

# Encuentro Universitario de Estudiantes de Química y Áreas Afines

## Memorias

ISSN: 2500-8587 (En línea) • Edición Nro. 1 • Año 2014



# Encuentro Universitario de Estudiantes de Química y Áreas Afines

## MEMORIAS

Edición Nro. 1 - Año 2014

ISSN: 2500-8587 (En línea)



Programa de Química  
Facultad de Ciencias Básicas  
Universidad del Atlántico  
Octubre 30 y 31 de 2014

## COMITÉ ACADÉMICO

### **Dary Luz Mendoza Meza**

Química Farmacéutica. Magister en Ciencias Bioquímicas  
Coordinadora Grupo de Investigación en Productos Naturales y  
Bioquímica de Macromoléculas  
Coordinadora Misional de Currículo  
Programa de Química

### **Carlos Díaz Uribe**

Químico. Doctor en Ciencias Químicas  
Coordinador Grupo de Investigación en Fotoquímica y Fotobiología  
Coordinador Misional de Extensión y Proyección Social  
Programa de Química

### **Alfredo Pérez Gamboa**

Licenciado en Biología y Química. Magister en Ciencias Químicas  
Coordinador Grupo de Investigación en Heterociclos  
Coordinador de Autoevaluación  
Programa de Química

### **Edgardo Angulo**

Químico. Magister en Ciencias Químicas  
Coordinador del Grupo de Investigación en Microalgas  
Programa de Química

## COMITÉ ORGANIZADOR

**Catrín Mendoza Valencia**

Química. Magister en Ciencias Forenses.  
Apoyo al Comité Misional de Extensión y Proyección Social

**Jackeline Muñoz Zuñiga**

Química. Doctora en Ciencias Químicas  
Apoyo al Comité Misional de Extensión y Proyección Social

**Eduardo Martínez Maury**

Químico Farmacéutico. Magister en Ciencias Químicas  
Coordinador Misional de Bienestar  
Programa de Química

**Luis Fernando Saldarriaga Ospino**

Químico. Magister en Ciencias Químicas  
Coordinador Programa de Química

## COMITÉ DE APOYO

**Herman Ruíz Calderin.** Estudiante IX Semestre del Programa de Química.

**Jiress Florez Santiago.** Estudiante IX Semestre del Programa de Química.

**Vivianna Ortega Afanador.** Estudiante X Semestre del Programa de Química.

**Laura Polo.** Estudiante VIII Semestre Programa de Química.

**Camila Tabares.** Estudiante X Semestre del Programa de Química.

**Ivonne Valenzuela.** Estudiante X Semestre del Programa de Química.

**Meriselen Rodríguez Camargo.** Estudiante X Semestre del Programa de Química.

**Lauren Fernández Vega.** Estudiante X Semestre del Programa de Química.

**Giselle De Oro.** Estudiante de IX Semestre del Programa de Química

**Abraham Scoll.** Estudiante X Semestre del Programa de Química

# PATROCINADORES



## CONFERENCISTAS INVITADOS

### **ALBEIRO ALONSO RESTREPO COSSIO.**

PhD in Chemistry. University of Connecticut.  
Conferencia: La estructura molecular del agua vista desde la química computacional.



### **JORGE ROPERO VEGA.**

Doctor en Química, Universidad de Puerto Rico.  
Conferencia: Diseño de Experimentos y Análisis Multi-variable



### **JUAN FERNANDO ORREGO MIRANDA.**

Doctor en Química de la Universidad de Antioquía.  
Conferencia: Mecanismos de Oxidación de Materiales Carbonosos



### **CARMEN STELLA MOSQUERA VIVAS.**

Candidata a Doctora en Química,  
Universidad Nacional.  
Conferencia: Validación de Métodos de Extracción de Plaguicidas en Suelos y Aguas.



### **RONALD MAURICIO GARCÍA GÓMEZ**

Magister en Ciencias Químicas  
Conferencia: 100 años de la cristalografía: conceptos y aplicaciones modernas.

## PRESENTACIÓN

El Programa de Química de la Universidad del Atlántico fue creado mediante el Acuerdo Académico 010 del 14 de marzo del 2000 y cuenta con registro SNIES No. 10223 de 02 de noviembre de 2000. Recibe su primera corte en febrero de 2002, constituyéndose en el segundo programa de química en la Región Caribe Colombiana.

Para dar cumplimiento a lo establecido en la misión del programa: *“formar químicos encaminados hacia un desarrollo humano integral que incluya la capacidad investigativa y tecnológica”*, se institucionaliza a partir del año 2012, la realización de la Semana de la Química, la cual contempla actividades académicas, culturales y deportivas, fijándose como fecha para su realización la última semana del mes de octubre, incluyendo el Día internacional del Químico (31 de octubre).

Este año, se desarrolló el **PRIMER ENCUENTRO DE ESTUDIANTES DE QUÍMICA Y ÁREAS AFINES**, cuyo objetivo fue divulgar ante la comunidad universitaria, los trabajos de semilleros y proyectos de grado en curso, orientados en su mayoría por docentes de la Universidad del Atlántico. El evento se llevó a cabo en el Centro de Convenciones de la Universidad, próximo a inaugurarse.

En esta publicación se presentan los resúmenes de los trabajos presentados.

## CONTENIDO

1. ÁREA DE FISICOQUÍMICA.....	13
Actividad fotocatalítica del TiO <sub>2</sub> dopado con Cu en la degradación de azul de metileno bajo luz visible. <i>Photocatalytic activity of TiO<sub>2</sub> doped with Cu in the degradation of methylene blue under visible light.</i> .....	14
Actividad fotocatalítica del In <sub>2</sub> S <sub>3</sub> en la degradación de azul de metileno bajo luz visible. <i>Photocatalytic activity of In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> of degradation methylene blue under visible light.</i> .....	15
Degradación de azul de metileno por procesos de oxidación avanzada: estudio cinético. <i>Methylene blue degradation by advanced oxidation methods: kinetic study.</i> .....	17
2. ÁREA QUÍMICA ANALÍTICA.....	19
Propuesta para el desarrollo de un modelo de calibración multivariable acoplado a la Espectroscopía de Infrarrojo cercano para determinar la concentración de biodiesel en mezclas de biodiesel/diésel. <i>Proposal to development of a multivariate model calibration coupled to near Infrared Spectroscopy to determining biodiesel concentration in biodiesel/diesel mixtures.</i> .....	20
Diseño de un método analítico para la detección de metabolitos de Diazepam y Clonazepam mezclado con Marihuana y Cocaína en fluido oral. <i>Design of an method analytical for the detection of metabolites of Diazepam and Clonazepam mixed with Marijuana and Cocaine on oral fluid.</i> .....	22
3. ÁREA QUÍMICA INORGÁNICA Y CIENCIAS DE LOS MATERIALES.....	24
Síntesis y caracterización de carburo a base del Heteropolioxonion tipo Anderson (NH <sub>4</sub> ) <sub>4</sub> [NiMo <sub>6</sub> O <sub>24</sub> H <sub>6</sub> ]•5H <sub>2</sub> O soportado sobre alúmina para la hidrodesulfuración de Tiofeno. <i>Synthesis and characterization of alumina supported carbide based (NH<sub>4</sub>)<sub>4</sub>[NiMo<sub>6</sub>O<sub>24</sub>H<sub>6</sub>]•5H<sub>2</sub>O Anderson-type Heteropolyoxoanion on Thiophene hydrodesulfurization.</i> .....	25

Polioxometalatos de Ni-Mo modificados por carburación para la hidrodeshulfuración de Tiofeno. <i>Ni-Mo polyoxometalates modified by carburation on Thiophene hydrodesulfurization</i> .....	27
4. ÁREA DE QUÍMICA ORGANICA .....	29
Estudio experimental, espectroscópico y computacional de nuevos derivados de 3-amino-4-carbonitrilo-2,5,7-triaril-1,8-naftiridinas con posibles aplicaciones biomédicas y como nuevos materiales ópticos. <i>Experimental study, spectroscopic and computational novel 3-amino-4-carbonitrile-2,5,7-triaryl-1,8-naphthyridines with biomedical applications and as possible new optical materials</i> .....	30
Obtención de sistemas furano/piranopirazólicos vía reacción Diels-Alder con demanda inversa electrónica. <i>Obtaining systems furan/piranpyrazole Diels-Alder reaction route demand with electronic reverse</i> .....	31
Síntesis de derivados Arilidénicos de 1-fenil-3-metil-2-pirazolina-5-ona (Edaravona) inducida por radiación de microondas. <i>Synthesis of Arylidene derivatives 1-phenyl-3-methyl-2-pyrazoline-5-one (Edaravone) induced by microwave radiation</i> .....	32
Estudio sintético y computacional de nuevos derivados de 2-aminopiridin-3-carbonitrilo que poseen el fragmento [1,3] Benzodioxol. <i>Synthetic and computational study of derivatives of 2-aminopyridine-3-carbonitrile possess fragment [1,3] Benzodioxol</i> .....	34
CIANOACETILACIÓN DE 2,4,6-TRIAMINOPIRIMIDINA COMO PASO INTERMEDIO PARA LA OBTENCIÓN DE SISTEMAS PIRIDO[2,3-d]PIRIMIDÍNICOS. <i>Cianoacetylation of 2,4,6-triaminopyrimidine as an intermediate step for obtaining systems pyrido[2,3-d]pyrimidines</i> .....	35
Preparación de Heterocicloalcanonas de conformación restringida en la serie del Oxazol e Isoxazol.....	37
Reacción catalizada con ácido ftálico en la metodología tándem de Adnu/e/imino Diels-Alder: síntesis de hexahidropirano(furo) tetrahydroquinolinas sustituidas.	

