobre a participación do seu profesorado nesta actividade. Sería positivo que en cada edición unha parella de profesores puideran expoñer a investigación realizada ou un tema científico de actualidade de xeito divulgativo en lingua galega. Deste xeito, co tempo, poderían animarse a desenvolver a súa actividade docente en galego utilizado en pouca medida na nosa facultade.

PROGRAMA

Programa

IV Xuntanza de Invetigador@s Nov@s no ámbito da Química

Luns 11 de novembro de 2024. Aula Magna. Facultade de Química.

09:30 **Presentación da IV Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da química**

Jesús Sanmartín Matalobos (decano da Facultade de Química da USC), Gumersindo Feijoo Costa (vice-reitor de Transformación Dixital e Innovación da USC) e Antonio Rumbo Gómez (coordinador do Comité Científico da XINQ_4).

SESIÓN de MAÑÁ

Sesión Doutoramento 1

Moderación: Rosa María Montes Goyanes e Daniel Marcos Atanes

09:45 **Comunicación (C-1) – Laura Blanco García**

Determinación de THC mediante microextracción líquido-líquido dispersiva asistida por aire (AALLME)

10:00 **Comunicación (C-2) — Sheila González Barcia**

Desenvolvemento dun método de determinación de prata en fraccións proteicas de mostras de algas expostas a nanopartículas

10:15 **Comunicación (C-3) — Andrés Duque Villaverde**

Determinación de fármacos e outros contaminantes emerxentes empregados como indicadores do tratamento cuaternario das augas residuais urbanas

10:30 **Debate**

Sesión Máster 1

Moderación: Carlos Vázquez Vázquez e Andrés Duque Villaverde

10:45 **Comunicación (C-4) – Laura Parada Pérez**

Catálise de Rutenio en Química Bioortogonal: Viabilidade de novos métodos baseados en intermedios vinilidénicos

11:00 **Comunicación (C-5) – Ximena Sánchez Iglesias**

Reaccións en cascada promovidas por ouro en medios biolóxicos

11:15 **Debate**

11:30-12:00 Descanso para café

Sesión Doutoramento 2

Moderación: Antonio Rumbo Gómez e David Montoto Pintos

12:00 Comunicación (C-6) – Maria Puente Calvo

Hidrocarbonación Intermolecular de Alenos Rexioselectiva mediante Catálise de Ir(I): Acceso Sinxelo a Estructuras con C-Cuaternarios

12:15 Comunicación (C-7) – Alexandrina Druta

Síntese de composites de tipo Celulosa/MOF/Ftalocianinas: Procesamento por impresión 3D e avaliación como catalizadores heteroxéneos na síntese de fármacos

12:30 Comunicación (C-8) – Iñaki Beceiro Cillero

Estudo sobre o desenvolvemento de tecnoloxías antieutrofizantes a través da redución abiótica do nitrato mediante óxidos de Fe e ácidos orgánicos.

12:45 Debate

13:00-16:00 Descanso para xantar

SESIÓN de TARDE

Sesión Máster 2

Moderación: Antonio Rumbo e Andrés Duque Villaverde

16:00 Comunicación (C-9) – Raúl Fernández Álvarez

Uso combinado de tecnosoles e especies de plantas con potencial fitorremediador como estratexia cara a recuperación ambiental da mina de Touro

16:15 Comunicación (C-10) – David Montoto Pintos

Terapia fotodinámica dirixida contra células nai do cancro autofluorescentes

16:30 Debate

Sesión Doutoramento 3

Moderación: Carlos Vázquez Vázquez e Andrés Duque Villaverde

16:45 Comunicación (C-11) – Sandra Méndez Martínez

Detección de contaminantes persistentes, móbiles e tóxicos en mostras de auga de rexións de España mediante cromatografía líquida de alta resolución acoplada a espectrometría de masas

17:00 Comunicación (C-12) – Cristina Cambeses Franco

Un proxecto educativo sustentable e lúdico que da visibilidade aos obxectivos de Desenvolvemento Sustentables nas aulas de química.

17:15 Comunicación (C-13) – Martín Dieste Places

Valorización de CO₂: Unha nova alternativa a través da catálise de moléculas de Ag e Cu.

17:30 Debate

18:00 Fin da xornada

Martes 11 de novembro de 2024. Aula Magna. Facultade de Química.

SESIÓN de MAÑÁ

Sesión Doutoramento 4

Moderación: Carlos Vázquez Vázquez e Paula Domínguez-Carbón

9:30 Comunicación (C-14) – Ana Seijas Cerceda

Optimización da edición xenética CRISPR/Cas9 mediante novas nanopartículas lipídicas: un enfoque fisicoquímico e funcional

9:45 Comunicación (C-15) – Stella Hernández Faria de Moraes

Efectos do sal en colorantes de detección de dsDNA

10:00 Comunicación (C-16) – Román Fernández López

Usando δ -aminoácidos para crear estruturas supramoleculares

10:15 Debate

Sesión Doutoramento 5

Moderación: Antonio Rumbo Gómez e Stella Hernández Faria de Moraes

10:30 Comunicación (C-17) – Álvaro Maza Barón

Metalopéptidos para catálise en medios biolóxicos

10:45 Comunicación (C-18) – Alejandra Vale Gómez

Creación de circuitos metabólicos artificiais mediante a combinación de catálise encimática e metálica

11:00 Comunicación (C-19) – Adrián Rivas Saborido

Tranformacións bioortogonais promovidas por luz visible

11:15 Debate

11:30-12:00 Descanso para café

Sesión Doutoramento 6

Moderación: Miguel Martínez Calvo e Daniel Marcos Atanes

12:00 Comunicación (C-20) – Uxia Barreiro Sisto

Síntese dunha arquitectura meso-helicoidal de prata derivada dun ligando fosfino-azina

12:15 Comunicación (C-21) – Paula Domínguez-Carbón

Obtencións de compostos helicoidais con potencial actividade biolóxica

12:30 Comunicación (C-22) – Irene Vázquez Carballo

Complexos bidentados derivados de carborano coma potenciais activos biolóxicos

12:45 Debate

13:00 Votacións finais

13:20 Acto de clausura da IV Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da química

Jesús Sanmartín Matalobos (decano da Facultade de Química da USC), Carlos Vázquez Vázquez e Antonio Rumbo Gómez (membros do Comité Científico da XINQ_4).

14:00 Fin da xornada

RESUMOS

Comunicación -C1

C1- Determinación de THC mediante microextracción líquido-líquido dispersiva asistida por aire (AALLME).

L. Blanco¹, P. Cabarcos¹, I. Álvarez¹, M. J. Tabernero¹ y A. M. Bermejo¹

¹Instituto de Ciencias Forenses Luis Concheiro, Facultade de Medicina, Universidade de Santiago de Compostela, Santiago de Compostela, España.

Palabras chave: química analítica; THC; AALLME.

En toxicoloxía existen diferentes tipos de mostrás que se diferencian principalmente no tipo de información que se pode obter delas. O cabelo é unha mostra alternativa cuxa principal vantaxe é a súa ampla ventá de detección, polo que é útil para a realización de análises retrospectivas.

A preparación de mostrás de cabelo é un paso importante para illar os compoñentes desexados da matriz. Este proceso implica primeiro un procedemento de descontaminación, seguido dun paso de pretratamento para liberar e illar substancias da matriz e, finalmente, o extracto resultante pódese analizar directamente ou purificarse máis antes da análise.

A química analítica verde fomentou o desenvolvemento de técnicas de microextracción como alternativa ás extraccións convencionais. Neste campo, o pretratamento de mostrás de cabelo tamén experimentou un desenvolvemento exponencial nos últimos anos, especialmente na fase de limpeza, destacando as técnicas de microextracción líquido-líquido dispersivo (DLLME) e microextracción dispersiva en fase sólida (D- μ SPE).

Neste contexto, desenvolveuse un método para a determinación de THC, unha droga de abuso, en pelo coa intención de estudar a aplicabilidade de novidosas técnicas de microextracción. A determinación do THC realizouse mediante GC-MS e a validación do método realizouse seguindo as directrices de validación da FDA.

Os resultados obtidos demostraron unha linearidade no intervalo de 0,01 a 4 $\mu\text{g}/\text{mg}$, cun límite de detección (LOD) alcanzado de 0,008 $\mu\text{g}/\text{mg}$. Ademais, obtivéronse resultados satisfactorios no resto dos parámetros estudados de selectividade, exactitude, precisión e recuperación. Por último, o método utilizouse na análise de 20 casos reais que demostraron a súa eficacia e capacidade de aplicación.

Referencias

- [1] Rosado, T., Barroso, M., Vieira, D. N., & Gallardo, E. Trends in microextraction approaches for handling human hair extracts-A review. *Analytica Chimica Acta*, **2021**, 1185, 338792. <https://doi.org/10.1016/j.aca.2021.338792>
- [2] Rosado, T., Barroso, M., Vieira, D. N., & Gallardo, E. (). Determination of selected opiates in hair samples using microextraction by packed sorbent: a new approach for sample clean-up. *Journal of Analytical Toxicology*, **2019**, 43(6), 465476. <https://doi.org/10.1093/jat/bkz029>
- [3] He, Y., & Concheiro-Guisan, M. Microextraction sample preparation techniques in forensic analytical toxicology. *Biomedical Chromatography*, **2019**, 33(1), 4444. <https://doi.org/10.1002/bmc.4444>

Comunicación -C2

C2- Desenvolvemento dun método de determinación de prata en fraccións proteicas de mostras de algas expostas a nanopartículas.

S. González-Barcia,¹ M.C. Barciela-Alonso,¹ E. Peña-Vázquez,¹ J.J. López-Mayán¹

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

Palabras chave: Química analítica; nanopartículas; proteínas

O emprego das nanopartículas de Ag (AgNPs) como bactericida en distintos ámbitos provocou nestes últimos anos o aumento da súa presenza no medio ambiente e como consecuencia unha maior exposición dos seres vivos a este tipo de nanomateriais.

O obxectivo desta investigación é cuantificar a cantidade de prata ligada ás proteínas presentes en mostras de algas vermellas (*Palmaria palmata*) e algas verdes (*Ulva sp.*), que foron expostas a AgNPs de 15 nm recubertas con PVP. A extracción das proteínas realizouse aplicando un método de extracción con fenol sobre as algas previamente homoxeneizadas con N₂ líquido. As fraccións proteicas nos pellets obtidos separáronse en función do seu punto isoeléctrico mediante electroforese offgel. Cada fracción obtida mediante a electroforese offgel foi analizada outra vez mediante electroforese LOC (*Lab On a Chip*) para caracterizar as proteínas presentes nas dúas algas en canto a concentración e peso molecular.

Por outra banda desenvolveuse un método para a determinación da concentración da prata total presente nas fraccións proteicas obtidas na electroforese offgel empregando a Espectrometría de Absorción Atómica con Atomización Electrotérmica (ETAAS).

Para iso optimizouse o programa de temperaturas para a determinación de Ag seleccionando as temperaturas de mineralización e atomización de 1100° e 1800°C, respectivamente. Para eliminar o efecto matriz empregouse a calibración mediante o método de adicións estándar nun rango de concentracións de 1 a 10 µg L⁻¹. Avaliáronse as características analíticas para a cuantificación de Ag mediante ETAAS obtendo límites de detección e cuantificación referidos a mostra de 3,5 µg L⁻¹ e 11,8 µg L⁻¹, respectivamente. O método de cuantificación de Ag presentou unha boa repetibilidade (RSD<2,7%) e recuperación analítica con valores medios próximos ao 100% (103%).

Tras a análise das fraccións offgel, solo se cuantificou Ag nas fraccións proteicas con puntos isoeléctricos básicos de 8,1 a 10, obténdose as maiores concentracións (163,5 e 186,5 µg L⁻¹ de Ag) para as fraccións con puntos isoeléctricos de 8,98 e 9,28, respectivamente, na alga verde *Ulva sp.*

Agradecementos: Os autores desexan agradecer ao Ministerio de Economía e Competitividade (proxecto INNOVANANO, referencia RT2018-099222-B-100), á Unión Europea (INTERREG Atlantic Area, project NANOCULTURE, referencia EAPA590/2018) e á Xunta de Galicia (Grupo de Referencia Competitiva, referencia ED431C_2022/29).