	<i>Acid catalyzed reaction phthalic methodology in tándem of Adnu/e/imino Diels-Alder: synthesis of hexahidropiran-(furo)tetrahydroquinolines substituted. ....</i>	39
5. ÁREA DE BIOQUÍMICA .....		40
	Evaluación de la actividad de captación del ABTS <sup>++</sup> por extractos de diferente polaridad del escarabajo <i>Ulomoides dermestoides</i> cultivado <i>In vitro</i> . <i>ABTS<sup>++</sup> scavenging activities of extracts of different polarity from Ulomoides dermestoides beetles cultivated In vitro. ....</i>	41
	Producción de anticuerpos policlonales en ratas Wistar con un oligopéptido antigénico de cistatinas de nematodos. <i>Production of polyclonal antibodies in Wistar rats with an antigenic oligopeptide of nematode cystatins. ....</i>	43
6. ÁREA DE BIOTECNOLOGÍA .....		44
	Lipasas de <i>Pachira aquatica</i> y <i>Carica papaya</i> como biocatalizadores potenciales en la reacción de transesterificación. <i>Pachira aquatica Carica papaya as potentials biocatalysts in the transesterification reaction.....</i>	45
	Degradación de hidrocarburos aromáticos presentes en las aguas residuales de un proceso de deshidratación de gas natural por medio de la microalga <i>Chlorella sp.</i> Viva en suspensión e inmovilizada. <i>Degradation of hydrocarbons aromatic present in the water waste of a process of dehydration of gas natural by means of the microalga Chlorella sp. Live in suspension and immobilized.</i>	47
	Remoción de naranja de metilo por la microalga <i>Chlorella sp.</i> Muerta y pretratada en suspensión e inmovilizada. <i>Removal of orange methyl by the microalga Chlorella sp., dead and pretreated suspended and immobilized. ....</i>	49
7. QUÍMICA DE PRODUCTOS NATURALES Y DE ALIMENTOS.....		50
	Determinación de la actividad anti-irritante del extracto etanólico de raíz de <i>Cnidioscolus urens L.</i> <i>Determination of the anti-irritating activity of root ethanol extract of Cnidioscolus urens L.....</i>	51
	Evaluación de la capacidad antioxidante del extracto de la cáscara de <i>Citrus sinensis</i> frente a oxígeno singulete. <i>Evaluation of the antioxidant capacity of the extract of Citrus sinensis peel against singlet oxygen. ....</i>	53

Estudio de la estabilidad física y química de la Vitamina C contenida en zumos de naranja ( <i>Citrus sinensis</i> ) y tomate chonto ( <i>Lycopersicum esculentum</i> ) de origen natural. <i>Study of physical and chemical stability of Vitamin C contained in orange juice (Citrus sinensis) and tomato chonto (Lycopersicum esculentum) of natural origin.</i> .....	57
Caracterización química y evaluación de la actividad anti-colinesterasa del aceite esencial de <i>Gliricidia sepium</i> (matarratón). <i>Chemical characterization and evaluation of the anticholinesterase activity of essential oil from Gliricidia sepium (matarratón).</i> .....	59
Actividad antioxidante de extractos etanólicos de Yacón ( <i>Smallanthus sonchifolius Poepp. &amp; Endl</i> ) H. Robinsón, cultivado en Boyacá, Colombia. <i>Antioxidant activity of etanolic extracts of Yacón (Smallanthus sonchifolius Poep. &amp; Endl) H. Robinson, cultivated in Boyacá, Colombia.</i> .....	60
LISTA DE AUTORES .....	62

# **1. ÁREA DE FISICOQUÍMICA**

## **Actividad fotocatalítica del TiO<sub>2</sub> dopado con Cu en la degradación de azul de metileno bajo luz visible. *Photocatalytic activity of TiO<sub>2</sub> doped with Cu in the degradation of methylene blue under visible light.***

Pava Beatriz<sup>1</sup>, Navarro Karen<sup>1</sup>, Ríos Kathy<sup>1</sup>, Díaz Carlos<sup>1</sup>, Vallejo William<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Grupo de Investigación en Fotoquímica y Fotobiología, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad del Atlántico, kilómetro 7 vía Puerto Colombia, PBX: 3197010, belpago@hotmail.com

### **RESUMEN**

**Introducción:** El tratamiento de aguas residuales contaminadas es un problema de interés en la actualidad, los métodos convencionales presentan problemas con algunos tipos de compuestos ya que no permiten su completa degradación. La fotocatalisis presenta una alternativa eficiente en la degradación de colorantes recalcitrantes, en ella se usa radiación electromagnética, un catalizador y oxígeno. El TiO<sub>2</sub> es el semiconductor más usado, por su alta estabilidad química, disponibilidad y bajo costo; pero éste debido a su amplio band gap, es fotoactivo en la irradiación UV, lo que aumenta los costos de implementación. Actualmente, se han desarrollado metodologías para cambiar la fotorespuesta del TiO<sub>2</sub> al rango visible del espectro electromagnético, en este trabajo se estudió la actividad fotocatalítica del TiO<sub>2</sub> dopado con Cu en la degradación de azul de metileno (AM) bajo luz visible.

**Objetivo general:** Determinar la actividad fotocatalítica del TiO<sub>2</sub> dopado con Cu en la degradación de azul de metileno bajo luz visible.

**Metodología:** Se realizó la síntesis del TiO<sub>2</sub> dopado con cobre siguiendo

la metodología descrita por C. Díaz-Uribe et. al. . Se pesó 0,025 g de catalizador y se disolvió en 50 mL de solución de AM 3,7 ppm. Se evaluó la actividad fotocatalítica del TiO<sub>2</sub> (Degussa P-25) y el TiO<sub>2</sub>-Cu en la degradación de AM en un reactor tipo Batch de 100 mL, bajo luz visible en un simulador de luz visible. Las muestras fueron analizadas en un espectrofotómetro visible GENESYS™ 20, Thermo Spectronic a 665 nm.

**Resultados:** La degradación de AM bajo luz visible fue mayor usando TiO<sub>2</sub>-Cu (60,54%) que usando TiO<sub>2</sub> sin dopar (31,01%), debido a que el dopaje permite cambiar la fotorespuesta del TiO<sub>2</sub> al rango visible del espectro electromagnético.

**Conclusión:** Se comprobó que se puede cambiar la fotorespuesta del TiO<sub>2</sub> al rango visible del espectro electromagnético, modificando el band gap, en éste caso usando el dopaje con Cu. La degradación máxima del AM fue de 60,54% que corresponde al catalizador TiO<sub>2</sub>-Cu.

**Palabras clave:** Dióxido de titanio, fotocatalisis, dopaje, band gap, degradación.

## **Actividad fotocatalítica del $\text{In}_2\text{S}_3$ en la degradación de azul de metileno bajo luz visible. *Photocatalytic activity of $\text{In}_2\text{S}_3$ of degradation methylene blue under visible light.***

Ríos Kathy<sup>1</sup>, Pava Beatriz<sup>1</sup>, Navarro Karen<sup>1</sup>, Díaz Carlos<sup>1</sup>, Vallejo William<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Grupo de Investigación en Fotoquímica y Fotobiología, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad del Atlántico, kilómetro 7 vía Puerto Colombia, PBX: 3197010, [milena\\_0507@hotmail.com](mailto:milena_0507@hotmail.com)

### **RESUMEN**

**Introducción:** La descontaminación de aguas actualmente es un tema de gran interés ya que se busca optimizar las propiedades del agua con cierto grado de contaminación; uno de los contaminantes que se pueden encontrar en aguas es el colorante utilizado para tinturar telas: el azul de metileno (AM). Como alternativa para la descontaminación en los últimos años se han propuestos los Procesos de Oxidación Avanzada (PAO), estos procedimientos se caracteriza por la generación de cantidades importantes de especies reactivas del oxígeno (ERO's) como los radicales libres o los aniones superóxidos; estas especies permiten degradar materia orgánica. Uno de los PAO más investigados en la actualidad es la fotocatalisis que se encarga de degradar dichos contaminantes utilizando la luz visible (luz solar), un fotocatalizador y oxígeno. En este trabajo se utilizó como semiconductor el  $\text{In}_2\text{S}_3$  (que se caracteriza por tener un band gap bajo), radiación visible y una solución de azul de metileno como solución problema.

**Objetivo general:** Determinar la actividad fotocatalítica del  $\text{In}_2\text{S}_3$  en la degradación de azul de metileno.

**Metodología:** El  $\text{In}_2\text{S}_3$  se sintetizó por el método CBD, como fuente de los iones  $\text{S}^{2-}$  y  $\text{In}^{3+}$  se utilizaron precursores como tioacetamida ( $\text{CH}_3\text{NH}_2\text{CS}$ ) grado reactivo (GR) marca Scharlau y cloruro de indio ( $\text{InCl}_3$ ). Se adicionó 0,025 g de  $\text{In}_2\text{S}_3$  a una solución de AM 4,7 ppm, se sometió a irradiación en un simulador de luz visible, el proceso fotocatalítico fue seguido cada 5 minutos en un espectrofotómetro visible GENESYS™ 20, Thermo Scientific; el estudio se realizó variando la temperatura.

**Resultados:** El  $\text{In}_2\text{S}_3$  utilizado demostró actividad fotocatalítica a la hora de la degradación del contaminante AM; los resultados de estudio de temperatura “no calentamiento” y “calentamiento” indicaron que utilizando la condición de no calentamiento se obtuvo un valor de degradación más alto. Con el fin de comparar los resultados obtenidos se utilizó  $\text{TiO}_2$  Degussa P-25 como patrón; el  $\text{In}_2\text{S}_3$  demostró

mayor actividad fotocatalítica que el  $\text{TiO}_2$  bajo irradiación visible.

**Conclusión:** Se comprobó que el semiconductor  $\text{In}_2\text{S}_3$  presenta actividad fotocatalítica en la degradación de Azul de Metileno.

Bajo radiación visible; el  $\text{In}_2\text{S}_3$  degrada de manera más eficiente que el  $\text{TiO}_2$  Degussa P-25.

**Palabras clave:**  $\text{In}_2\text{S}_3$ , fotocatálisis, azul de metileno, procesos de oxidación avanzada.

## **Degradación de azul de metileno por procesos de oxidación avanzada: estudio cinético. *Methylene blue degradation by advanced oxidation methods: kinetic study.***

Barrios Gustavo<sup>1</sup>, Ávila Huver<sup>1</sup>, Bermúdez Karolyn<sup>1</sup>, Dávila Loraine<sup>1</sup>, Hernández Ana<sup>1</sup> Luna Daniela<sup>1</sup>, Nieves Vianca<sup>1</sup>, Solano Wilfrido<sup>1</sup>, Vargas Milena<sup>1</sup>, Vega Dariana<sup>1</sup>, Vera Kevin<sup>1</sup>, Pava Beatriz<sup>2</sup>, Navarro Karen<sup>2</sup>, Díaz Carlos<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Programa de Ingeniería Química, Facultad de Ingenierías, Universidad del Atlántico, kilómetro 7 vía Puerto Colombia, PBX: 3197010,

<sup>2</sup> Grupo de Investigación en Fotoquímica y Fotobiología, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad del Atlántico, kilómetro 7 vía Puerto Colombia, PBX: 3197010, [belpago@hotmail.com](mailto:belpago@hotmail.com)

### **RESUMEN**

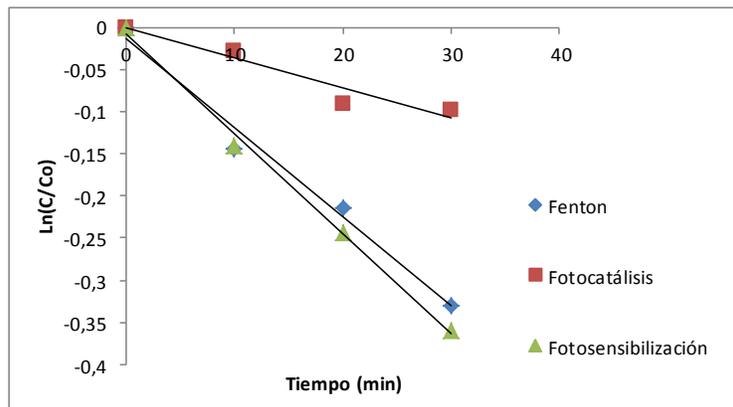
**Introducción:** Los procesos de oxidación avanzada (POA) pueden definirse como métodos que implican la formación de radicales hidroxilo. Estos radicales son capaces de oxidar compuestos orgánicos principalmente por abstracción de hidrógeno o por adición electrofílica a dobles enlaces generándose radicales orgánicos, iniciándose una serie de reacciones de degradación oxidativa que pueden conducir a la completa mineralización de los contaminantes. Los POA son especialmente útiles como pretratamiento antes de un tratamiento biológico frente a contaminantes resistentes a la biodegradación o como proceso de pos-tratamiento para mejorar las características de las aguas antes de la descarga a los cuerpos receptores. Dentro de los principales métodos fotoquímicos se pueden mencionar: reacciones Fenton, reacciones con ayuda de semiconductores y fotosensibilización. Este trabajo consistió en el estudio cinético de la degradación del colorante Azul de

Metileno bajo distintos procesos de oxidación avanzada.