Comunicación -C3

C3- Determinación de fármacos e outros contaminantes emerxentes empregados como indicadores do tratamento cuaternario das augas residuais urbanas.

A. Duque-Villaverde¹, S. Sónora^{1,2}, R. Antonelli^{3,4}, V.J.P. Vilar^{3,4}, T. Dagnac², M. Llompart¹

¹ CRETUS, Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, Universidade de Santiago de Compostela, E-15782, Santiago de Compostela, España, andres.duque.villaverde@usc.es

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

³ LSRE-LCM – Laboratory of Separation and Reaction Engineering - Laboratory of Catalysis and Materials, Faculty of Engineering, University of Porto, Rua Dr. Roberto Frias, 4200-465 Porto, Portugal

⁴ ALiCE – Associate Laboratory in Chemical Engineering, Faculty of Engineering, University of Porto, Rua Dr. Roberto Frias, 4200-465 Porto, Portugal

Palabras chave: Química analítica; cromatografía líquida - espectrometría de masas; produtos farmacéuticos

En 2022, a directiva UWWTD (2022/0345 (COD)) [1] estableceu normas sobre a recollida, tratamento e vertido das augas residuais urbanas. Esta regulación pretende abordar os problemas medioambientais e sanitarios derivados da presenza de micro-contaminantes, microplásticos e outros contaminantes (por exemplo, metais pesados ou PFAS) nas augas europeas. Ademais, introduce novos procesos de tratamento das augas residuais, incluíndo o tratamento cuaternario para os micro-contaminantes. Esíxese un porcentaxe mínimo de eliminación do 80 % de seis substancias empregadas como indicadores do rendemento do tratamento cuaternario, dun total de 13 sustancias enumeradas no Anexo I e divididas en dúas categorías: sustancias que se poden tratar moi facilmente e sustancias que se poden eliminar moi facilmente. Entre os produtos farmacéuticos incluídos nesta lista, atópanse sustancias pertencentes á familia dos inhibidores selectivos da recaptación de serotonina (SSRI), dos antihipertensivos e dos antibióticos.

O obxectivo deste traballo é o desenvolvemento dunha metodoloxía analítica para a determinación dos fármacos incluídos nesta directiva e outros contaminantes emerxentes en mostras de auga residuais. O método baséase na extracción en fase sólida (SPE) seguida de cromatografía líquida acoplada a espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS) e acoplada a espectrometría de alta resolución de masas cuadrupolar de tempo de voo (LC-QTOF-HRMS). Optimízanse varios parámetros que poden influír na extracción, como o tipo de cartucho ou o pH da mostra. A metodoloxía validárase analiticamente e aplicárase a mostras de augas residuais, incluíndo mostras recollidas tras a centrifugación de lodos procedentes da dixestión anaerobia (*centrate*) e tras o tratamento terciario mediante un biorreactor de membrana (*Membrane BioReactor*, MBR). A maioría das sustancias enumeradas no Anexo I, como carbamazepina, citalopram, diclofenaco, venlafaxina, benzotriazol, candesartán ou irbesartán, detectáronse nas mostras.

Estes primeiros resultados son prometedores e deberían axudar a avaliar os riscos que o vertido dos contaminantes analizados nas augas residuais urbanas supón para o medio ambiente e a saúde pública.

Agradecementos: Esta investigación foi financiada polos proxectos PID2022-140148OB-I00 (TirePro) e RED2022-134079-T (Ministerio de Ciencia e Innovación, España), ED431 2023/04 e IN607B 2022/15 (Programa de Grupos de Investigación Consolidados, Xunta de Galicia). Este estudo baséase no traballo e Rede de Estudo de Preparación de Mostra respaldado pola División de Química Analítica da Sociedade Europea de Química. Todos estes programas están cofinanciados por FEDER (UE). Este traballo tamén foi financiado por FCT/MCTES (PIDDAC): LSRE-LCM, UIDB/50020/2020 (DOI: 10.54499/UIDB/50020/2020) e UIDP/50020/2020 (DOI: 10.54499/UIDP/50020/2020); e ALiCE, LA/P/0045/2020 (DOI: 10.54499/LA/P/0045/2020).

Referencias

[1] European Commission, UWWTD 2022/0345 (COD), (2022).

Comunicación -C4

C4- Catálise de Rutenio en Química Bioortogonal: Viabilidade de novos métodos baseados en intermedios vinilidénicos.

L. Parada,¹ L. G. Cool,² A. Gutiérrez,² F. Salgado,² F. López,² J. L. Mascareñas.²

¹ Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) e Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela, 15705, Santiago de Compostela. Correo electrónico: laura.parada@rai.usc.es.

² Misión Biológica de Galicia, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), 36080, Pontevedra (Spain).

Palabras chave: catálise; química bioortogonal; rutenio.

O desenvolvemento de reaccións bioortogonais e biocompatibles supuxo unha revolución na química sintética e biolóxica nos últimos anos, dado o potencial que ofrecen para a biomedicina.

Neste sentido, a química bioortogonal estuda as reaccións químicas levadas a cabo no interior dun organismo vivo sen interferir no seu funcionamento. Para que isto sexa posible, as reaccións deben ser altamente eficientes, rápidas e selectivas, e os reactivos e produtos deben ser estables e biocompatibles.[1] Tamén é necesario que as reaccións se leven a cabo en medios acuosos, a un pH neutro e a temperatura ambiente.

Neste contexto, o uso de complexos de metais de transición (como Ru, Cu e Au) como catalizadores presenta vantaxes como unha grande versatilidade mecanística. Entre eles, os complexos de rutenio son altamente biocompatibles, sendo excelentes candidatos para o seu uso en química bioortogonal.[2]. Así, numerosas reaccións catalizadas por complexos de rutenio foron estudadas, como desproteccións, cicloadicións azida-alquino e [2+2+2] ou reaccións redox.

En concreto, a introdución de especies reactivas como os vinilidenos metálicos na química bioortogonal é de gran interese para o desenvolvemento de novos tipos de reaccións. Aínda que os vinilidenos son especies xeralmente reactivas e inestables, poden ser estabilizados ao coordinarse a un metal. [3] Así, estes intermedios poden participar en reaccións diversas, como a adición nucleófila, que é a opción máis estudada. Porén, as reaccións involucrando vinilidenos precisan xeralmente altas temperaturas; e sempre foron estudadas en disolventes orgánicos.

Deste xeito, o obxectivo desta investigación foi a optimización da formación de indois a partir de *orto*-alquinil anilinas para o seu traslado a medios biolóxicos. A reacción transcorre a través de vinilidenos de rutenio (Figura 1), e permite a formación de moléculas de alto interese biolóxico.

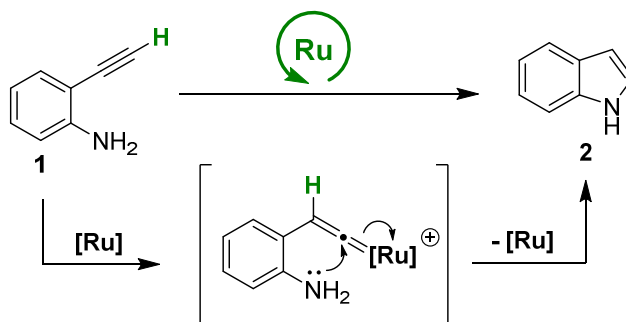


Figura 1. Reacción estudada e intermedio vinilidénico involucrado.

Tras unha optimización de disolventes, descubriuse que a reacción pode ter lugar en medios acuosos. Tamén se levou a cabo unha optimización de catalizadores, e foi necesario comprobar se a reacción era posible a temperaturas biocompatibles (37 °C) e a baixas concentracións.

Estas reaccións abren a porta a futuras investigacións na introdución de vinilidenos metálicos en química bioortogonal, ampliando a versatilidade mecanística de reaccións levadas a cabo en células e sintetizando moléculas de alto interese biolóxico.

Agradecementos: A todos os meus compañeiros do grupo de investigación, por estar sempre dispostos a axudar en todo o necesario e por manter a ilusión polo noso traballo día a día.

Referencias

- [1] Sletten, E. M.; Bertozzi, C. R. Bioorthogonal Chemistry: Fishing for Selectivity in a Sea of Functionality. *Angew Chem Int Ed* **2009**, *48* (38), 6974-6998.
- [2] Gutiérrez-González, A.; López, F.; Mascareñas, J. L. Ruthenium Catalysis in Biological Habitats. *Helv Chim Acta* **2023**, *106* (4).
- [3] Roh, S. W.; Choi, K.; Lee, C. Transition Metal Vinylidene- and Allenylidene-Mediated Catalysis in Organic Synthesis. *Chem Rev* **2019**, *119* (6), 4293-4356.

Comunicación -C5

C5- Reaccións en cascada promovidas por ouro en medios biolóxicos.

X. Sánchez,¹ C. D'Avino,¹ M. Tomás-Gamasa,¹ J.L. Mascareñas.¹

¹Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) e Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela, 15705, Santiago de Compostela, España.
ximena.sanchez@rai.usc.es

Palabras chave: catálise; química bioortogonal; ouro.

Nos últimos anos, o desenvolvemento da química bioortogonal abriu as portas á introdución de reaccións abióticas dentro de sistemas vivos de maneira biocompatible.[1] A súa alta selectividade e cinética, xunto coa tolerancia destas reaccións as condicións fisiolóxicas de pH e temperatura, formula o emprego deste tipo de estratexias á hora de desenvolver novas terapias e tratamentos, con especial interese na química biolóxica e biomedicina.[2]

Dentro deste marco e ante o desafío que supón a complexidade dun medio vivo, fórmase o alcance da catálise metálica artificial para promover este tipo de reaccións, buscando mimetizar o comportamento das metaloenzimas naturais mediante o emprego de metais de transición. Así, describíronse múltiples transformacións bioortogonais baseadas en paladio, rutenio e cobre, gañando relevancia outras químicas, coma a do ouro, nos últimos anos.[3]

Tradicionalmente considerado inerte, as últimas aplicacións descritas para o ouro demostraron a capacidade dos seus complexos de activar enlaces C-C múltiples para ataques nucleofílicos.[4] Deste xeito, describíronse diversos biosensores, estratexias bioortogonais sintéticas e aplicacións terapéuticas baseadas en complexos de ouro e a súa carbofilicidade.

Con isto en mente, nesta investigación fórmase o emprego da catálise de ouro para a cicloisomerización de alquinos, levando a cabo unha reacción no interior de medios biolóxicos de dobre ciclación a través dun mecanismo en cascada, capaz de xerar unha gran complexidade de xeito sinxelo. Así, desenvólvese a síntese de carbazois, estruturas tipicamente bioactivas.

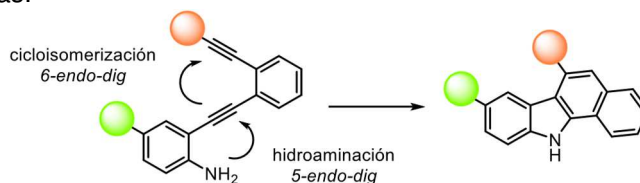


Figura 1. Síntese de carbazois a través dun mecanismo en cascada

Deste xeito, optimizouse a reacción a partir dos parámetros orixinais para alcanzar condicións biolóxicas de alta dilución e compatibilidade co aire e auga. Posteriormente, investigouse a tolerancia da reacción á presenza de diferentes biomoléculas e medios máis complexos, obtendo bos resultados *in vitro*. Por último, levouse a cabo un estudo preliminar *in cellulo*, demostrando a viabilidade da transformación en células vivas de mamífero.

Así, esta estratexia constitúe un novo e prometedor punto de vista para a construción de moléculas complexas a partir de estruturas sinxelas dunha maneira simple, elegante e bioortogonal no interior de células de mamífero vivas.