**Objetivo general:** Realizar un análisis comparativo sobre los procesos de oxidación avanzada utilizados para la degradación de azul de metileno.

**Metodología:** Se preparó una solución de azul de metileno a una concentración de  $8 \times 10^{-7}$  M. Para la reacción tipo Fenton se utilizó una sal de sulfato ferroso y peróxido de hidrógeno a un pH de 3.0. Para el proceso de fotocatalisis heterogénea se utilizó  $\text{TiO}_2$  como semiconductor y en la fotosensibilización ftalocianina de zinc.

**Resultados:** Todas las reacciones se ajustaron a una cinética de pseudo-primer orden. El proceso más efectivo para la degradación de metileno fue el de Fenton, debido a que se encuentra en fase homogénea y en él se generan especies más reactivas que en el proceso de fotosensibilización.



**Gráfico.** Cinética de degradación de azul de metileno

**Conclusión:** El proceso de oxidación avanzada que presenta el mayor porcentaje de degradación de azul de metileno es el Fenton, seguido del proceso de fotosensibilización y el fotocatalítico con  $TiO_2$ .

**Palabras clave:** Dióxido de titanio, fotocatalisis, degradación, azul de metileno.

## **2. ÁREA QUÍMICA ANALITICA**

**Propuesta para el desarrollo de un modelo de calibración multivariable acoplado a la Espectroscopía de Infrarrojo cercano para determinar la concentración de biodiesel en mezclas de biodiesel/diésel. *Proposal to development of a multivariate model calibration coupled to near Infrared Spectroscopy to determining biodiesel concentration in biodiesel/diesel mixtures.***

Hernández Garcés Jorge<sup>1</sup>, Fontalvo Gómez Miriam<sup>2</sup>, Saldarriaga Ospina Luis<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Estudiante de Trabajo de Grado. Programa de Química. Universidad del Atlántico– Km 7 Vía Puerto Colombia. E-mail: [jeliecerhernandez@mail.uniatlantico.edu.co](mailto:jeliecerhernandez@mail.uniatlantico.edu.co)

<sup>2</sup>. Docentes Programa de Química. MSc

## RESUMEN

**Introducción:** Los combustibles fósiles cubren gran parte de la demanda energética a nivel mundial. Esto ha conllevado a la búsqueda de nuevas fuentes de energía como el biodiesel, que disminuyan el impacto ambiental negativo causado por la emisión de gases de efecto invernadero producidos durante la combustión de los combustibles convencionales. Hasta el año 2012 el gobierno nacional había establecido que los motores diésel en Colombia deben tener una flexibilidad para funcionar con una mezcla mínima del 10% en biodiesel. La norma NTC 5444, establece los parámetros de calidad para evaluar el biodiesel, pero no contempla la caracterización de las mezclas de biodiesel/diésel. La espectroscopia de infrarrojo cercano

acoplada a métodos de análisis multivariables, es una alternativa utilizada en el control de calidad de procesos y productos, para monitorear y generar modelos de calibración debido a su rapidez, fácil adaptación y por ser una técnica no destructiva.

**Objetivo general:** Desarrollar un método de calibración multivariable acoplado a la espectroscopia de infrarrojo cercano para determinar la concentración de biodiesel en mezclas de biodiesel/diésel.

**Metodología:** La metodología para la siguiente propuesta de investigación se resume en el siguiente diagrama de flujo.



**Figura.** Diagrama de flujo de la metodología a seguir.

**Resultados esperados:** Se pretende que el NIR acoplado a métodos de calibración multivariable sea una herramienta de análisis de gran utilidad para la determinación del contenido de biodiesel en mezclas de biodiesel/diésel en cualquier rango de concentración. Obtener las señales características de los espectros del NIR para los metil ésteres, grupos carbonilo, entre otras, de tal manera

que el modelo de calibración prediga con un bajo error relativo las concentraciones de muestras que estén por encima de la concentración del límite superior en el modelo de calibración desarrollado.

**Palabras clave:** Espectroscopia de infrarrojo cercano, biodiesel, diésel, análisis multivariable.

# Diseño de un método analítico para la detección de metabolitos de Diazepam y Clonazepam mezclado con Marihuana y Cocaína en fluido oral. *Design of an method analytical for the detection of metabolites of Diazepam and Clonazepam mixed with Marijuana and Cocaine on oral fluid.*

Ruiz Calderin Herman<sup>1,2</sup>, Florez Santiago Jiress<sup>1,2</sup>, Mendoza Valencia Catrin<sup>1,2</sup>,  
Muñoz Zúñiga Jackeline<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Grupo de Investigación en Productos Naturales y Bioquímica de Macromoléculas. Programa de Química. Facultad de Ciencias Básicas. Universidad del Atlántico Barranquilla-Colombia. Km 7 Vía Puerto Colombia. <sup>2</sup>Semillero de Investigación de Análisis Forenses. E-mail: [hruizc89@gmail.com](mailto:hruizc89@gmail.com), [josephflorez@mail.uniatlantico.edu.co](mailto:josephflorez@mail.uniatlantico.edu.co)

## RESULTADOS

**Introducción:** Según McKernan et al., las benzodicepinas son psicofármacos y psicotrópicos que actúan sobre el sistema nervioso central. Durante la última década, se ha observado una tendencia al abuso de benzodicepinas, mezcladas con metadona, marihuana, cocaína y heroína. Por esta razón, resulta de interés el estudio de métodos de análisis para lograr la identificación de éstas sustancias, para lo cual se utilizará un fluido biológico como matriz. Se espera que, ésta investigación contribuya al servicio en entidades que frecuentemente se enfrentan a personas consumidoras de éstos psicofármacos.

**Objetivo general:** Diseñar un método analítico para la detección de metabolitos de Diazepam y Clonazepam mezclado con marihuana y cocaína en fluido oral.

**Metodología:** Toma y recolección de muestra: La muestra se tomará por

duplicado a 180 personas en ayunas: Primera muestra: 24h después de la ingestión del psicofármaco; se conformarán 3 grupo de estudio de 60 cada uno: G1.: En tratamiento\* con Diazepam, G2.: En tratamiento\* con clonazepam y GC(grupocontrol).: Sin tratamiento. Segunda muestra: 72h siguientes a la primera muestra, se harán otros grupos de estudio según la afirmación de consumo del paciente: G-A: Consumo de Diazepam; G-B: Consumo de Clonazepam; G-C: Consumo de Marihuana; G-D: Consumo de Cocaína; G-AC: Consumo Diazepam+Marihuana; G-AD: Consumo Diazepam+Cocaína; G-BC: Consumo Clonazepam+Marihuana; G-BD: Consumo Clonazepam+Cocaína; G-E: Grupocontrol\*\*.

Seguidamente se colectará en un tubo de ensayo plástico esterilizado con tapa y se conservará a temperatura entre 2°C y 8°C, para evitar su descomposición. Luego, se

procederá a medición del pH, extracción líquido-líquido, derivatización y análisis por cromatografía de gases.

**Resultados esperados:** Se espera diseñar un método analítico que detecte metabolitos de clonazepam o diazepam mezclados con marihuana y cocaína mediante cromatografía de gases, utilizando como matriz biológica el fluido oral. Además, los

resultados obtenidos se evaluarán con parámetros estadísticos, que validen la técnica utilizada.

**Palabras clave:** Clonazepam, diazepam, fluido oral, cromatografía de gases.

\*Pacientes del (CARI) de Barranquilla.

\*\*No consumidores de GA,GB,GC y GD.

# **3. ÁREA QUÍMICA INORGÁNICA Y CIENCIAS DE LOS MATERIALES**

# Síntesis y caracterización de carburo a base del Heteropolioxonion tipo Anderson $(\text{NH}_4)_4[\text{NiMo}_6\text{O}_{24}\text{H}_6]\cdot 5\text{H}_2\text{O}$ soportado sobre alúmina para la hidrodesulfuración de Tiofeno. *Synthesis and characterization of alumina supported carbide based $(\text{NH}_4)_4[\text{NiMo}_6\text{O}_{24}\text{H}_6]\cdot 5\text{H}_2\text{O}$ Anderson-type Heteropolyoanion on Thiophene hydrodesulfurization.*

Julio Javier<sup>1</sup>, Puello Esneyder<sup>1</sup>, Brito Joaquín<sup>2</sup>

<sup>1</sup>. Universidad del Atlántico, Antigua vía Puerto Colombia Km. 7 Atlántico, Colombia.. E-mail: [jjulio@uniatlantico.edu.co](mailto:jjulio@uniatlantico.edu.co).

<sup>2</sup> Laboratorio de Fisicoquímica de Superficies. Centro de Química, IVIC. Apto 21827. Caracas, Venezuela.

## RESUMEN

**Introducción:** Los carburos han adquirido gran importancia en el área de la catálisis puesto que poseen propiedades fisicoquímicas únicas, tales como alto punto de fusión, dureza, y resistencia a la corrosión y hoy en día son considerados como los posibles sustitutos de los catalizadores convencionales. Por esta razón enfocamos la investigación en la síntesis de éstos.

**Objetivo general:** Sintetizar y evaluar la actividad catalítica del carburo a base de heteropolioxometalatos tipo Anderson  $(\text{NH}_4)_4[\text{NiMo}_6\text{O}_{24}\text{H}_6]\cdot 5\text{H}_2\text{O}$  soportado sobre  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ , en la reacción de hidrodesulfuración, usando como molécula modelo el tiofeno.

**Metodología:** La síntesis de la fase tipo Anderson  $(\text{NH}_4)_4[\text{NiMo}_6\text{O}_{24}\text{H}_6]\cdot 5\text{H}_2\text{O}$ , se llevó a cabo por precipitación de soluciones acuosas de  $(\text{NH}_4)_6[\text{Mo}_7\text{O}_{24}]\cdot 6\text{H}_2\text{O}$  ( $T \leq 60^\circ\text{C}$  para favorecer la disolución) y  $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2\cdot 6\text{H}_2\text{O}$  en proporciones estequiométricas, a temperatura ambiente, agitación constante y pH

entre 5 y 6. Una vez obtenido el precipitado, se filtró y lavó agua destilada, para posteriormente secar a  $110^\circ\text{C}$ . Seguidamente esta fase tipo Anderson se soportó sobre alúmina por impregnación en equilibrio a exceso de volumen de poros de la  $\gamma\text{-Al}_2\text{O}_3$ .