Referencias

- [1] Sletten, E. M.; Bertozzi, C. R. Bioorthogonal Chemistry: Fishing for Selectivity in a Sea of Functionality. *Angew Chem Int Ed* **2009**, 48 (38), 6974-6998.
[2] Bilodeau, D. A.; Hincapié, R.; Lee, W.; Nguyen, S. S.; Xu, M.; Am Ende, C.W.; et al. Bioorthogonal chemistry. *Nat Rev Methods Primers*, **2021**, 1, 30.

IV Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da Química (XINQ_4)
Santiago de Compostela, 11-12 de novembro de 2024

- [3] Seoane, A. A.; Mascareñas, J. L. Exporting Homogeneous Transition Metal Catalysts to Biological Habitats. *Eur J Org Chem* **2022**, 2022 (32).
- [4] Pflästerer, D.; Hashmi, A. S. K. Gold catalysis in total synthesis – recent achievements. *Chem. Soc. Rev.* **2015**, 45 (5), 1331-1367

Comunicación -C6

C6- Hidrocarbonación Intermolecular de Alenos Rexioselectiva mediante Catálise de Ir(I): Acceso Sinxelo a Estructuras con C-Cuaternarios.

A. Rey¹, M. Puente,¹ J.L. Mascareñas,¹ F. López^{1,2}

¹ Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) e Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela (Spain), maria.puente.calvo@rai.usc.es, alejandro.rey.lopez@rai.usc.es

² Misión Biológica de Galicia, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), 36080, Pontevedra (Spain).

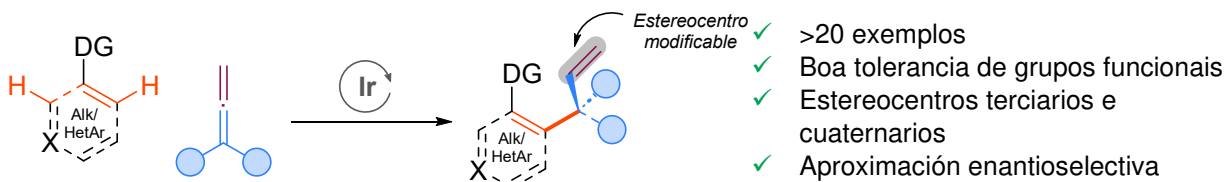
Palabras chave : Química orgánica; Hidrocarbonacións, Alenos

O desenvolvemento de métodos para a adición directa de C(sp²)-H a través de sistemas insaturados constitúe un obxectivo importante na síntese orgánica moderna, debido á súa economía atómica e ao seu gran poder de transformación. [1]

O noso grupo logrou avances significativos nos protocolos de hidrocarbonatación intramolecular promovidos por iridio(I), utilizando alquinos ou alquenos como precursores insaturados. De particular interese son os alquenos, que permiten a formación de estereocentros cuaternarios de forma enantioselectiva. [2,3,4]

Neste proxecto, presentamos unha innovadora hidrocarbonatación intermolecular de alenos, particularmente atractiva para construír heterociclos que conteñen estereocentros alílicos terciarios e cuaternarios, os cales adoitan estar presentes en moléculas bioloxicamente activas.

Ademais, o uso de alenos aborda certos desafíos atopados na hidrocarbonatación de alquenos. No caso dos alquenos 1,1-disubstituídos, os produtos presentan necesariamente un substituínte metilo, unha limitación eludida polos alenos xa que dan lugar a un alqueno como produto final, proporcionando deste xeito un novo punto de funcionalización versátil. Non obstante, a complexidade do sistema introduce retos de rexioselectividade. Mediante a elección do ligando axeitada, conseguimos superar estes problemas, posibilitando o acceso a estruturas interesantes cunha selectividade notable, complementaria á que se recolle na literatura.



Referencias

[1] (a) Fernández D. F.; Mascareñas J. L.; López F. *Chem. Soc. Rev.* **2020**, 49, 7378; (b) Arribas, A.; Lázaro-Milla, C.; Mascareñas, J. L.; López, F., En *Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*, Elsevier: **2023**.

[2] Fernández D. F., Rodríguez C., Calvelo M., Gulías M., Mascareñas J. L., López F. *ACS Catal.* **2018**, 8, 7397.

[3] Fernández D. F., Gulías M., Mascareñas J. L., López F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, 56, 9541.

[4] (a) Arribas A.; Calvelo M.; Fernández D. F.; Rodríguez C.; Mascareñas J. L.; López F. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, 60, 19297; (b) Arribas, A.; Calvelo, M.; Rey, A.; Mascareñas, J. L.; López, F., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, 63, 8258.

Comunicación -C7

C7- Síntese de composites de tipo Celulosa/MOF/Ftalocianinas: Procesamento por impresión 3D e avaliación como catalizadores heteroxéneos na síntese de fármacos.

A. Druta^{1,2}, **D. G. Grandío**^{1,2}, **A. Coelho**^{1,2,3}

¹ Departamento de Química Orgánica. Química Farmacéutica, Facultade de Farmacia, USC;
alexandrinadruta@gmail.com

² Grupo de Física de Coloides e Polímeros, GI-2055, Facultade de Física, USC;

³ Instituto de Materiais-USC (IMATUS).

Palabras chave: Química de polímeros; MOFs; Ftalocianinas.

O deseño de novos catalizadores heteroxéneos [1-5] para a aplicación en síntese farmacéutica é un dos piares actuais da Química Sostible [6]. Principios como o emprego de materiais reciclables, biodegradables ou de baixo custo son altamente demandados na actualidade, tanto na industria como na academia.

A celulosa é un material moi abundante e de baixo custo. Presenta moitas vantaxes derivadas do fácil procesamento, reactividade, reciclabilidade que a converte nun excelente soporte sólido para ancoraxe de diversos compoñentes catalíticos.

Neste traballo experimental presentamos a síntese e caracterización de composites baseados en celulosa funcionalizada con MOF e o seu procesamento mediante impresión 3D. Ademais presentamos a aplicación destes materiais en reaccións catalizadas por cobre ou paladio, para a síntese de biomoléculas de tipo isatina, as cales mostraron unha potente actividade antiproliferativa en células tumorais HeLa.

As estratexias baseadas no deseño de catalizadores duais empregando estes compoñentes xunto con outros "building blocks" como as ftalocianinas [7], serán discutidas.

Agradecementos para a Dra. Silvia Barbosa, o Dr. Pablo Taboada Antelo e o Dr. Francisco Guitián Rivera, do IMATUS.

Referencias

- [1] C. R. Tubío, F. Malatini, I. Barrio, V. Masaguer, H. Amorín, W. Nabgan, M. E. Taboada, F. Guitián, A. Gil & A. Coelho, *Materials Today Chemistry*, **2023**, 27, 101355.
- [2] A. S. Díaz-Marta, C. R. Tubío, C. Carbajales, C. Fernández, L. Escalante, E. Sotelo, F. Guitián, V. L. Barrio, A. Gil & A. Coelho, *ACS Catalysis*, **2018**, 8, 392-404.
- [3] C. Malatini, C. Carbajales, M. Luna, O. Beltrán, M. Amorín, C. F. Masaguer, et al., *Pharmaceuticals*, **2023**;16(2).
- [4] A. S. Díaz-Marta, S. Yáñez, C. R. Tubío, V. L. Barrio, Y. Piñeiro, R. Pedrido, et al. *ACS Applied Materials and Interfaces*, **2019**; 11, :25283-94.
- [5] C. R. Tubío, J. Azuaje, L. Escalante, A. Coelho, F. Guitián, E. Sotelo, et al. *Journal of Catalysis*, **2016**; 334,110.
- [6] P. Anastas, N. Eghbali, *Chem. Soc. Rev.*, 2010, 39, 301-312.
- [7] K. Sakamoto, E. Ohno, *Journal of the Society of Dyers and Colourists*, **1996**, 112, 368..

Comunicación -C8

C8- Estudo sobre o desenvolvemento de tecnoloxías antieutrofizantes a través da redución abiótica do nitrato mediante óxidos de Fe e ácidos orgánicos.

Iñaki Beceiro-Cillero^{1*}; Juan Antelo¹ ; Sarah Fiol² ; Pedro Vázquez³ ; Xosé L. Otero¹

¹CRETUS. Departamento De Edafoloxía e Química Agrícola, Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago de Compostela, España. *inaki.beceiro.cillero@usc.es

²CRETUS. Departamento de Química Física, Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago de Compostela, España.

³Departamento de Física Aplicada. Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago de Compostela, España.

Palabras chave: Química ambiental; Eutrofización; Nitrato

O N é un elemento esencial para a vida o cal limita o crecemento e o desenvolvemento vexetal nos sistemas naturais e explotacións agrícolas. Dende comezos do século pasado a súa incorporación nas explotacións agrarias non parou de crecer, ao mesmo tempo que tamén se incrementaron substancialmente a súas emisións á atmosfera e os vertidos de augas residuais aos corpos de augas naturais, provocando a súa eutrofización.

A eutrofización provocada polo incremento do N nos sistemas superficiais (augas, solos, sedimentos) é hoxe en día, xunto coa perda da biodiversidade e o cambio climático, un dos principais problemas ambientais que están a levar ao colapso a moitos sistemas acuáticos en todo o planeta [1,2]. Adicionalmente, debe considerarse o efecto da presión demográfica e do incremento global da temperatura, os cales actúan sinerxicamente cos procesos de eutrofización agravando significativamente a calidade das augas da meirande parte dos ecosistemas acuáticos [3]. Informes recibidos polo Parlamento e Consello Europeo sinalan a un exceso global das achegas de N que excede os límites planetarios seguros [1]. Ademais, diferentes estudos amosan que un 50% dos lagos de Europa, América e Asia atópanse en estado de eutrofización [4], sendo esta una situación que se agarda que empeore no futuro. A pesar da importancia deste tipo de contaminación, as técnicas destinadas a remediala ou detela son altamente ineficientes ou presentan grandes problemas ambientais, centrándose actualmente na redución ou detención dos fluxos de nutrientes cara aos medios naturais.

Unha posible solución a este problema podería residir nos procesos naturais que controlan a dispoñibilidade destes nutrientes nos medios naturais, sendo o albo deste traballo o estudo dos procesos bioxeoquímicos que controlan a dispoñibilidade do N co fin de desenvolver técnicas alternativas máis sinxelas, económicas e ecolóxicas para remediar a contaminación por N. Deste xeito, neste traballo realizáronse experimentos para conseguir a eliminación do N mediante procesos de redución abiótica con Fe e materia orgánica a través do proceso coñecido como Roda Ferrosa que acontece naturalmente en solos [5]. No desenvolvemento desta pescuda puxéronse a proba dous óxidos de Fe(III) (goetita e ferrihidrita) e unha forma de Fe(0) para comprobar o seu efecto sobre a redución do NO_3^- , tanto en presenza coma en ausencia de Fe(II) en forma iónica. Do mesmo xeito, testouse o efecto de sete compostos orgánicos (4 ácidos orgánicos, 2 azucres e 1 alcohol), co fin de comprobar o efecto que teñan sobre o proceso de redución. Os resultados obtidos amosaron unha alta dependencia dos precursores empregados, así como da presenza de Fe(II), na determinación da eficiencia do proceso, sinalando algúns dos posibles factores que poderían condicionar o desenvolvemento dunha tecnoloxía descontaminante baseada neste proceso.

Agradecementos: Este traballo foi financiado pola Axencia Estatal de Innovación a través do proxecto EUTROSTOP (TED2021- 131737B-I00) e polas Consellarías de Educación e Ordenación Universitaria (Consolidación e Estruturación de Unidades de Investigación Competitivas; GI-1245, ED431C 2022/40) e de Cultura, Educación, Formación Profesional e Universidades (Axudas de apoio á etapa predoutoral; ED481A-2024-045) da Xunta de Galicia.