**Carburación** Se sometió el  $\text{NiMo}_6\text{-Al}$  a tratamiento de carburación bajo una atmósfera de  $20\%\text{CH}_4/\text{H}_2$  (100 mL/min) a una  $3^\circ\text{C}/\text{min}$ .

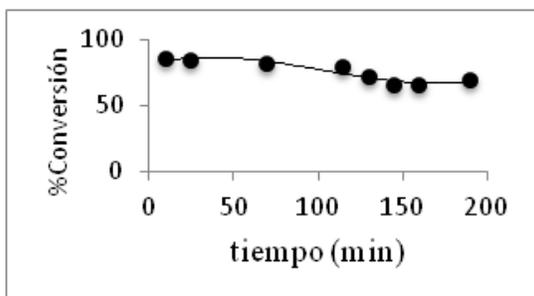
## Resultados

**Análisis textural** En la tabla se puede observar una vez soportada la fase activa esta disminuyó el área de la alúmina. Los dos materiales presentaron un diámetro de poro en el rango mesoporoso ( $2\text{ nm} < d < 50\text{ nm}$ ).

**Tabla.** Propiedades texturales del soporte y el carburo soportado.

Sólido	$S_{\text{BET}}$ ( $\text{m}^2/\text{g}$ )	$r_p$ (nm)
$\text{Al}_2\text{O}_3$	109	9,6
$\text{NiMo}_6\text{C}/\text{Al}$	73	11,2

Evaluación catalítica. Es evidente que el catalizador presenta una buena estabilidad después de 2 horas de reacción con una actividad catalítica HDS de alrededor de 80%.



**Figura.** Actividad HDS carburo NiMo<sub>6</sub>-Al.

**Conclusión:** El NiMo<sub>6</sub>C presentó una baja cristalinidad, lo cual deja a

entrever que los cristales de estas fases podrían ser demasiado pequeños u ocurrió una buena dispersión de la fase activa sobre el soporte. El área superficial del NiMo<sub>6</sub>C fue menor que el presentado por la alúmina, debido al colapso de la estructura al momento de realizar la impregnación. Este catalizador NiMo<sub>6</sub>C/ Al presentó una buena actividad en la reacción de hidrodesulfuración (HDS).

**Palabras**

**clave:**

Heteropolioxometalatos tipo Anderson, carburos, hidrodesulfuración.

# Polioxometalatos de Ni-Mo modificados por carburación para la hidrodesulfuración de Tiofeno. *Ni-Mo polyoxometalates modified by carburation on Thiophene hydrodesulfurization.*

Ronald J. Parra<sup>1</sup>, Puello Esneyder<sup>1\*</sup>, Brito Joaquín<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Línea de Investigación en Oxi/Hidrotratamiento Catalítico, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad del Atlántico. Antigua vía Puerto Colombia Km 7. Barranquilla, Colombia. [Ronaldpp08@yahoo.com](mailto:Ronaldpp08@yahoo.com)

<sup>2</sup> Laboratorio de Físicoquímica de Superficies. Centro de Química, IVIC. Apto 21827. Caracas, Venezuela.

## RESUMEN

**Introducción:** Los problemas de contaminación ambiental ocasionados por la combustión de los derivados del petróleo han llevado a implementar normas para disminuir el contenido de azufre en combustibles en diésel y gasolina. Con la meta de reducir el contenido de azufre en los combustibles esta investigación se centró en la síntesis de carburos Ni-Mo en fase tipo Anderson a partir de sales de los elementos de interés. Los polioxometalatos tipo Anderson muestran grandes ventajas principalmente relacionadas con su estructura. Tiene un ordenamiento regular, que les facilita una combinación satisfactoria con diversos metales asegurando una buena uniformidad en su interacción, al carburar estos compuestos vamos optar un alto punto de fusión, mayor dureza, y resistencia a la corrosión, además que han exhibido buenas actividades catalíticas.

**Objetivo general:** Evaluar los efectos de la carburación en la hidrodesulfuración de tiofeno utilizando catalizadores a base de polioxometalatos Ni-Mo-W.

**Metodología:** La preparación de las fases activas tipo Anderson  $(\text{NH}_4)_4[\text{NiMo}_6\text{O}_{24}\text{H}_6] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ , se realizó por el método co-precipitación de soluciones acuosas de heptamolibdato de amonio, paratungstato de amonio y nitrato de níquel hexahidratado en proporciones estequiométricas. Los precursores obtenidos fueron sometidos a carburación a 800°C (3°C/min) en una corriente de CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub> al 20%. Se caracterizaron por difracción de rayos X de polvos (DRX) y el método de B.E.T.

### Resultados:

#### Isotermas de adsorción.

En la figura se aprecia los resultados de las isotermas de adsorción-desorción de N<sub>2</sub> de los precursores oxídicos. Se puede observar tipo de material obtenido. Las isotermas que se aprecian para todos los materiales son tipo IV característico de los materiales mesoporosos. Estos valores son confirmados por la distribución de tamaño de poro de estos materiales, en el que el

diámetro promedio poro es de 10-11 nm en el intervalo de mesoporosos.

### Propiedades texturales

En la tabla se aprecia los valores de área superficial, diámetro de poro y volumen de poro de los precursores y los carburos de Ni-Mo-W. Se puede evidenciar que los precursores oxídicos tienen muy poca área específica, mientras que las área de los carburos disminuyeron en comparación con los óxidos posiblemente por el cambio de red cristalina.

**Tabla.** Propiedades texturales de los sólidos sintetizados.

Materiales	$S_{BET}$ ( $m^2/g$ )	$r_p$ (nm)	$V_p$ ( $cm^3/g$ )
NiMo <sub>3</sub> W <sub>3</sub> -O	4	12	0,0057
NiMo-O	6	9	0,0034
NiMoW-C	4	10	0,0087
NiMo-C	4	14	0,024

### Difracción de rayos X.

Los difractogramas de los sólidos carburados se encontraron fases de  $\beta$ -Mo<sub>2</sub>C (PDF N° 11-0680), NiC (PDF N° 14-0020),  $\beta$ -WC (PDF N° 20-1315), W<sub>2</sub>C (PDF N° 25-1047) figura 2.

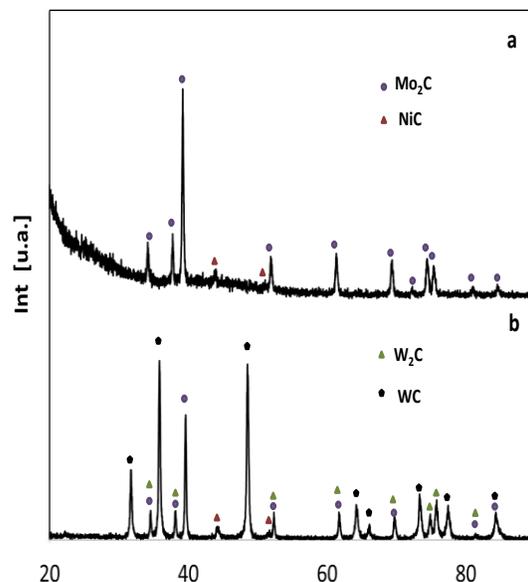


Figura. Difractograma de los materiales NiMo<sub>6</sub>-C (a), (b) NiMo<sub>3</sub>W<sub>3</sub>-C.

### Conclusión:

- Los precursores oxídicos y los carburos presentaron pequeñas áreas superficiales entre 2-10  $m^2/g$ .
- El diámetro promedio de los poros se encuentra entre 10 y 11 nm.
- Los DRX de los sólidos carburados mostraron las fases Mo<sub>2</sub>C, NiC, WC y W<sub>2</sub>C.

**Palabras clave:** heteropolimetallatos tipo Anderson; carburos; hidrodesulfuración.

# **4. ÁREA DE QUÍMICA ORGANICA**

**Estudio experimental, espectroscópico y computacional de nuevos derivados de 3-amino-4-carbonitrilo-2,5,7-triaril-1,8-naftiridinas con posibles aplicaciones biomédicas y como nuevos materiales ópticos. *Experimental study, spectroscopic and computational novel 3-amino-4-carbonitrile-2,5,7-triaryl-1,8-naphthyridines with biomedical applications and as possible new optical materials.***

Pérez Gamboa Alfredo<sup>1</sup>, Blanco Acuña Edgar<sup>1</sup>, Fernandez Vega Lauren<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Grupo de Investigación en Síntesis de Heterocíclicos de la Universidad de Atlántico. [efblanco@mail.uniatlantico.edu.co](mailto:efblanco@mail.uniatlantico.edu.co) :

## RESUMEN

**Introducción:** Las naftiridinas se pueden describir como un sistema de dos piridinas fusionadas. La síntesis de sus compuestos derivados ha sido de gran interés, siendo estudiadas desde hace más de 20 años; ya que se conoce que estos derivados tienen aplicación en el tratamiento de enfermedades neurodegenerativas.

Empleando la química computacional se pueden realizar varios cálculos para sistemas moleculares, basándose en diferentes teorías y métodos como los *ab-initio*, semiempírico y teoría del funcional de la densidad (DFT)

**Objetivo general:** Sintetizar una serie de nuevos derivados de la 1,8-naftiridina y realizar el estudio computacional de los productos que se obtengan y sus materiales de partida.

**Metodología:** Para la síntesis de los compuestos 2-amino-3-carbonitrilo-4,6-diarilpiridinas, se partirá de acetofenona, benzaldehídos, acetato de amonio y malononitrilo, empleando

como metodología de síntesis el ultrasonido. La síntesis de las moléculas objetivos se realizará calentando a reflujo, mezclando cantidades equimolares de los precursores, disolviendo en dioxano con sodio metálico. Se recristalizará de etanol.

Para el estudio y análisis computacional de la reacción a estudiar se realizarán cálculos de optimización, frecuencia y energía del punto simple con el método de cálculo DFT (teoría del funcional de la densidad) con el funcional B3LYP, empleando como conjunto base 6-311++g(d,p).

**Palabras clave:** 1,8-naftiridinas, arilidenderivados, funcionales de densidad electrónica.

## **Obtención de sistemas furano/piranopirazólicos vía reacción Diels-Alder con demanda inversa electrónica. *Obtaining systems furan/piranpyrazole Diels-Alder reaction route demand with electronic reverse.***

León Jaramillo Jhair<sup>1</sup>, González López Edwin<sup>1</sup>, Trilleras Vásquez Jorge<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>. Grupo de Investigación en Síntesis de Heterocíclicos. Universidad del Atlántico.  
E-mail: [Jcleon09@gmail.com](mailto:Jcleon09@gmail.com)

### **RESUMEN**

**Introducción:** Los derivados pirazólicos presentan variadas aplicaciones, pero la mayoría de reportes en la literatura detallan procesos con uso de catalizadores, procesos con tiempos prolongados de reacción y costo elevado, condiciones que no son amigables con el medio ambiente, por lo tanto es de interés mejorar e innovar procesos sintéticos para la obtención de derivados pirazólicos.