Referencias

- [1] Steffen, W.; Richardson, K.; et al. *Science*, **2015**, 347, 125985
- [2] Richardson, J., Steffen W., Lucht, W., Bendtsen, J., Cornell, S.E., et.al. *Science Advances*, **2023**, 9, 37
- [3] Moss, B.; Kosten, S.; et al. *Inland Waters*, **2011**, 1, 101-105
- [4] Matus, F.; Stock, S.; et al. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **2019**, 245, 514-524
- [5] Colin R.B.; Robert E.; et al. *Journal of Experimental Marine Biology and Ecology*, **2007**, 344, 206–214

Comunicación -C9

C9- Uso combinado de tecnosoles e especies de plantas con potencial fitorremediador como estratexia cara a recuperación ambiental da mina de Touro.

R. Fernández Álvarez,¹ D. Arenas Lago¹, R. González Feijoo.¹

¹Laboratorio de edafoloxía e Química Agrícola, Facultade de Ciencias de Ourense (UVIGO).
Raul.fernandez.alvarez@rai.usc.es

Palabras chave Bioquímica; Tecnosoles; Cobre



A contaminación dos solos por actividades mineiras é un problema ambiental que afecta tanto aos ecosistemas como á saúde humana. En particular, a mina de Touro en Galicia deixou solos con altos niveis de metais, como o cobre, que requiren de estratexias efectivas de remediación [1-2]. Os tecnosoles, solos artificiais creados a partir de residuos orgánicos e inorgánicos, presentan unha potencial solución para a recuperación destes solos contaminados. Con todo, é fundamental avaliar a súa efectividade e os posibles impactos sobre o crecemento de plantas con potencial fitorremediador, como *Lepidium sativum* e *Lolium perenne*. Este estudo aborda a necesidade de atopar métodos sostíbeis para a recuperación de solos mineiros, contribuíndo ao coñecemento científico sobre a utilización de tecnosoles e plantas fitorremediadoras como estratexia combinada de recuperación de solos en áreas mineiras.

Agradecementos: Felipe Macías Vázquez e a empresa de Recursos e Valorización Ambiental proporcionounos os materiais necesarios para levar a cabo este procedemento experimental

Referencias

- [1] García, F. M., Arbestain, M. C., & Vázquez, F. M. (2009). Utilización de tecnosoles derivados de residuos en procesos de restauración de suelos en la mina de Touro. In *Minería sostenible: Conferencia internacional, 09* (pp. 651-662). Cámara Oficial Mineira de Galicia.
- [2] García, F. M., Vázquez, F. M., & Olano, C. N. (2012). Didáctica de la Mina de Touro: Procesos de Recuperación de Suelos y Aguas hiperácidas de Minas de Sulfuros Metálicos mediante la Valorización Biogeoquímica de Residuos. *Boletín das ciencias*, 25(76), 65-66.

Comunicación -C10

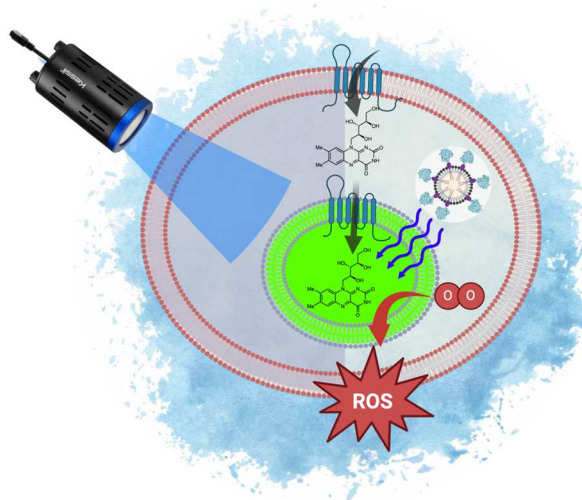
C10- Terapia fotodinámica dirixida contra células nai do cancro autofluorescentes.

D. Montoto Pintos,¹ M. Tomás Gamasa,¹ J.L. Mascareñas Cid,¹ B. Sainz Jr.²

¹Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) e Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 (España), david.montoto@usc.es

²Grupo de Células Madre de Cáncer y Microambiente Fibroinflamatorio, Instituto de Investigaciones Biomédicas Sols-Morreale (IIBM), CSIC-Universidad Autónoma de Madrid (UAM), 28029 Madrid (España)

Palabras chave: cancro, terapia fotodinámica, bioquímica



O cancro é a segunda causa de morte no mundo, e estímase que o número de casos aumentará nun 77% para 2050 (OMS), polo que cómpre desenvolver novas terapias contra esta enfermidade. Certos cancros están impulsados por células nai do cancro, que se cree que son responsables da heteroxeneidade do tumor, recorrencia do cancro, metástase e resistencia a tratamentos convencionais [1]. Moitas células nai do cancro presentan autofluorescencia, causada pola acumulación de riboflavina en vesículas citoplasmáticas [2]. A riboflavina é un fotosensibilizador que se pode empregar en terapia fotodinámica contra o cancro [3], polo que neste traballo estudouse o emprego de riboflavina para unha nova estratexia de terapia fotodinámica específica contra células nai do cancro. Observouse que ao irradiar con luz azul certos cultivos primarios celulares de cancro de páncreas, indúcese apoptose, xéranse especies reactivas de osíxeno (ROS) e decrece o número de células nai do cancro.

Unha limitación potencial da terapia fotodinámica é a pouca penetrabilidade da luz nos tecidos biolóxicos, polo que son necesarios métodos alternativos para excitar os fotosensibilizadores. Polo tanto, estudouse un sistema bioluminiscente para xerar luz *in situ*, baseado en nanosistemas de esfingomielina conxugados con luciferasa de *Renilla*. Malia que este sistema é capaz de xerar luz dentro de células vivas, precísanse máis experimentos para determinar o seu efecto en células nai do cancro e en células canceríxenas en xeral.

Agradecementos: D.M.P. recibiu un contrato de iniciación á investigación do CiQUS, a Universidade de Santiago de Compostela e a Xunta de Galicia. Este estudo recibiu apoio dunha bolsa FIS PI21/01110 (B.S., Jr.) cofinanciada polo Fondo Europeo de Desenvolvemento Rexional (ERDF), e do CIBERONC (CB16/12/00446). María de la Fuente proporcionou os nanosistemas de esfingomielina conxugados con luciferasa de *Renilla*.

Referencias

- [1] E. Battle, H. Clevers. *Nature Medicine*, **2017**, 23, 1124–1134.
- [2] I. Miranda-Lorenzo, J. Dorado, E. Lonardo, S. Alcalá, A.G. Serrano, J. Clausell-Tormos, M. Cioffi, D. Megias, S. Zagorac, A. Balic *et al*, *Nature Methods*, **2014**, 11, 1161–1169.
- [3] M. Insińska-Rak, M. Sikorski, A. Wolnicka-Glubisz. *Cells*, **2023**, 12, 2304

Comunicación -C11

C11- Detección de contaminantes persistentes, móviles e tóxicos en mostras de auga de rexións de España mediante cromatografía líquida de alta resolución acoplada a espectrometría de masas.

S. Méndez¹, M. Perin¹, R. Rodil¹, L. Bijlsma², E. Pitarch², V. Acuña², J. Comas³, R. Montes¹ and J.B. Quintana¹

¹ Aquatic One Health Research Center (ARCUS), Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, Galicia, España. sandramendez.martinez@usc.es

² Public Health and Environmental Analytical Chemistry, Research Institute for Pesticides and Water, University Jaume I, Castellon, Spain.

³ Catalan Institute for Water Research (ICRA-CERCA), Emili Grahit 101, 17003 Girona, España.

Palabras chave: Química analítica; compostos persistentes, móviles e tóxicos (PMTs); contaminación da auga.

As substancias persistentes, móviles e tóxicas (PMT) representan unha preocupación importante no contexto do ciclo da auga debido ás propiedades inherentes destes compostos [1]. Esta categoría de compostos chamou a atención das autoridades europeas, que determinaron que teñen un nivel de preocupación similar ao dos compostos persistentes, bioacumulativos e tóxicos (PBT) que están suxeitos a regulación segundo a lexislación REACH (Registro, Avaliación, Autorización e Restricción de Substancias Químicas). O proxecto NePMTune (www.nepmtune.webnode.es) ten como obxectivo identificar e estudar o comportamento das PMT en matrices como a auga e o po urbano, ademais de propoñer estratexias para a súa mitigación. Como parte das actividades do proxecto, desenvolveuse unha estratexia de busca de sospeitosos ('suspect screening') para analizar a orixe e presenza das PMT en diversas matrices acuosas, incluíndo auga de río, augas residuais brutas e tratadas, escorrentía urbana e lixiviados de vertedoiro. Construíuse unha base de datos con 1.100 compostos químicos co fin de realizar unha identificación por sospeitosos, empregando unha estratexia de priorización baseada nos criterios PBT [2].

En total, analizáronse 47 mostras dos tipos mencionados, recollidas en 2023 en varias rexións de España (Cataluña, Comunidade Valenciana e Galicia). Tras o proceso de liofilización como paso de preconcentración, realizouse o cribado mediante cromatografía líquida de modo mixto acoplada a espectrometría de masas de alta resolución (MMLC-HRMS), complementada coa determinación de mobilidade iónica (IM-HRMS) como técnica suplementaria. Identificáronse un total de 98 PMT, distribuídas nos tres niveis de confirmación propostos na literatura [3], con 53 no nivel 1, 30 no nivel 2 e 15 no nivel 3. Ademais, das PMT identificadas nos niveis 2 e 3 nas mostras, 29 foron confirmadas cun nivel adicional de confianza mediante a sección transversal de colisión (CCS) obtida por IM-HRMS.

Os compostos identificados con maior frecuencia (representando máis do 70 % do total) foron o ácido *p*-cumenosulfónico e a 1,3-*di*-o-tolilguanidina, xunto cos fármacos N-desmetilvenlafaxina, tapentadol e tramadol. Actualmente están a desenvolverse métodos cuantitativos para os compostos máis prevalentes.

Agradecementos: Este traballo está financiado polo Ministerio de Ciencia e Innovación (MCIN/AEI/10.13039/501100011033) e pola Unión Europea mediante o NextGeneration/PRTR (TED2021-129200B-C41, TED2021-129200B-C42 and TED2021-129200B-C43), así como pola Xunta de Galicia (ED431C 2021/06). L. Bijlsma

agradece o financiamento da súa bolsa RYC2020-028936-I, financiada por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 e polo “ESF Investing in Your Future”.

Referencias

- [1] R. Montes et al., *Molecules*, **2022**, 27,3915.
- [2] Commission Delegated Regulation (EU) 2023/707 of 19 December 2022 amending Regulation (EC) No 1272/2008 as regards hazard classes and criteria for the classification, labelling and packaging of substances and mixtures, C/2022/9383, OJ L 93, 31.3.2023, p. 7–39.
- [3] E. L. Schymanski et al., *Anal Bioanal Chem*, **2015**, 407, 6237.

Comunicación -C12

C12- Un proxecto educativo sustentable e lúdico que da visibilidade aos Obxectivos de Desenvolvemento Sustentables nas aulas de química.

Cristina Cambeses Franco¹

¹ CRETUS, Departamento de Enxeñaría Química, Escola Técnica Superior de Enxeñaría, Universidade de Santiago de Compostela, Rúa Lope Gómez de Marzoa s/n, 15782 Santiago de Compostela, España.

Palabras chave (química sostible, educación para o desenvolvemento sostible, obxecto dixital educativo)

O camiño cara á consecución dos Obxectivos de Desenvolvemento Sustentable (ODS) para o ano 2030 non só se traza nos grandes foros internacionais, senón que se constrúe dende as aulas, onde reside o verdadeiro potencial para transformar a sociedade. A educación debe asumir un rol protagonista como panca fundamental para abordar os desafíos que afronta a humanidade: a erradicación da pobreza, a protección do planeta e a construción dun futuro próspero para todos e todas [1].

O proxecto ExperimentaODS, e en particular os obxectos dixitais educativos (ODES) creadas coa ferramenta Exelearning que compoñen esta iniciativa eríxense como unha ferramenta de utilidade para facilitar a aprendizaxe da química de maneira significativa e contextualizada na educación secundaria, en consonancia cos principios do ODS4 (Educación de calidade) (ver **Figura 1**). Apóstase así por unha educación de calidade no marco do Deseño Universal da Aprendizaxe que integre a dimensión ambiental no currículo de forma transversal, asegurando que os estudantes comprendan a profunda aplicabilidade da química na aprendizaxe de coñecementos científicos e no desenvolvemento de instrumentos conceptuais que lles axuden a entender os elementos científico-tecnolóxicos da sociedade. O deseño das ODES permite lograr a inclusión efectiva do alumnado a través dunha secuenciación gradual e contextualizada, recursos visuais e auditivos, estrutura clara e predicible, actividades de profundización e reforzo e a interacción e retroalimentación.

Os obxectivos específicos deste recurso dixital interactivo e atractivo son:

- Fomentar a investigación científica responsable e rigorosa aliñada cos principios do ODS9: Industria, innovación e infraestrutura.
- Desenvolver o pensamento crítico e a capacidade de comunicación científica efectiva, habilidades esenciais para contribuír ao avance do coñecemento científico.
- Fomentar unha cultura de seguridade e responsabilidade no manexo de materiais e equipos de laboratorio, promovendo a saúde e o benestar individual (ODS3) e a protección do ambiente (ODS13).
- Desenvolver unha comprensión profunda dos procesos de cambio na materia e a súa relación coa enerxía, sentando as bases para o desenvolvemento de tecnoloxías sustentables en liña co ODS7 (Enerxía accesible e non contaminante).
- Fomentar a aprendizaxe activa e cooperativa a través de proxectos científicos que exploren os cambios físico-químicos, promovendo a creatividade, a innovación e a responsabilidade social, en liña cos ODS 4,9 e 17.

As ODES do proxecto son exemplos de actividades de aprendizaxe integrada e contribúen ao desenvolvemento de tódalas competencias clave: comunicación lingüística; matemática e competencia en ciencia, tecnoloxía e enxeñaría; dixital;

persoal, social e de aprender a aprender; cidadá; emprendedora e conciencia e expresión culturais. Este enfoque da educación contribúe á formación integral do alumnado, nutrindo a súa personalidade, pensamento crítico, creatividade e capacidade de resolución de problemas.

Cada ODE ofrece unha base sólida para presentar contidos teóricos de forma clara, desenvolver habilidades a través de tarefas prácticas e avaliar o progreso do alumnado. A estrutura gradual das ODES combina a introdución de novos conceptos coa revisión e ampliación dos xa abordados, e facilita a comprensión e retención de coñecementos. Ademais, a conexión cos Obxectivos de Desenvolvemento Sustentables dota a química dunha dimensión real e promove a responsabilidade social nos estudantes.

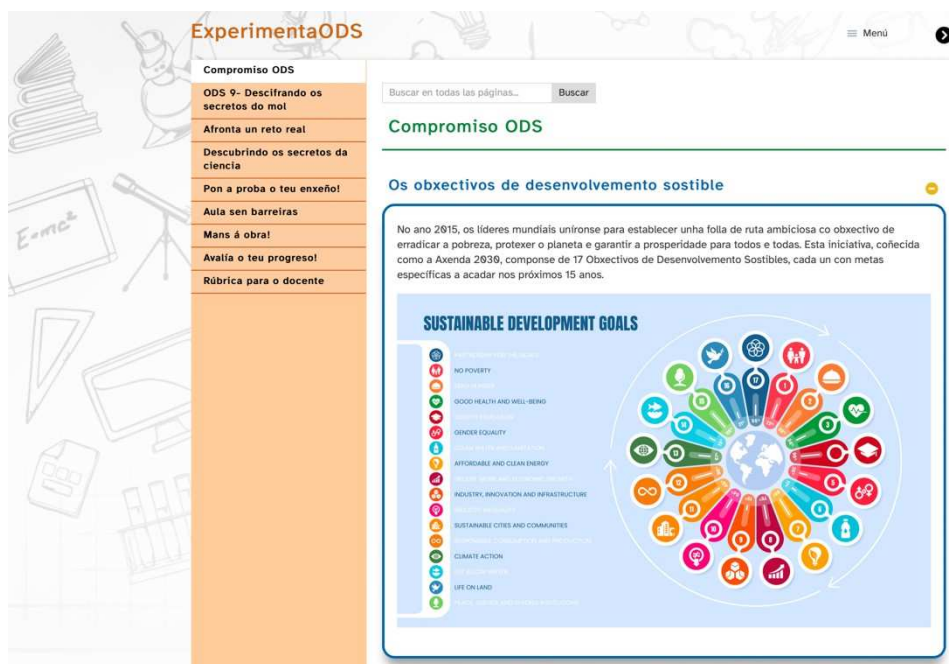


Figura 1. Exemplo de ODE proxecto ExperimentaODS

Agradecementos: C.C-F agradece ao Ministerio de Ciencia, Innovación e Universidades por financiación económica (Contrato FPU 19/06648). Ademais pertence ao Grupo de Referencia Competitiva (GRC ED431C 2017/29) e ao Centro Investigación Interdisciplinar en Tecnoloxías Ambientais (CRETUS ED431E 2018/01).

Referencias

- [1] UNESCO. Educación para los Objetivos de Desarrollo Sostenible, 2017. <https://unesdoc.unesco.org/ark:/48223/pf0000252423>

Comunicación -C13

C13- Valorización de CO₂: Unha nova alternativa a través da catálise de moléculas de Ag e Cu.

Dieste M.¹, Arias I. R. ¹, Buceta, D. ¹, Davila N.¹, Lopez-Quintela, M.A. ² Vázquez, C. ²

¹ Nanogap, Polig. Ind. C/Xesta N°78A, Ames, Spain, martin.dieste.places@usc.es

² IMATUS, Av. do Mestre Mateo 25, Santiago de Compostela, Spain

Palabras chave (foto)catálise; química sostible; química teórica; química de materiais

Recentemente desenvóléronse estratexias tecnolóxicas sostibles encamiñadas a unha transición moderada cara a fontes de enerxía baixas en carbono. Isto consiste en reutilizar os gases de efecto invernadoiro emitidos á atmosfera, como o CO₂, como reactivo para formar produtos industriais de alto valor [1].

Entre as principais aplicacións do CO₂ a nivel industrial destácase o seu uso como disolvente verde en estado supercrítico, a súa mineralización con catións metálicos para producir carbonatos, ou a súa transformación biolóxica en macromoléculas como lípidos, proteínas e pigmentos [2]. Porén, unha das aplicacións máis interesantes é a transformación catalítica do CO₂ en combustibles de alto valor engadido, como metanol, gas natural sintético, syngas e outros compostos.

A Reverse Water-Gas Shift (RWGS) é unha reacción de valorización do CO₂ que consiste na hidroxenación de CO₂ para formar syngas, unha mestura de gases compostos principalmente por H₂ e CO. O syngas é un intermedio fundamental para a fabricación de amoníaco, metanol e, principalmente, combustible de aviación. Tamén se utiliza no método Fischer-Tropsch (FT) para a fabricación de petróleo crudo sintético, lubricantes e combustibles de hidrocarburos [3].

Esta reacción foi amplamente estudada empregando catalizadores metálicos como o Cu, Au, Rh, Ru, Ni y Fe depositados habitualmente sobre soportes de TiO₂, Al₂O₃ o ZrO₂ [4]. Sen embargo, tamén se describen baixas selectividades e a desactivación do catalizador por deposición de carbono ou polo cambio estrutural a altas temperaturas debido a la presencia de H₂O [1].

Recentemente, investigáronse as Moléculas Metálicas (M-M) de baixa atomicidade obtendo excelentes resultados na catálise heteroxénea de reaccións de valorización de CO₂ [5].

As M-M son agrupacións duns poucos átomos metálicos, inferiores a un nanómetro, máis pequenas que as nanopartículas metálicas convencionais. Estes novidosos materiais caracterízanse por unha estrutura electrónica composta por niveis de enerxía discretos e un band gap similar á diferencia HOMO-LUMO que se da nas moléculas. Esta estrutura electrónica provoca grandes diferencias fisicoquímicas entre as M-M e outras nanopartículas.

As M-M caracterízanse por unha gran estabilidade en solución acuosa [6], a diferencia das nanopartículas tradicionais, que necesitan un sufactante para manter a súa estabilidade de dispersión. Tamén son moi estables á oxidación e cando se depositan sobre un soporte de óxido metálico, moi estables a altas temperaturas, ata 900 °C, incluso en atmosfera oxidante ou en presenza de H₂O.

Como todos os átomos das moléculas metálicas son superficiais, todos eles están dispoñibles para reaccionar, polo que a carga necesaria para unha reacción determinada é moito menor que cos catalizadores tradicionais. Ademais, as propiedades das M-M dependen principalmente do tamaño e non do elemento. As M-M de Cu e Ag poden utilizarse como alternativas aos metais PGM con resultados similares, ofrecendo unha alternativa rentable e medioambientalmente sostible aos catalizadores convencionais.

Estes compostos novos e únicos estudáronse durante moitos anos na nosa empresa, NANOGAP. Demostrouse a súa alta estabilidade, selectividade e conversión en reaccións de valorización de CO₂ como a RWGS. O TOR que obtivemos a 400 °C é de 0.245 mol/g_{Ag}*h que é 40 veces superior ao catalizador baseado en Ni [9] e 7 veces mellor que o catalizador baseado en Au á mesma temperatura [4]. Ademais, a selectividade para o CO é do 100 %, sen produción de metano ou outros produtos secundarios indeseables, incluso a temperaturas tan altas como 800 °C, ás cales se ve favorecida a formación de metano.

En consecuencia, estes resultados sentan un precedente moi importante en catálise heteroxénea con M-M e demostran a gran contribución que os M-M poden supor á transición enerxética sostible que se está producindo nos últimos anos.

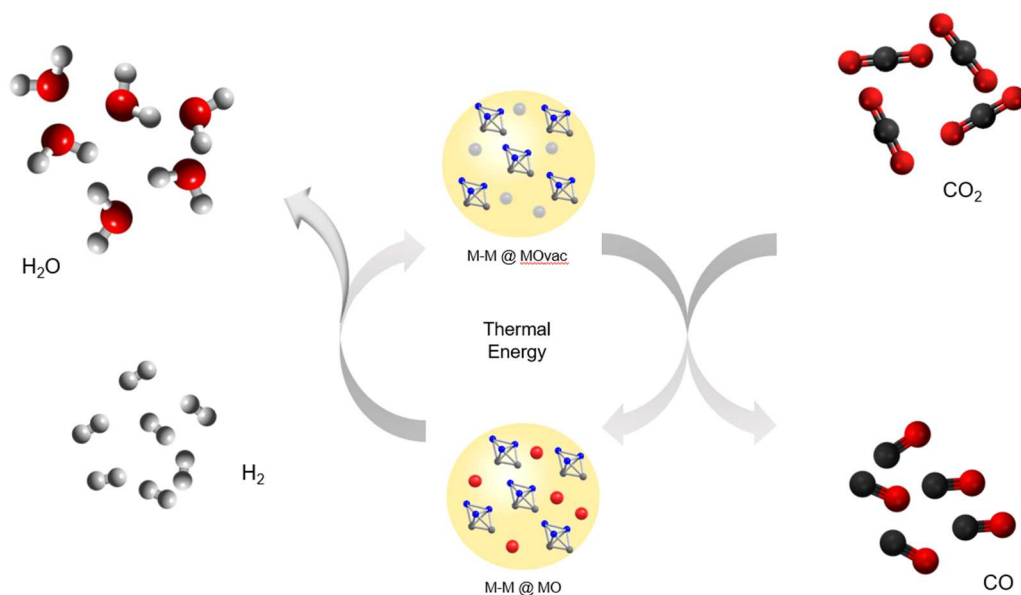


Figura 1. Mecanismo proposto para a RWGS catalizada por M-M.