La síntesis de pirazolonas se ha llevado a cabo bajo la técnica "multicomponente", son reacciones secuenciales que resultan ser muy beneficiosas a la hora de hablar de eficacia, rendimiento y el medio ambiente.

**Objetivo general:** Sintetizar una serie de derivados furano/piranopirazólicos vía reacción de condensación/ciclación Knoevenagel/HeteroDiels-Alder, variando parámetros e induciendo el calentamiento por métodos convencionales y no convencionales a fin de generar una pequeña biblioteca de este tipo de derivados.

**Metodología:** Se sintetizará en primer lugar una serie de derivados arilidénicos de tipo 4-ariliden-5-

pirazolonas mediante una reacción de condensación de Knoevenagel, posteriormente se obtendrán derivados pirazólicos por medio de la reacción hetero/diels-alders con demanda inversa electrónica usando dienófilos oxigenados (2,3-dihidropirano y 2,3-dihidrofurano) para ello, se mezclarán cantidades equimolares de 4-ariliden-5-pirazolona con 2,3-dihidropirano/2,3-dihidrofurano, los ácidos (AcOH, PTSA, InCl<sub>3</sub>, BiNO<sub>3</sub>), agregando solventes (ó sin ellos), variando el método de calentamiento, tal que se determine las mejores condiciones de reacción que beneficie la obtención de los productos. También, se someterá a un proceso, multicomponente tomando cantidades equimolares de 1-fenil-3-metil-2-pirazolina-5-ona, aldehídos aromáticos y 2,3-dihidropirano/2,3-dihidrofurano.

**Resultados esperados:** Se espera obtener una serie de derivados pirazólicos (2,3-dihidropirano y 2,3-dihidrofurano) y caracterizarlos completamente.

**Palabras clave:** Pirazolonas; Hetero/diels-alders, demanda inversa electrónica.

**Síntesis de derivados Arilidénicos de 1-fenil-3-metil-2-pirazolina-5-ona (Edaravona) inducida por radiación de microondas. *Synthesis of Arylidene derivatives 1-phenyl-3-methyl-2-pyrazoline-5-one (Edaravone) induced by microwave radiation.***

Vargas Didier<sup>1</sup>, Trilleras Vásquez Jorge<sup>1</sup>, Quiroga Jairo<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Grupo de Investigación en Compuestos Heterocíclicos, Programa de Química, Universidad del Atlántico, A.A.1890 Barranquilla, Colombia. E-mail: [dfvargas16@gmail.com](mailto:dfvargas16@gmail.com)

<sup>2</sup>Grupo de Investigación de Compuestos Heterocíclicos, Departamento de Química, Universidad del Valle, A. A. 25360 Cali, Colombia.

## RESUMEN.

**Introducción.** En los últimos años, las 5-pirazolonas han sido una de las clases de compuestos heterocíclicos estudiadas extensivamente, debido a su marcada actividad biológica y farmacológica que han presentado algunos de sus derivados. La edaravona, 1-fenil-3-metil-2-pirazolina-5-ona, se ha utilizado para el tratamiento de enfermedades del cerebro (isquemia miocárdica y cerebral), y junto a otros análogos constituyen los conocidos NSAIDs; fármacos ampliamente utilizados como analgésicos, antipiréticos y antiinflamatorios.

**Objetivo general.** Sintetizar de una serie de derivados 4-ariliden-1-fenil-3-metil-5-pirazolonas vía reacción de Knoevenagel, inducida por MW, entre edaravona y aldehídos aromáticos.

**Metodología.** Cantidades equimolares de los reactantes (1.0 mmol) se mezclaron y homogenizaron con 2-4 gotas de

DMF (condición A) o con 2-4 gotas de ácido acético glacial (AcOH) como catalizador (condición B). La mezcla de reacción se irradió por MW en un horno doméstico ajustado al 60% de su potencia, el crudo de reacción se disolvió en etanol caliente y el sólido precipitado se filtró y seco, obteniendo los respectivos 4-ariliden-1-fenil-3-metil-5-pirazolonas. Los compuestos obtenidos fueron completamente caracterizados por técnicas espectroscópicas (RMN <sup>1</sup>H/<sup>13</sup>C, IR, MS).

**Resultados.** La condensación de 1-fenil-3-metil-2-pirazolina-5-ona y aldehídos aromáticos mediante la utilización de la radiación de microondas dio lugar a la formación de los respectivos aductos de Knoevenagel. Estos 4-ariliden-1-fenil-3-metil-5-pirazolonas se destacaron por presentar una coloración característica, que va del naranja al rojo intenso y sus rendimientos varían de 32 a 85%

(condición A) y de 40 a 89% (condición B).

**Conclusión.** Se sintetizó una serie de doce derivados arilidénicos mediante el uso de la radiación de microondas. Con las condiciones empleadas se logró obtener estos compuestos con moderados rendimientos y cortos tiempos de

reacción aceptables comparados con metodologías ya reportadas, destacando la condición B como un protocolo adecuado para la obtención de estos compuestos.

**Palabras clave.** 5-pirazolonas, Edaravona, condensación de Knoevenagel, derivados arilidénicos, 4-arilidén-5-pirazolonas.

# Estudio sintético y computacional de nuevos derivados de 2-aminopiridin-3-carbonitrilo que poseen el fragmento [1,3] Benzodioxol. Synthetic and computational study of derivatives of 2-aminopyridine-3-carbonitrile possess fragment [1,3] Benzodioxol.

Pérez Gamboa Alfredo<sup>1</sup>, Fernández Vega Lauren<sup>1</sup>, Blanco Acuña Edgar<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Grupo de Investigación en Síntesis de Heterocíclicos de la Universidad de Atlántico. [lvfernandez@mail.uniatlantico.edu.co](mailto:lvfernandez@mail.uniatlantico.edu.co):

## RESUMEN

**Introducción:** Los derivados de 2-amino-3-cianopiridina se sabe que tienen múltiples actividades biológicas, tales como propiedades anti-microbianas, cardiotónicas, anti-inflamatorias, anti-parkinsonismo y antitumorales. Los procedimientos más comunes necesitan varios pasos, disolventes tóxicos como benceno o tolueno, la asistencia de microondas, lo que resulta en rendimientos insatisfactoriamente bajos.

Además, son intermedios importantes y útiles en la preparación de diversos compuestos heterocíclicos. Debido a las propiedades interesantes de estas piridinas, el desarrollo de métodos sintéticos que permiten un acceso fácil a estos heterociclos es deseable.

La teoría del funcional de densidad (DFT) las moléculas se describen por muchas características moleculares en las que no son usadas funciones de onda sino la densidad electrónica como lo describe su nombre. Cada una de las características que se

estudien mediante esta metodología pueden ser medidas o calculadas lo cual se conoce como descriptores.

**Objetivo general:** Realizar un estudio sintético y computacional de nuevos 2-aminopiridin-3-carbonitrilo.

**Metodología:** Se sintetizarán compuestos 2-aminopiridin-3-carbonitrilo con diferentes sustituyentes a partir de piperonal, malononitrilo, diferentes cetonas y acetato de amonio en cantidades equimolares "Free Solvent", por reacción a ultrasonido. Cada uno de los compuestos se les realizará estudios computacionales de propiedades *ab initio* y DFT, empleando el funcional B3LYP y el conjunto de base 6-311++g(d,p).

**Palabras clave:** Síntesis, aminocarbonitrilos, ultrasonido, estudios computacionales.

# CIANOACETILACIÓN DE 2,4,6-TRIAMINOPIRIMIDINA COMO PASO INTERMEDIO PARA LA OBTENCIÓN DE SISTEMAS PIRIDO[2,3-*d*]PIRIMIDÍNICOS. *Cianoacetylation of 2,4,6-triaminopyrimidine as an intermediate step for obtaining systems pyrido[2,3-*d*]pyrimidines.*

Peñas Kelly,<sup>1</sup> Trilleras Vásquez Jorge,<sup>1</sup> Vargas Didier<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Grupo de Investigación en Compuestos Heterocíclicos, Programa de Química, Universidad del Atlántico, A.A. 1890 Barranquilla, Colombia. [keroangel\\_16@hotmail.com](mailto:keroangel_16@hotmail.com)

## RESUMEN

**Introducción:** La importancia de los derivados pirido[2,3-*d*]pirimidínicos, se debe al gran potencial de los mismos como farmacóforos y andamios de síntesis importantes en la generación de diversos compuestos con amplio rango de actividad biológica. Ejemplo de ello, el piritrexim conocido agente inhibidor de la dihidrofolato reductasa (DHFR), entre otros compuestos con importante actividad antitumoral e inhibitoria de la familia de receptores de las tirosina quinasas.

**Objetivo general:** Desarrollar la reacción de cianoacetilación de la 2,4,6-triaminopirimidina, como paso intermedio a la generación de derivados pirido[2,3-*d*]pirimidínicos.

**Metodología:** Para la cianoacetilación de 2,4,6-triaminopirimidina (2,4,6-TAP), se mezcló 1 mmol de ácido cianoacético junto con 2.5 mL de anhídrido acético en un balón de 50 mL llevándolo a reflujo hasta alcanzar una temperatura entre 75-80°C por 5 min. Luego se añadió 1 mmol de 2,4,6-TAP, previamente disuelta en DMF

en caliente y 3 gotas de trietilamina (TEA), se mantuvo la temperatura de la mezcla de reacción alrededor de 80°C; hasta que se observó la aparición de un precipitado de color amarillo. La síntesis de derivados pirido[2,3-*d*]pirimidínicos, está supeditada a la clase de producto *N*-o *C*-cianoacetilado de la 2,4,6-TAP que pudo haberse obtenido. Por ello, se realizará ensayos empleando cantidades equimolares del mismo, y de aldehídos aromáticos bajo condiciones de reacción adecuadas (calentamiento convencional o no convencional). Los compuestos que se obtengan serán caracterizados por técnicas espectroscópicas (RMN <sup>1</sup>H/<sup>13</sup>C, IR, MS).

**Resultados:** Como resultado parcial se tiene que la reacción de cianoacetilación de 2,4,6-TAP dio lugar a la formación de un sólido amarillo fuertemente luminiscente a la luz UV de onda corta y larga con un rendimiento del 80%.

**Conclusión:** La cianoacetilación en la 2,4,6-triaminopirimidina se logró

con rendimiento moderado y un corto tiempo de reacción.

**Palabras clave:** 2,4,6-triaminopirimidina, pirimidinas

fusionadas, pirido[2,3-*d*]pirimidinas, mezcla cianoacetilante, cianoacetilación.