Referencias

- [1] J.J. Villora-Picó, J. González-Arias, L. Pastor-Pérez, J.A. Odriozola, T.R. Environmental Research, 240 (2024).
- [2] E. Daneshvar, R.J. Wicker, P.L. Show, A. Bhatnagar, Chem. Eng. J. (2022) 427.[3] Rahimpour, M. R. Rahimpour, Adv. in Synthesis Gas: Meth. Tech. and Appl., 3 (2023) 3-25.
- [4] L.F. Bobadilla, J. L. Santos, S. Ivanova, J. A. Odriozola, A. Urakawa, ACS Catal. 8 (2018) 7455-7467.
- [5] L. Liu, A. Corma, Chem. Rev. 118 (2018) 4981-5079.
- [6] S. Huseyinova, J. Blanco, F. G. Requejo, J. M. Ramallo-López, M. C. Blanco, D. Buceta, M. A. López-Quintela, Journal of Physical Chemistry 120 (2016), 15902-15908.
- [7] L. Caballero, P. Ramallo-López, M. José, J. Lisandro, D. Buceta, S. Miret-Artés, M. A. López-Quintela, G. Félix, M.
- [8] Lara-Castells, J. Mater. Chem. A. 14 (2020) 6842-6853.[9] Domínguez, K.J.E. Borgman, M. Lakadamyali, M.F. Garcia-Parajo, J. Neissa, Adv. Mater. 33 (2018) 1801317.
- [10] J.Y. Ye, Q.F. Ge, Chem. Eng. Sci. 135 (2015) 193-201.

Comunicación -C14

C14- Optimización da edición xenética CRISPR/Cas9 mediante novas nanopartículas lipídicas: un enfoque fisicoquímico e funcional.

A. Seijas,^{1,2} D. Cora,¹ J. Seijas,¹ L. Sánchez,² W. Al-Soufi,¹ M. Novo,¹ A.J. Arana²

¹ Departamento de Química Física, Facultade de Ciencias, Campus Terra, Universidade de Santiago de Compostela, 27002 Lugo, España, ana.seijas@rai.usc.es

² Departamento de Zooloxía, Xenética e Antropoloxía Física, Facultade de Veterinaria, Universidade de Santiago de Compostela, Lugo, España

Palabras chave química física; agregación; Cas9

O sistema CRISPR/Cas9 é unha ferramenta de edición xenética de alta precisión que nos últimos anos demostrou a súa utilidade no campo da produción animal. Deste xeito, a edición xenética mediada por CRISPR/Cas9, mostrou resultados prometedores para mellorar o crecemento e a resistencia a enfermidades. Esta tecnoloxía baséase na encima Cas9 que, xunto cunha secuencia de ARNgúa (gARN) é capaz de producir un corte específico nunha molécula de ADN [1]. Aínda que esta ferramenta demostrou ser efectiva en especies acuícolas para mellorar o crecemento e a resistencia a enfermidades [2], persisten retos significativos, especialmente na optimización dos métodos de internalización dos complexos ribonucleoproteicos (CRNP) de Cas9-gARN no interior celular, o cal aínda supón un tema candente de investigación [3].

Este estudo céntrase na agregación da proteína Cas9 e como esta afecta á súa inclusión en nanopartículas lipídicas (LNPs) empregadas para o transporte do sistema CRISPR/Cas9 ao interior celular. O proxecto propón investigar a concentración crítica de agregación da Cas9 en diferentes condicións e como esta agregación inflúe na eficiencia da edición xenética. Tamén se analizará a capacidade de Cas9 para incorporarse nos LNPs desenvolvidos pola empresa DIVERSA, empregando técnicas como a Espectroscopía de Correlación de Fluorescencia (FCS).

Ademais, o proxecto pretende comparar a efectividade de métodos de internalización, coñecidos como transfección, como a electroporación e a lipofección en cultivos celulares, para optimizar as condicións que permitan unha edición xenética máis eficiente e universal en especies acuícolas. Esta investigación podería proporcionar avances significativos para a biotecnoloxía mariña, permitindo un uso máis amplo e seguro da edición xenética na produción animal.

En resumo, a comunidade científica precisa estandarizar os métodos de transfección e numerosas técnicas de transporte como as LNPs están baixo estudo. Estudiar este proceso, así como a agregación de Cas9 e a súa inclusión nas LNPs é vital para optimizar a eficiencia da edición xenética.

Agradecementos: Agradecemos á Universidade de Santiago de Compostela polo proxecto colaborativo do Campus Terra no marco do Convenio de Colaboración entre a USC e a Consellería de Cultura, Educación, Formación Profesional e Universidades.

Referencias

[1] Jinek, M. et al., *Science*, **2012**, 337(6096), 816–821.

[2] Pennisi, E., *Science*, **2013**, 341(6148): 833–836.

[3] Paunovska, K. et al., *Nat. Rev. Genet.*, **2022**, 23(5): 265–280.

Comunicación -C15

C15- Efectos do sal en colorantes de detección de dsDNA.

S. Hernández,¹ S. Castro,¹ L. Piñeiro,¹ M. Novo,¹ W. Al-Soufi¹

¹ Departamento de Química Física, Facultade de Ciencias, Campus Terra, Universidade de Santiago de Compostela, E-27002 Lugo, Spain, stella.hernandez.faria@usc.es.

Palabras chave: química física; efecto iónico, colorantes

Os colorantes Laranxa de Tiazol (TO) e a Proflavina (PR) son intercaladores de ADN, útiles na detección e cuantificación de ADN de dobre cadea (dsDNA). O TO ten unha fluorescencia case inexistente en solucións acuosas, pero amosa unha fluorescencia significativa ao unirse ao dsDNA, mentres que a intensidade de fluorescencia da PR diminúe cando se une ao dsDNA. Ambos os dous presentan constantes de afinidade elevadas para a complexación co dsDNA, o que os converte en candidatos axeitados para ensaios da interacción destes colorantes intercaladores con dsDNA [1-3].

Neste estudo empregamos técnicas como a de espectroscopia de fluorescencia en estado estacionario e resolta no tempo para investigar a asociación supramolecular entre estes intercaladores e o dsDNA. Dado que a molécula de ADN está cargada negativamente, a concentración de sal na solución é unha variable importante que afecta a interacción entre o dsDNA e os colorantes. Examinamos sistematicamente os efectos da concentración de sal e da carga do catión sobre a constante de equilibrio de unión, empregando NaCl e MgCl₂ para aclarar o impacto das condicións iónicas. Discútese as consecuencias destas variacións na cuantificación do dsDNA, destacando a importancia do medio e a súa concentración de sal, na sensibilidade e precisión dos métodos de detección de dsDNA [4,5].

Seleccionamos NaCl e MgCl₂ para o noso estudo pola súa relevancia en condicións biolóxicas. O NaCl atópase en sistemas biolóxicos, mentres que o MgCl₂ esta presente nos kits de extracción para a realización da reacción en cadea da polimerasa (PCR), aínda que a concentración sexa baixa.

Esta análise proporciona unha visión clara sobre a optimización do TO e da PR como colorantes para a detección de dsDNA en diversas condicións experimentais.

Referencias

- [1] T. Biver, F. Secco, M. Tinè, M. Venturini, *Arch. Biochem*, **2003**, 418, 63-70.
- [2] Nygren, J., Svanvik, N. & Kubista, M., *Biopolymers*, **1998**, 46, 39-51.
- [3] Boger, D. L. & Tse, W. C., *Bioorg Med Chem*, **2001**, 9, 2511-2518.
- [4] Lohman, T. M. & von Hippel, P. H., *Crit.Rev.Biochem.Mol.Biol*, **1986**, 19, 191-245
- [5] Hernández S., Piñeiro L., Al-Soufi W., Novo M., **2024**, in preparation.

Comunicación -C16

C16- Usando δ -aminoácidos para crear estruturas supramoleculares.

Román Fernández López,¹ Ezequiel Arturo Troncoso,¹ Alejandro Lamas,¹ Manuel Amorín¹ e Juan R. Granja.¹

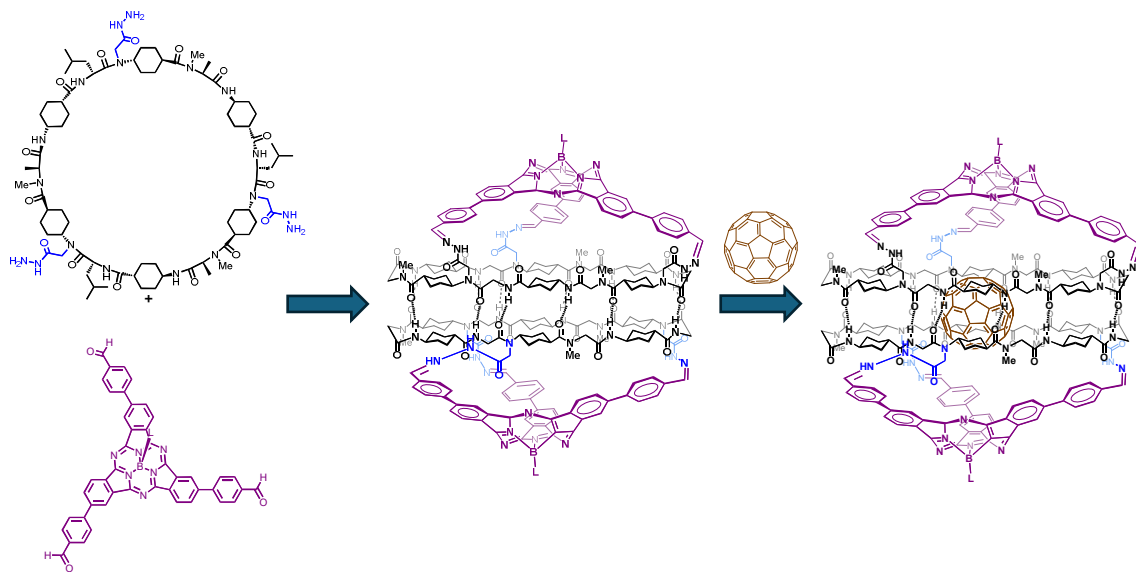
¹ Departamento de Química Orgánica e Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Universidade de Santiago de Compostela, Campus Vida, C/Jenaro de la Fuente, s/n, 15705, Santiago de Compostela, España. roman.fernandez.lopez@rai.usc.es

Palabras chave: Química orgánica; Ciclo péptidos; Cápsula supramolecular.

As cápsulas de tamaño nanométrico emerxeron como poderosas ferramentas para levar a cabo multitude de procesos ao actuar como nanoreactores para catálise, estabilizadores de intermedios de reacción, transportadores moleculares, etc.[1] Estas estruturas baleiras poden ser xeradas a través da ensamblaxe de pequenos compoñentes, creando estruturas 3D pechadas con unha cavidade interna que pode ser ocupada por un hóspede adecuado.[2]

O noso grupo de investigación especialízase no desenvolvemento de estruturas supramoleculares porosas usando péptidos cíclicos. Usando este tipo de compostos, tamén sintetizamos estruturas capaces de atrapar diferentes sustancias, como son átomos de Xenon[3] ou complexos de *cis*-platino.[4]

Neste traballo, presentamos o noso traballo preliminar cara á síntese dunha cápsula cunha gran cavidade interna que podería atrapar grandes moléculas apolares, como fullerenos, a través de interaccións de Van der Waals ou π - π .



Agradecementos: Grazas polo apoio económico do Ministerio de Economía e Competitividade (CTQ2016-78423-R), Xunta de Galicia (ED431C 2017/25 e Centro Singular de investigación de Galicia acreditación 2016-2019, ED431G/09) e a Unión Europea (Fondo Europeo de Desenvolvemento Rexional-FEDER).

Referencias

- [1] Yoshizawa, M.; Klosterman, J. K.; Fujita, M, *Angew. Chem. Int. ed.*, **2009**, 48, 3418-3438.
- [2] Ozores, H. L.; Amorín, M.; Granja, J. R., *J. Am. Chem. Soc.*, **2017**, 139, 776-784.
- [3] Pizzi, A.; Ozores, H. L.; Calvelo, M.; García-Fandiño, R.; Amorín, M.; Demitri, N.; Terraneo, G.; Bracco, S.; Comotti, A.; Sozzani, P.; Bezuidenhout, C. X.; Metrangolo, P.; Granja, J. R., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2019**, 58, 14472-14476.
- [4] Rodríguez-Vázquez, N.; García-Fandiño, R.; Aldegunde, M. J.; Brea, J.; Loza, M. I.; Amorín, M.; Granja, J. R., *Org. Lett.*, **2017**, 19, 2560.

Comunicación -C17

C17- Metalopéptidos para catálises en medios biolóxicos.

Á. Maza-Barón¹, M. Tomás-Gamasa¹, J. L. Mascareñas¹

¹ Departamento de Química Orgánica, Centro de Investigaciones en Química Biológica e Materiais Moleculares (CiQUS).
Universidad de Santiago de Compostela, Rúa Jenaro de la Fuente, Santiago de Compostela (Spain),
alvaro.maza.baron@usc.es

Palabras chave: química bioortogonal, metaloenzimas, fotocatalise.

A integración das transformacións catalíticas organometálicas en ambientes vivos expón oportunidades sen precedentes para a intervención biolóxica e química biomédica. Desde a aparición da química bioortogonal, unha gran variedade de reaccións biocompatibles catalizadas por metais desenvólvense, dando lugar a aplicacións diversas como a etiquetaxe fluorescente en sistemas vivos, sínteses de fármacos *in situ*, activación de profármacos ou a modificación de membranas celulares [1].

Con todo, a toxicidade e desactivación dos complexos metálicos en sistemas biolóxicos é unha limitación crítica á hora de expandir as fronteiras das reaccións biocompatibles. Para liquidar isto, realizáronse múltiples esforzos enfocados na modificación dos complexos metálicos, como a conxugación con péptidos e proteínas, dando lugar a novas estruturas metalopeptídicas que poderían aspirar a ser consideradas “metaloenzimas artificiais” capaces de operar en ambientes vivos. Desde o noso grupo xa reportamos o deseño e a síntese de metaloenzimas baseadas en paladio que son capaces de promover transformacións organometálicas intracelulares non presentes na natureza [2].

Seguindo este enfoque, estamos a traballar actualmente no deseño e síntese de novas metaloproteínas artificiais baseadas en complexos metálicos de iridio(III) coordinado a residuos de histidina que poden actuar como fotocatalizadores en medios biolóxicos. Complexos similares aos empregados con propiedades luminiscentes xa foron reportados na literatura con aplicacións en marcaxe de proteínas e *targeting* en células cancerixenas [3].

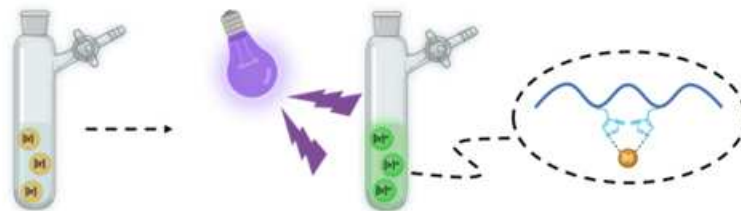


Figura 1: Esquema que mostra a excitación dun modelo de metaloenzima baseada en iridio.

Referencias

- [1] a) Destito, P; Vidal, C; López, F; Mascareñas, J. L. *Chem. Eur. J.* **2021**, 27, 4789-4816. b) Martínez-Calvo, M.; Mascareñas, J. L. *Coord. Chem. Rev.* **2018**, 359, 57–79. c) Devaraj, N. K. *ACS Cent. Sci.* **2018**, 4, 952–959. d) Liu, Y.; Ba, Y. *ACS Appl. Bio Mater.* **2020**, 3, 4717–4746.
[2] a) Learte-Aymamí, S.; Vidal, C.; Gutiérrez-González, A.; Mascareñas, J.L. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 9149-9154. b) Tomás-Gamasa, M.; Martínez-Calvo, M.; Couceiro, J. R.; Mascareñas, J. L. *Nat. Commun.* **2016**, 7, 12538: c) Learte-Aymamí, S. *et al. JACS Au* **2024**, 4, 2630–2639.
[3] a) Guo, S.; Xiao, Y.; Pan, B.; Su, X. *ChemBioChem*, **2024**, e202300798. b) Ma, X.; Jia, J.; Cao, R.; Wang, X.; Fei, H. *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 17734–17737.

Comunicación -C18

C18- Creación de circuitos metabólicos artificiais mediante a combinación de catálise encimática e metálica.

Vale-Gómez, Alejandra,¹ Gutiérrez-González, Alejandro,¹ Tomás-Gamasa, María,¹ Mascareñas, J.L.¹

¹ Departamento de Química Orgánica, Centro de Investigacións en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS).
Universidade de Santiago de Compostela, Rúa de Jenaro de la Fuente, Santiago de Compostela (España),
alejandra.vale@rai.usc.es

Palabras chave: química bioortogonal, catálise metálica, catálise encimática

O desenvolvemento de novas reaccións bioortogonais é crucial nos campos da química biolóxica e a biomedicina. Por exemplo, son de gran relevancia no descubrimento de novos tratamentos baseados na activación *in situ* de fármacos [1]. Diversos complexos organometálicos demostraron ser catalizadores moi eficaces para levar a cabo reaccións artificiais en medios biolóxicos, incluso dentro de células vivas [2]. Tendo isto presente, e o feito de que as encimas naturais se caracterizan pola súa especificidade substrato, este proxecto pretende ampliar os límites das técnicas bioortogonais mediante o deseño dunha reacción en tándem que combine metais de transición e catalizadores encimáticos nativos de forma concorrente e ortogonal.

Neste contexto, descubrimos que é posible combinar unha reacción artificial mediada por un catalizador de rutenio coa actividade encimática natural da ALP (proteína fosfatasa alcalina) para promover a liberación de produtos funcionais deseñados. Dado que esta encima presenta diferentes niveis de expresión en función dos tipos celulares, esta estratexia podería permitir unha liberación altamente selectiva de fármacos específicos.

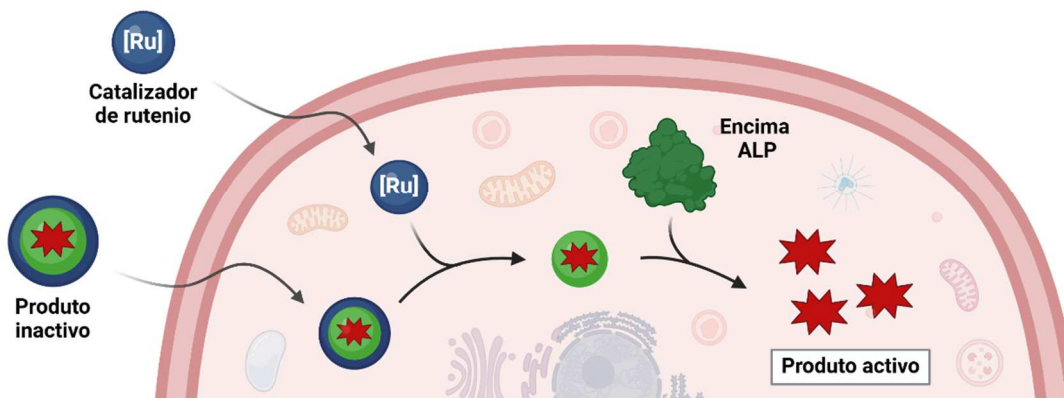


Figura 1: Esquema xeral para a xeración de produtos bioactivos mediante o proceso tándem.

Referencias

- [1] S. S. Matikonda, D. L. Orsi, V. Staudacher, *et al. Chem Sci.* **2015**, 6, 1212-1218.
[2] a) M. Tomás-Gamasa, M. Martínez-Calvo, J.R. Couceiro, J.L. Mascareñas. *Nat. Commun.* **2016**, 7, 12538; b) C. Vidal, M. Tomás-Gamasa, A. Gutiérrez-González, J. L. Mascareñas. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, 141, 5125

Comunicación -C19

C19- Transformacións bioortogonais promovidas por luz visible.

**Adrián Rivas Saborido¹, Xulián Fernández González¹, María Tomás Gamasa¹,
José Luis Mascareñas Cid¹.**

¹Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) - Santiago De Compostela (Spain) adrianrivas.saborido@usc.es

Palabras chave (foto)catálise; bioortogonal; radicais

No campo da química biolóxica, o desenvolvemento de ferramentas e metodoloxías innovadoras para manipular biomoléculas con precisión dentro de sistemas vivos é crucial.[1] Neste sentido, comprender os mecanismos celulares e moleculares detrás das funcións biolóxicas é fundamental para o tratamento de moitas enfermidades. Ademais, a capacidade de manipular, monitorizar e transformar o comportamento celular é clave para o desenvolvemento da medicina moderna.

No noso grupo iniciamos un novo programa de investigación que busca incorporar estímulos de enerxía biocompatibles, como a luz visible, para promover transformacións bioortogonais. Un aspecto clave é o uso da fotocatalise para iniciar a xeración de radicais a partir destes precursores. A fotocatalise, ao ser non invasiva, ofrece un medio para iniciar reaccións con control espazo-temporal preciso, minimizando así a disrupción celular e maximizando a eficiencia.

Esta investigación explora o uso de novas fontes de radicais, como sales de diazo e oximas. Baixo condicións fotocatalíticas, estes precursores poden evolucionar cara ás especies radicais desexadas, as cales poden ser atrapadas con moléculas adecuadas para aplicacións sintéticas.[2] Especificamente, presentamos unha liña de substratos que pode someterse a procesos de cicloadiución e ciclación e presenza de luz visible e un fotocatalizador en medios biolóxicos complexos. Esta estratexia tamén foi aplicada á síntese fotocatalítica bioortogonal de fármacos. Actualmente estamos a investigar estes procesos en células vivas.

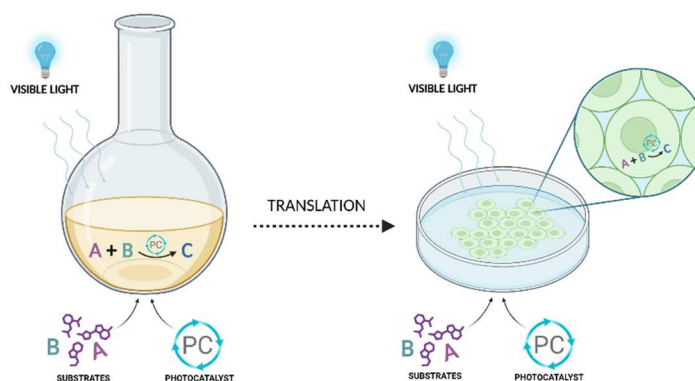


Figura 1. Esquema xeral das transformacións bioortogonais promovidas por luz visible tanto en sistemas *in vitro* como *in cellulo*.

REFERENCIAS

- [1] D.M. Patterson, L.A. Nazarova, J.A. Prescher. *ACS Chem Biology* **2014**, 592–605
- [2] D.P. Hari, T. Hering, B. König. *Org Lett* **2012** 5334–7

Comunicación -C20

C20- Síntese dunha arquitectura meso-helicoidal de prata derivada dun ligando fosfino-azina.

U. Barreiro-Sisto,¹ S. Fernández-Fariña,² M. Maneiro,¹ R. Pedrido²

¹Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Ciencias, Campus Terra, Universidade de Santiago de Compostela, 27002, Lugo, Spain, uxiabarreiro.sisto@usc.es

²Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Campus Vida, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, España

Palabras chave: Química Inorgánica, Química Metalosupramolecular, azina

A Química Metalosupramolecular estuda os procesos de autoensamblaxe entre moléculas orgánicas e ións metálicos que dan lugar á obtención espontánea de arquitecturas metalosupramoleculares singulares[1]. Entre a gran variedade de motivos estruturais atópanse as arquitecturas helicoidais e *meso*-helicoidais. Estas últimas, menos estudadas que as primeiras, destacan polas propiedades que poden presentar destacando as magnéticas, luminiscentes e biolóxicas [2].