# Preparación de Heterocicloalcanonas de conformación restringida en la serie del Oxazol e Isoxazol.

León Leonardo<sup>1</sup>; Alvarado Mario<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Grupo de Investigación en Compuestos Heterocíclicos, Semillero de Investigación en Química édica, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad del Atlántico, A.A. 1890 Barranquilla, Colombia. E-mail: [lleon@mail.uniatlantico.edu.co](mailto:lleon@mail.uniatlantico.edu.co)

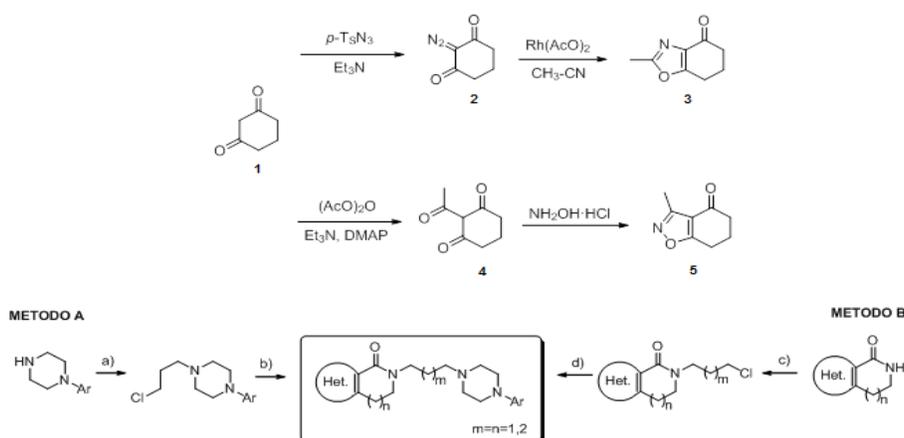
## RESUMEN

**Introducción:** La Esquizofrenia es una enfermedad mental caracterizada por un deterioro cognoscitivo-afectivo-conativo que afecta alrededor de 1% de la población mundial sin diferenciar rasgos étnicos económicos y culturales [1]. Esta enfermedad no tiene un tratamiento con estructuras químicas de proveniencia natural por lo que las estructuras sintéticas son una alternativa para apaciguar los efectos de este trastorno [2].

**Objetivo general:** Preparar heterociclo alcanonas de conformación restringida en la serie del oxazol e isoxazol con potencial

actividad antipsicótica, a partir de la 1,3-ciclohexanodiona **1**.

**Metodología:** En el presente trabajo se ha explorado la preparación de sistemas que contengan un heterociclo de 5 miembros con un átomo de oxígeno y/o nitrógeno fusionados a la 1,3-ciclohexanodiona **1**. Seguidamente se llevará a cabo la expansión del anillo vía conversión de la cetona a amida y finalmente sustitución, generando así las correspondientes arilpiperazinilalquil heterolactamas finales (Esquema).



**Esquema. Síntesis de heterolactamas finales.** Reactivos y condiciones: (a) 1-bromo-3-cloropropano, NaOH, acetona; (b) NaH, tolueno, reflujo; (c) 1-bromo-4-clorobutano o 1-bromo-5-cloropentano, NaH, tolueno, reflujo y (d) arilpiperazina, K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, IK, metilisobutilcetona, reflujo.

**Conclusión:** Los resultados obtenidos parcialmente muestran que las estructuras sintetizadas corresponden a los sistemas cíclicos oxazol 3 e isoxazol 5, lo que nos permite seguir avanzando en la síntesis de la amida cíclica, precursora de las heterolactamas finales con potencial afinidad por el receptor de dopamina D3.

**Palabras clave:** Esquizofrenia, Dopamina, Heterocicloalcanonas, Oxazol, Isoxazol.

### **Bibliografía:**

[1] a) Crow, T.J. Br. Med. J. **1980**, 280, 66. b) Gold, J.M. Schizophr. Res. **2004**, 72, 21. c) Marino, M. J.; Knutsen, L.J.S.; Williams, M. J. Med. Chem. **2008**, 51, 1077.

[2] Alvarado M., Insua I.; Masaguer C. F.; Iglesias J.; Brea J.; Loza M.I.; Carro L. Bioorg. Med. Chem. **2013**, 23, 5586.

**Reacción catalizada con ácido ftálico en la metodología tándem de Adnu/e/imino Diels-Alder: síntesis de hexahidropirano(furo) tetrahydroquinolinas sustituidas. *Acid catalyzed reaction phthalic methodology in tandem of Adnu/e/imino Diels-Alder: synthesis of hexahidropiran-(furo)tetrahydroquinolines substituted.***

Mórelo Alejandro David<sup>1</sup>, Meléndez Carlos Mario<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Grupo de Investigación en Compuestos Heterocíclicos, Programa de Química, Facultad de Ciencias Básica, Universidad del Atlántico, Barranquilla, Colombia. E-mail: [amorelo@yahoo.es](mailto:amorelo@yahoo.es)

## RESUMEN

**Introducción:** Una nueva serie de compuestos furano y piranotetrahydroquinolinas sustituidas han sido sintetizados por medio de la reacción tándem de AdNu/E/imino Diels-Alder, utilizando nuevas condiciones de reacción poco contaminantes para el medio ambiente como es el uso de ácido ftálico como catalizador y etanol como solvente.

**Objetivo General:** Estudiar la aplicación de la metodología tandem AdNu/E/iDA en la síntesis de una serie de derivados de la 2,3-hexahidrofurano[3,2-c]quinolina y 3,4-hexahidro-2H-pirano[3,2-c]quinolina sustituidas partiendo de diversas aril aminas y alquenos ricos en electrones como: 2,3-dihidrofurano y 3,4-dihidro-2H-pirano, utilizando condiciones “verdes” de reacción como son el uso de catalizadores tipo ácidos de Brønsted y solventes polares próticos.

**Metodología:** La síntesis de los compuestos furano y piranotetrahydroquinolinas sustituidas se llevo a cabo por medio de la

reacción tándem de AdNu/E/imino Diels-Alder.

**Resultados:** La síntesis de estos compuestos activos se fueron caracterizados por técnicas espectroscópicas como: RMN-<sup>1</sup>H, RMN-<sup>13</sup>H, CON DEPT-135, COSY, HMQC y HMBC.

**Conclusión:** La reacción tándem de AdNu/E/iDA es uno de los métodos más eficientes y versátiles en la construcción y diversificación estructural de compuestos quinolinicos y tetrahydroquinolínicos, como es la síntesis de la serie 3,4-hexahidro-2H-pirano[3,2-c]quinolinas (118a-d) a partir de N-arilaminas y eteres cíclicos enolizables, utilizando nuevas condiciones de reacción. La síntesis de estos compuestos se llevo a cabo utilizando metodos convencionales.

**Palabras clave:** Reacción Imino Diels-Alder (iDA), ácidos de Brønsted, Tándem, DOS (Diversity Oriented Synthesis) y TOS (Target Oriented Synthesis).

# **5. ÁREA DE BIOQUÍMICA**

# Evaluación de la actividad de captación del ABTS<sup>•+</sup> por extractos de diferente polaridad del escarabajo *Ulomoides dermestoides* cultivado *In vitro*. *ABTS<sup>•+</sup> scavenging activities of extracts of different polarity from Ulomoides dermestoides beetles cultivated In vitro.*

España Puccini Pierine<sup>1</sup>, Mendoza Meza Dary Luz<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Estudiante de Trabajo de Grado. Semillero de Investigación en Productos Naturales y Bioquímica Aplicada. Programa de Química. Universidad del Atlántico.

<sup>2</sup> Docente. Grupo de Investigación en Productos Naturales y Bioquímica de Macromoléculas. Programa de Química. Universidad del Atlántico.

## RESUMEN

**Introducción:** Muchas especies de escarabajos han sido reportadas como fuente de macronutrientes y micronutrientes. El *Ulomoides dermestoides* es un coleóptero usado en medicina tradicional para el tratamiento de enfermedades crónicas desencadenadas por radicales libres.

**Objetivo general:** Establecer las propiedades antioxidantes de extractos totales y fracciones fenólicas de extractos de *Ulomoides dermestoides* obtenidos con solventes de diferente polaridad.

**Metodología:** Cada extracto se obtuvo a partir de 4g de escarabajos adultos cultivados en salvado de trigo y pan integral, los cuales fueron separados del sustrato, congelados y macerados, luego sometidos a extracción con solución salina, etanol, butanol, acetona, acetato de etilo, cloroformo y éter di-etílico. La fracción fenólica de cada extracto fue separada mediante cromatografía de columna usando Amberlita XAD-2 y la actividad antioxidante fue evaluada

por el método del radical ABTS<sup>•+</sup>. Los compuestos presentes en las fracciones con actividad antioxidante fueron visualizados por cromatografía en capa fina (CCF)

**Resultados:** Todos los extractos mostraron actividad captadora del ABTS<sup>•+</sup>, en el siguiente orden: acetona > etanol > butanol > éter etílico > cloroformo > acetato etilo; sin embargo, solo los extractos en acetona y etanol presentaron compuestos fenólicos con actividad antioxidante, observándose un IC<sub>50</sub> (concentración que neutraliza el 50% del radical) de 4,19±1,4 mg/mL y 1,07±0,8 mg/mL para las fracciones de los extractos etanólicos (FF<sub>ETANOL</sub>) y en acetona (FF<sub>ACETONA</sub>), respectivamente (Figura)

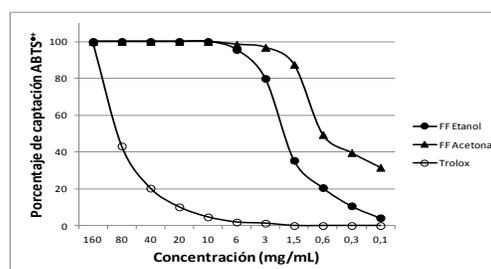


Figura. Cinética de captación del radical ABTS

**Conclusión:** Se concluye que las fracciones fenólicas de extractos en etanol y acetona de *Ulomoides dermestoides* adultos poseen

compuestos antioxidantes de potencial uso nutracéutico.

**Palabras clave:** *Ulomoides dermestoides*, antioxidantes, ABTS. .

## **Producción de anticuerpos policlonales en ratas Wistar con un oligopéptido antigénico de cistatinas de nematodos. *Production of polyclonal antibodies in Wistar rats with an antigenic oligopeptide of nematode cystatins.***

Osses Garay Marcela<sup>1</sup>, Mendoza Meza Dary Luz<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup> Grupo de Investigación en Productos Naturales y Bioquímica de Macromoléculas. Programa de Química. Universidad del Atlántico, Barranquilla. E-mail: [marcelaog89@gmail.com](mailto:marcelaog89@gmail.com)

### **RESUMEN**

**Introducción:** Las cistatinas son proteínas que comúnmente se conocen como inhibidores de cisteína proteasas; pueden encontrarse en vertebrados, plantas e invertebrados. Se ha investigado que las de los nematodos pueden estimular la síntesis del óxido nítrico, modificar la presentación de antígenos, la respuesta de los linfocitos T y la producción de citocinas del perfil TH2. Debido a las razones anteriores, se han propuesto para el tratamiento de enfermedades con procesos inflamatorios agudos y alergias.