Neste traballo preséntase a síntese dun mesocato de prata derivado dun ligando azina funcionalizado con grupos fosfina (LP⁸, Fig. 1). Tanto o ligando fosfina-azina como o complexo derivado foron estudados mediante diversas técnicas de caracterización incluíndo raios X de monocristal.

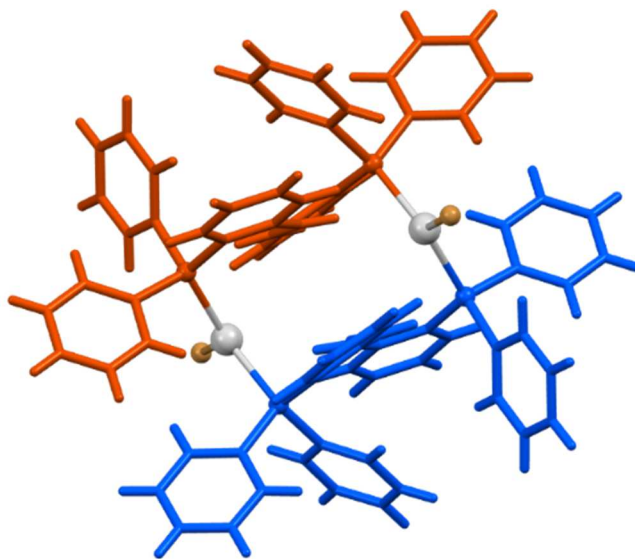


Fig. 1. Estrutura do mesocato de prata [Ag₂(LP⁸)₂]

Agradecementos: This research was funded by the following FEDER co-funded grants. From Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria, Xunta de Galicia GRC GI-1584 (ED431C 2023/02). From Ministerio de Ciencia e Innovación, Project PID2021-127531NB-I00 (AEI/10.13039/501100011033/ FEDER, UE) and RED2022-134091.

Referencias

[1] J.-M. Lehn, *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.*, **1988**, 27, 89–112.

[2] S. Fernández-Fariña, M. Martínez-Calvo, M. Maneiro, J. M. Seco, G. Zaragoza, A. M. González-Noya, R. Pedrido, *Inorg. Chem.*, **2022**, 61, 14121-14130.

Comunicación -C21

C21- Obtención de compostos helicoidais con potencial actividade biolóxica.

P. Domínguez-Carbón,¹ I. Velo-Helena,¹ A.M. González-Noya,¹ M. Martínez-Calvo ¹

¹Suprabioln Lab, Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela, Campus Vida, 15782, Santiago de Compostela, España.

Palabras chave: Química Inorgánica; Química Metalosupramolecular; helicatos.

Os helicatos son compostos metalosupramoleculares formados por unha ou máis febras orgánicas covalentes que se envolven e coordinan con ións metálicos, creando un eixo helicoidal. Esta estrutura singular confire aos helicatos propiedades e aplicacións que os fan destacar nunha ampla variedade de campos, que inclúen dende a Química Catalítica e a Ciencia dos Materiais ata a Bioloxía Molecular e a Química Biomédica.[1,2] En particular, a súa capacidade para recoñecer ó ADN, dun xeito similar ó realizado polas proteínas.[3] Este feito abre novas vías para a súa utilización en novas terapias contra o cancro e como sistemas avanzados de liberación de fármacos, resaltando así a importancia dos helicatos no ámbito da biomedicina e na terapia molecular.[4]

O noso grupo de investigación levou a cabo un estudo sobre o comportamento de coordinación dun ligando biscarbamato H_2L derivado da piridina, empregando unha metodoloxía electroquímica que permitiu obter helicatos dinucleares neutros.[5] Nesta comunicación, centramos a nosa atención na influencia da modificación dos grupos terminais (Figura 1) do ligando biscarbamato na arquitectura final dos compostos.

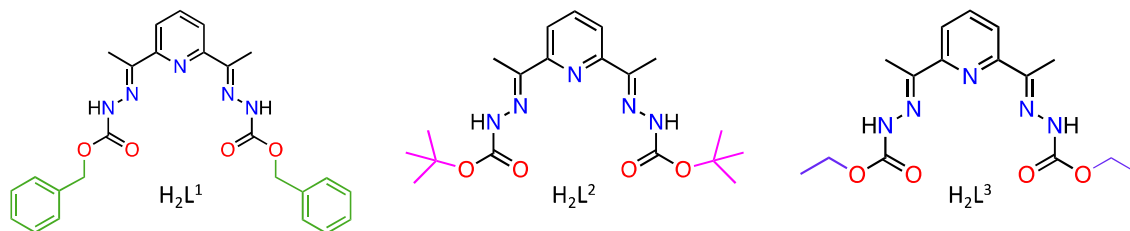


Figura 1. Estrutura dos tres novos ligandos biscarbamato obtidos.

Agradecementos: Consellaría de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria, Xunta de Galicia, 9 2023GRCGI-1584 (ED431C 2023/02). Ministerio de Ciencia e Innovación, Proxecto PID2021- 10 127531NB-I00 (AEI/10.13039/501100011033/ FEDER, UE) e METALBIO (RED2022-134091-T).

Referencias

- [1] M. J. Hannon and L. J. Childs, *Supramol Chem*, **2004**, *16*, 7–22.
- [2] V. Brabec, S. E. Howson, R. A. Kaner, R. M. Lord, J. Malina, R. M. Phillips, Q. M. A. Abdallah, P. C. McGowan, A. Rodger and P. Scott, *Chem Sci*, **2013**, *4*, 4407.
- [3] J. Rodríguez, F. Battistini, S. Learte-Aymami, M. Orozco and J. L. Mascareñas, *RSC Chem Biol*, **2023**, *4*, 486–493.
- [4] D. Liu, Y. Zhou, Y. Zhang, H. Li, P. Chen, W. Sun, T. Gao and P. Yan, *Inorg Chem*, **2018**, *57*, 8332–8337.
- [5] R. Pedrido, M. Vázquez López, L. Sorace, A. M. González-Noya, M. Cwiklinska, V. Suárez-Gómez, G. Zaragoza e M. R. Bermejo, *Chemical Communications*, **2010**, *46*, 4797–4799.

Comunicación -C22

C22- Complexos bidentados derivados de carborano como potenciais activos biolóxicos.

I. Vázquez-Carballo,¹ A. Sousa-Pedrares¹

¹ Suprabioin Lab, Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela, Campus Vida, 15782, Santiago de Compostela, España. irenvazquez.carballo@usc.es

Palabras chave: Química inorgánica; *o*-carborano; antitumoral, farmacóforo.

Os carboranos son clústeres moleculares de carbono e boro que presentan propiedades físicas e químicas distintivas, con potencial para servir de base ao desenvolvemento de novos farmacóforos grazas á súa versatilidade. Desta maneira, recentemente está xurdindo un gran interese por estes compostos e os seus derivados debido ás súas potenciais aplicacións en química médica antitumoral, sobre todo na terapia por captura neutrónica de boro (BNCT) e coma ligandos anticanceríxenos. [1-3]

Ademais, coma continuación do interese xeral actual cara a síntese, caracterización, estrutura e avaliación biolóxica de complexos de Pd(II) [4], nesta comunicación preséntanse un exemplo de complexo de paladio cun ligando baseado en carborano, [PdCl₂((B₃Cc)-iminofosforano-fosfina-orto-carborano)], (Figura 1) cunha prometedora actividade anticanceríxena.

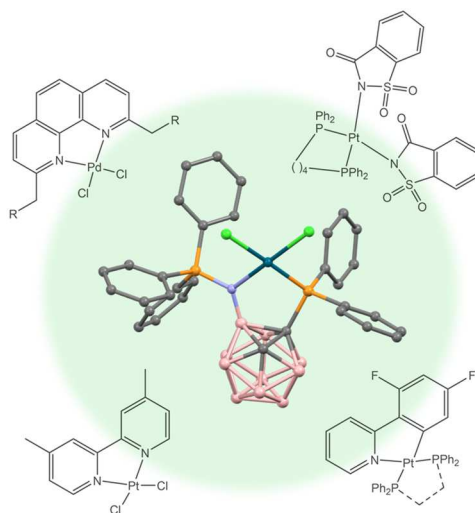


Fig.1. Estruturas de potenciais complexos anticanceríxenos, sendo o central o presentado nesta comunicación.

Agradecementos: Esta investigación recibiu financiación das seguintes axudas: Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria (Xunta de Galicia) baixo o proxecto 2018GR CGI-1584 (ED431C2018/13), da rede MetalBIONetwork (ED431D2017/01) e do Ministerio de Ciencia e Innovación (Spain) baixo o proxecto PID2021-127531NB-I00 e RED2022-134091-T.

Referencias

- [1] M. Scholz, E. Hey-Hawkins, *Chem. Rev.*, **2011**, *111*, 7035-7062.
- [2] F. Ali, N. S. Hosmane, Y. Zhu, *Molecules*, **2020**, *25*, 828-852.
- [3] Y. Chen, F. Du, L. Tang, J. Xu, Y. Zhao, X. Wu, M. Li, J. Shen, Q. Wen, C.H. Cho, Z. Xiao, *Mol. Ther. Oncolytics*, **2022**, *24*, 400-416.
- [4] V. T. Yilmaz, C. Içsel, M. Aygun, M. Erkisa, E. Ulukaya, *Eur. J. Med. Chem.*, **2018**, *158*, 534-547.

BASES, ACTAS e PREMIADOS

Bases dos premios das IV Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da Química (XINQ_4)

Na IV Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da Química (XINQ_4) entregaranse premios ás mellores comunicacións na opinión do público e do comité científico en cada unha das categorías presentes (Máster e Doutoramento). As persoas premiadas serán recoñecidas con cadanseu agasallo valorado aproximadamente en 150 €.

O premio do público concederáse mediante votación telemática secreta das persoas presentes nas sesións. En cada sesión (xa sexa doutoramento ou máster) elixirase un gañador-a (quen reciba máis votos) que se clasificará para a final en cada unha das categorías.

No caso de producirse un empate na sesión, clasificaranse conxuntamente para a devandita final as persoas cun maior número de votos.

Unha vez finalizadas todas as sesións, elixirase o gañador de cada categoría mediante votación telemática anónima. No caso de producirse un empate a votos entre as persoas finalistas, procederáse a outra votación ata conseguir unha única persoa gañadora por categoría.

O premio do xurado será decidido polo comité científico en reunión secreta trala adxudicación do premio do público. O comité científico outorgará un premio por cada unha das categorías (doutoramento ou máster) mediante deliberación entre os seus membros.

Acta do premio do público

Tras a selección en cada unha das sesións, mediante votación popular, anónima e telemática, das mellores exposicións, procedeuse, do mesmo xeito, á votación final entre os candidatos seleccionados en cada categoría, outorgándose os seguintes premios do público:

Premio da categoría Máster

Laura Parada Pérez coa comunicación “*Catálise de Rutenio en Química Bioortogonal: Viabilidade de novos métodos baseados en intermedios vinilidénicos*”.

Premio da categoría Doutoramento.

Ana Seijas Cerceda coa comunicación “*Optimización da edición xenética CRISPR/Cas9 mediante novas nanopartículas lipídicas: un enfoque fisicoquímico e funcional*”.

Acta do premio do xurado

O comité científico da IV Xuntanza de investigador@s nov@s no ámbito da Química, actuando como xurado, reunido o día 12 de novembro do 2024 e tralas oportunas deliberacións, acordou outorgar os seguintes premios:

Premio do xurado na categoría Máster

David Montoto Pintos coa comunicación *“Terapia fotodinámica dirixida contra células nai do cancro autofluorescentes”*.

Premio do xurado na categoría Doutoramento.

Adrián Rivas Saborido coa comunicación *“Transformacións bioortogonais promovidas por luz visible”*.

Os premios foron entregados aos gañadores no acto institucional da celebración do San Alberte Magno, patrón das ciencias puras, o día 14 de novembro de 2024 polo decano da Facultade de Química Jesus Sanmartin Matalobos.

GALERIA DE FOTOS

Fotos d@s gañador@s na entrega de premios.



Fotos d@s participantes na XINQ-4 cos gañadores en primeira fila.