**Objetivo general:** Producir anticuerpos policlonales en ratas Wistar con un oligopéptido sintético de cistatinas de nematodos

**Metodología:** Se realizó en T-Coffee un alineamiento múltiple de cistatinas de nematodos (14 especies), a partir del cual se diseñaron péptidos cuya antigenicidad se evaluó con Antibody Epitope Prediction y OptimumAntigen<sup>TM</sup>; uno de ellos se sintetizó por el método Fmoc (fase sólida), purificado por cromatografía FPLC, RP-HPLC y espectrometría de masas; fue conjugado a la proteína KLH. El péptido se inmunizó en seis ratas Wistar hembras de 19 a 20 semanas de edad por 45 días

utilizando adyuvantes de Freund (completo e incompleto) con inyecciones en el día 0, 15 y 30 para obtener una buena producción de anticuerpos policlonales.

**Resultados:** Se diseñaron tres péptidos antigénicos con longitud de 14-mer y valores de antigenicidad entre 1.12 y 1.54 según los análisis en Antibody Epitope Prediction y OptimumAntigen<sup>TM</sup>, respectivamente. El péptido sintetizado tuvo una pureza del 88,24%,  $t_R = 10.62$  min y masa molecular de 1534.84 Da. Se obtuvieron entre 3 y 5 mL de suero sanguíneo por cada animal, cuyos perfiles electroforéticos en SDS-PAGE evidenciaron la presencia de anticuerpos.

**Conclusión:** Mediante herramientas bioinformáticas se han identificado péptidos antigénicos de cistatinas de nematodos, de los cuales se sintetizó uno de 14-mer conjugado a KLH cuya inmunización en ratas Wistar hembras fue tolerada por éstas, obteniéndose volúmenes de suero sanguíneo suficientes para posteriores pruebas inmunoquímicas.

**Palabras clave:** Cistatinas, nematodos, oligopéptido, anticuerpos policlonales.

# **6. ÁREA DE BIOTECNOLOGÍA**

# Lipasas de *Pachira aquatica* y *Carica papaya* como biocatalizadores potenciales en la reacción de transesterificación. *Pachira aquatica Carica papaya as potentials biocatalysts in the transesterification reaction.*

Ortega Afanador Vivianna<sup>1</sup>, Mendoza Meza Dary Luz, Fontalvo Gómez Miriam

1. Estudiante de Trabajo de Grado. Programa de Química. Grupo de Investigación en Productos Naturales y Bioquímica de Macromoléculas. Programa de Química. Universidad del Atlántico. E-mail: [viviortegaf@gmail.com](mailto:viviortegaf@gmail.com)

2, 3 Docentes del Programa de Química. Grupo de Investigación en Productos Naturales y Bioquímica de Macromoléculas. Programa de Química. Universidad del Atlántico.

## RESUMEN

**Introducción:** Las lipasas EC. 3.1.1.3. son enzimas que catalizan un amplio rango de reacciones con aplicación en la industria, incluyendo la catálisis de la reacción de transesterificación de los triacilglicéridos para la producción de biocombustibles.

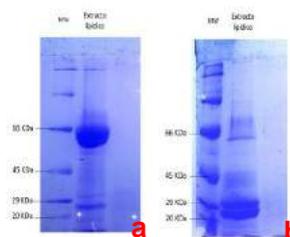
**Objetivo general:** Obtener lipasas a partir de fuentes vegetales originarias del departamento del Atlántico aplicables al proceso de producción de ésteres de alquilo de ácidos grasos.

**Metodología:** Se prepararon extractos proteicos a partir de semillas de *Pachira aquatica* y del látex de *Carica papaya*, colectadas en el campus de la Universidad del Atlántico.

La presencia de proteínas se comprobó mediante análisis electroforético por SDS-PAGE. El perfil enzimático de cada extracto se evaluó con el estuche comercial APY-ZYM (BioMérieux, Francia) y la actividad lipasa se determinó

espectrofotométricamente, usando el sustrato 2-O-dilauril-rac-glicero-3-ácido-glutárico-(6-metil-resorufina)-éster; como control de éste ensayo se utilizó lipasa pancreática porcina y lipasa fúngica de *C. antartica*.

**Resultados:** El extracto de semillas de *P. aquatica* y el látex de *C. papaya*, mostraron actividad estereasas y proteasa. El SDS-PAGE separó fracciones peptídicas entre 96-20 KDa para la *P. aquatica*. La actividad lipasa fue comprobada espectrofotométricamente, observando mayor actividad con el látex de *C. papaya*.



**Figura.** Caracterización de la Lipasa de *P. aquatica* por SDS-PAGE. a) Sin 2-Mercaptoetanol; b) con 2-mercaptoetanol.

**Conclusión:** El método aquí presentado permitió la separación de lipasas desde fuentes vegetales (*P.*

*aquatica* y *C. papaya*), éstas enzimas serán utilizadas para el desarrollo de un método de síntesis de ésteres de alquilo de ácidos grasos.

**Palabras clave:** *Pachira aquatica*, *Carica papaya*, actividad lipasa, transesterificación, biodiesel.

**Degradación de hidrocarburos aromáticos presentes en las aguas residuales de un proceso de deshidratación de gas natural por medio de la microalga *Chlorella sp.* Viva en suspensión e inmovilizada. *Degradation of hydrocarbons aromatic present in the water waste of a process of dehydration of gas natural by means of the microalga Chlorella sp. Live in suspension and immobilized.***

Angulo Edgardo<sup>1</sup>, Monsalve Liveida<sup>2</sup>, Valdés Nataly<sup>2</sup>

<sup>1</sup>. Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Universidad del Atlántico. Colombia. E-Mail: [edgangulo20@gmail.com](mailto:edgangulo20@gmail.com)

<sup>2</sup>. Facultad de Ingeniería, Programa de Ingeniería Química. Universidad del Atlántico. Colombia.

## RESUMEN

**Introducción.** Se sabe que las microalgas son capaces de degradar aromáticos y sus derivados, que por su alta toxicidad están catalogados como peligrosos, ya que ocasionan problemas a la salud humana.

**Metodología.** En este trabajo se utilizó la microalga *Chlorella sp.* viva e inmovilizada para tratar un agua residual condensada (ácida y básica pH 5.8-8.3) proveniente de una planta de deshidratación de gas natural "Estación Ballena de Promigas S.A." Guajira, Colombia. Mediante cromatografía de gases de alta resolución acoplado a masa se caracterizaron las muestras antes y después de la degradación. Inicialmente en el condensado ácido se identificaron 133 compuestos que corresponden a hidrocarburos aromáticos totales, C<sub>6</sub>-C<sub>22</sub> y 150 alquilfenoles a una concentración de 74.7 y 24.5 mg/L respectivamente. Sin embargo, en el condensado básico los estudios revelaron más de 140 compuestos aromáticos totales y 158 alquilfenoles a una

concentración de 75.2 y 23.0 mg/L respectivamente.

La microalga se cultivó en biorreactores de 20.0 L de capacidad conteniendo 16.0 L de medio algal (4mM de N), a pH 7.0. La mayor concentración celular del cultivo fue de 8.5x10<sup>6</sup> cel/mL y se logró a los 38 días. Los ensayos de remoción de estas sustancias, demostraron variación de pH, lo cual confirma la degradación.

**Resultados y Conclusión.** En los estudios del agua básica con 2.5 g biomasa peso seco/L, se alcanzó una reducción de hidrocarburos aromáticos totales y alquilfenoles de 2.2 y 2.3 mg/L respectivamente. Mientras que con 2.0 g. peso seco/L, la reducción alcanzó 3.5 y 4.5 mg/L respectivamente. Finalmente, cuando se usó 2.5 g en peso seco/L de la microalga inmovilizada, los resultados revelaron también la disminución de la concentración final hasta valores de 9.4 y 5.4 mg/L respectivamente. En cambio cuando

se utilizaron 2.0 g de biomasa peso seco/l inmovilizada, se obtuvieron 5.4 y 10 mg/l respectivamente.

**Palabras clave:** Degradación de Aromáticos, Agua Residual, *Chlorella sp.*

# Remoción de naranja de metilo por la microalga *Chlorella sp.* Muerta y pretratada en suspensión e inmovilizada. *Removal of orange methyl by the microalga Chlorella sp., dead and pretreated suspended and immobilized.*

Angulo Edgardo<sup>1</sup>, Rambal Alberto <sup>1</sup>

<sup>1</sup>. Facultad de Ciencias Básicas, Programa de Química, Universidad del Atlántico. Colombia. E-mail: [edgangulo20@gmail.com](mailto:edgangulo20@gmail.com)

## RESUMEN

**Introducción.** Las Industrias textiles producen grandes cantidades de aguas residuales que contienen colorantes sintéticos de diversos tipos, que a menudo son carcinogénicos, mutagénicos, teratogénicos y tóxicos que pueden afectar el medio ambiente acuático en muchos otros aspectos negativos. Algunos métodos empleados, tales como, físicos o químicos (adsorción, ozonización, oxidación, floculación, etc.), son costosos. También es posible utilizar métodos biológicos para la eliminación de colorantes de los cuerpos de aguas. Estos generalmente son menos costosos y muy eficaces en la degradación de los contaminantes persistentes, incluyendo los colorantes. Es así, como en los últimos años, las microalgas han sido estudiadas para estos propósitos debido a su capacidad para descomponer una variedad de compuestos orgánicos, incluyendo los colorantes sintéticos.

**Metodología.** Se usó la microalga *Chlorella sp.* para la remoción de

naranja de metilo (NM). Inicialmente se cultivó el alga en un fertilizante comercial "Nutrifoliar" a 4 mM de N en un volumen de 2.5 L durante 20 días. Seguidamente esta biomasa se secó y se emplearon cuatro sistemas: no viva en suspensión, pretratada químicamente con NaOH, y CaCl<sub>2</sub> e inmovilizada en discos de poliuretano.

**Resultados y conclusiones.** Los estudios demuestran que la máxima capacidad de adsorción se presentó en el alga no viva. Luego la alga inmovilizada en poliuretano y finalmente la pretratada con CaCl<sub>2</sub> y NaOH con valores de 50.0, 38.2, 36.7 y 32.7 mg de NM/ g de adsorbente. EL modelo que mejor se ajustó fue el de Lagmuir con 99.8%

**Palabras clave:** Remoción, Naranja de Metilo, Isotermas, *Chlorella sp.*

# **7. QUÍMICA DE PRODUCTOS NATURALES Y DE ALIMENTOS**

## **Determinación de la actividad anti-irritante del extracto etanolico de raíz de *Cnidoscolus urens* L. Determination of the anti-irritating activity of root ethanol extract of *Cnidoscolus urens* L.**

Vásquez Rodríguez Andrés<sup>1</sup>, Martínez Maury Eduardo<sup>2</sup>, Mendoza Meza Dary Luz<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Estudiante del Programa de Química y Farmacia, Universidad del Atlántico, Km 7 antigua vía a Puerto Colombia. E-mail: [Juniorvas20@hotmail.com](mailto:Juniorvas20@hotmail.com)

<sup>2</sup> Docentes del Programa de Química, Grupo de Investigación en Productos Naturales y Bioquímica de Macromoléculas. Universidad del Atlántico, Km 7 antigua vía a Puerto Colombia.

### **RESUMEN**

**Introducción:** Los extractos de *C. urens* L. fueron obtenidos mediante maceración en frío de las raíces de la planta. El efecto anti-irritante se evaluó mediante ensayo de irritación de la membrana corioalantoidea de huevos embrionados de gallina (HET-CAM). La identificación de los metabolitos secundarios responsables de la actividad se obtendrá mediante la separación cromatográfica de las fracciones seleccionadas. La elucidación de las estructuras se realizará mediante cromatografía de gases.

**Objetivo general:** Determinar la capacidad anti-irritante de los extractos totales etanólicos de raíces de *C.urens* L.

**Metodología:** Se recolectaron raíces, las cuales se sometieron a maceración. Luego se filtro y se evaporó el solvente hasta obtener el extracto total. Se tomo una cantidad del extracto y se sometió a técnicas de cromatografía en capa fina. Como prueba preliminar para el ensayo HET-CAM se usaron 4 huevos de gallina fertilizados. Una solución acuosa de dodecil sulfato de sodio

(SDS 0,5% w/v) se utilizó como agente irritante. El control negativo fue NaCl al 0,9% w/v; el control positivo fue Nimesulida (1mg/mL). Las cáscaras de huevo se redujeron con una sierra circular de 3.000rpm. La CAM expuesta se humidificó con 300µl de solución isotónica de NaCl y se colocó en una incubadora durante dos horas, después de lo cual 200 µL de SDS al 0,5% se colocó en la CAM. Los huevos fueron expuestos como se ha descrito anteriormente y pre-tratados con 300µl de muestras de prueba o soluciones de control. Para evitar la contaminación de la superficie de la CAM, las aberturas de cáscara de huevo se cubrieron con lámina de parafina. Los huevos se colocaron en la incubadora durante dos horas para facilitar la absorción por las membranas, y a continuación, la CAM se trató con 200µl de SDS al 0,5 %.

**Resultados:** Se obtuvo un extracto total etanolico. En las pruebas de cromatografía en capa fina, se pudo identificar algunos compuestos. Para el ensayo preliminar de HET-CAM se determino que el extracto etanólico posee actividad anti-hemorrágica y

anti-coagulante, sin embargo no posee actividad anti-vasodilatadora a una concentración de 10mg/mL de solución salina.

**Conclusión:** El extracto etanólico de raíz de *C. urens* posee actividad anti-

irritante, anti-hemorrágica y anti-coagulante pero no posee actividad anti-vasodilatadora.

**Palabras clave:** Pringamoza, extracto, Het-CAM, Irritación, cromatografía

# Evaluación de la capacidad antioxidante del extracto de la cáscara de *Citrus sinensis* frente a oxígeno singulete. Evaluation of the antioxidant capacity of the extract of *Citrus sinensis* peel against singlet oxygen.

García Mónica<sup>1</sup>, Aragón Jessica<sup>1</sup>, Díaz Carlos<sup>1</sup>, Vallejo William<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Grupo de Investigación en Fotoquímica y Fotobiología, Facultad de Ciencias Básicas, Universidad del Atlántico, kilómetro 7 vía Puerto Colombia, PBX: 3197010, E-mail: jekaragon@gmail.com

## RESUMEN

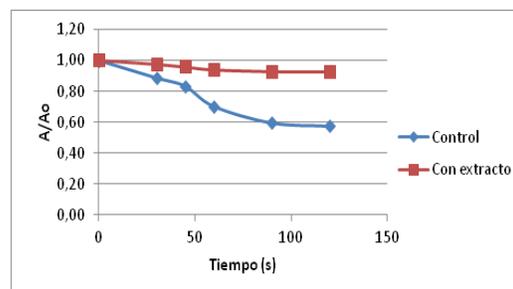
**Introducción:** El estrés oxidativo ocurre cuando la generación de especies reactivas del oxígeno (EROs) es incrementada en el organismo y los mecanismos protectores no son eficientes para inhibirlos, éste provoca un desequilibrio entre la producción de oxidantes y los sistemas antioxidantes, dando origen a diversas fisiopatologías y enfermedades. El desbalance entre la generación de EROs y los sistemas de defensas antioxidantes conlleva a modificaciones químicas de macromoléculas de relevancia biológica (ADN, proteínas, lípidos y carbohidratos). Entre las especies reactivas del oxígeno de mayor importancia se encuentran: el oxígeno singulete ( $^1O_2$ ), el radical anión superóxido ( $O_2^{\bullet-}$ ) y el radical hidroxilo ( $HO^{\bullet}$ ). Los flavonoides son compuestos de origen natural que presentan gran diversidad en sus actividades biológica, entre las que se destaca su acción antioxidante. En este trabajo se estudió la actividad antioxidante de del extracto de la cáscara de *Citrus sinensis* contra oxígeno singulete.

**Objetivo general:** Determinar la actividad antioxidante del extracto de

la cáscara de la naranja (*Citrus Sinensis*) frente al oxígeno singulete.

**Metodología:** Se tomaron 250 g de la piel de la naranja y se cortaron en pedazos pequeños, luego se le añadió como solvente 500 mL de agua a 70°C y se realizó la extracción por destilación asistida por microondas. Este proceso se llevó a cabo durante 3 h. Para la detección la actividad antioxidante se utilizó el método indirecto del Rubreno; La oxidación del rubreno se llevó a cabo en una microemulsión W/O y el seguimiento de la reacción se realizó por espectrofotometría a 522 nm.

**Resultados:** En la gráfica se muestra el cambio de la absorbancia del rubreno en presencia y ausencia del extracto obtenido.



**Grafica.** Seguimiento de la oxidación de Rubreno

**Conclusión:** Fue posible evidenciar que el extracto de la cáscara de *Citrus sinensis* presenta actividad antioxidante frente a el oxígeno singulete.

**Palabras clave:** *Citrus sinensis*;  
Actividad antioxidante; Oxígeno  
singulete; Rubreno

# Evaluación de la presencia de contaminantes metálicos Cd, Pb, Hg y As en la harina de las semillas de *Canavalia rosea* (frijol de playa) en el departamento del Atlántico por el método de Espectrofotometría de Absorción Atómica

Salazar Duvernís<sup>1</sup>, De la Rosa Catalino<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Grupo de Investigación de fitoquímica, Programa de Química, Universidad del Atlántico, A.A.1890 Barranquilla, Colombia. E-mail; [duvernís91@gmail.com](mailto:duvernís91@gmail.com)

## RESUMEN

**Introducción:** El género *Canavalia* es una planta que existe en gran diversidad tiene aproximadamente 60 especies pantropicales, con concentración neotropical, ya que alrededor de 37 especies se distribuyen en el área neotropical, y alrededor de 15 especies en el área paleotropical, la cual constituye un elemento común en playas y vegetación litoral. Sin embargo, hay al menos 4 especies que se han cultivado como forraje y alimento.

**Objetivo general:** Determinar y comparar el contenido de plomo, mercurio, cadmio y arsénico en la harina de las semillas *Canavalia rosea* en el departamento del atlántico por el método de espectrofotometría de absorción atómica.

**Metodología:** Se recolectaron las semillas en las diferentes playas del departamento del atlántico (salgar, santa verónica), después de seleccionar y realizar la determinación taxonómica se procedió a secar el material vegetal para así obtener las cenizas y poder realizar la determinación de los distintos metales **Cd, Pb, Hg y As**.

**Resultados parciales:** Se recogió muestras en las playas de salgar y santa verónica las cuales se enviaron al herbario de la Universidad Magdalena para su determinación taxonómica la cual nos prestó sus servicios corroborando que las semillas con las cuales se están trabajando pertenecen a la planta *Canavalia rosea*, se procedió a realizar la selección de las semillas para así secarlas. Proceso que tuvo una duración de 25 días, se derivó a descascarar las semillas para la molienda del material vegetal obteniendo una harina fina de color blanco-grisáceo la cual se utilizó para la obtención de las cenizas mediante la utilización de una mufla. Con las cenizas obtenidas de las semillas recolectadas en santa verónica y salgar se determinó los metales plomo, mercurio, cadmio y arsénico por el método de espectrofotometría de absorción atómica.

**Conclusión:** Se logró determinar el contenido Cd, Pb, Hg y As en la harina de las semillas *Canavalia rosea* por el método de espectrofotometría de absorción atómica en las playas salgar y santa verónica del departamento del atlántico encontrándose la ausencia

de estos metales en la harina de dicha semilla.

**Palabras clave:** metales pesados, *Canavalia rosea*, espectrofotometría de absorción atómica.

**Estudio de la estabilidad física y química de la Vitamina C contenida en zumos de naranja (*Citrus sinensis*) y tomate chonto (*Lycopersicum esculentum*) de origen natural. *Study of physical and chemical stability of Vitamin C contained in orange juice (Citrus sinensis) and tomato chonto (Lycopersicum esculentum) of natural origin.***

Cortés Triana José M<sup>1</sup> ; Henao Salgado Shaila N<sup>2</sup>

<sup>1</sup>. Programa de Farmacia. Universidad del Atlántico. Km 7 via a Puerto Colombia (Atlántico).  
E-mail: [jmariaacortes@mail.uniatlantico.edu.co](mailto:jmariaacortes@mail.uniatlantico.edu.co)

## RESUMEN

**Introducción:** Las vitaminas constituyen un grupo nutricional, que pese a encontrarse en menor proporción en comparación a los macronutrientes, hacen parte fundamental en nuestra dieta, pues son indispensables en los procesos metabólicos, sin ellas el organismo no es capaz de aprovechar elementos constructivos y energéticos. La vitamina C es quizá una de las más conocidas, además de tener actividad antioxidante posee propiedades profilácticas y terapéuticas en condiciones patológicas como enfermedades infecciosas, deficiencias inmunológicas, aterosclerosis, enfermedades malignas, etc.

**Objetivo General:** Estudiar la estabilidad física y química de la vitamina c contenida en zumos de naranja (*Citrus sinensis*) y tomate chonto (*Lycopersicum esculentum*) de origen natural.

**Metodología:** Las muestras fueron almacenadas durante tres días a distintas condiciones de temperatura

y luz, empleándose tres tipos de condiciones: almacenamiento extremo a una temperatura de 54°C, almacenamiento optimo a una temperatura de 4°C, y almacenamiento a temperatura ambiente, en este último algunos zumos fueron expuestos a la luz solar directa y otros fueron protegido de la misma. Durante el periodo de almacenamiento se realizó la cuantificación de la vitamina a través de cromatografía líquida de alta resolución (HPLC), se realizó la determinación del porcentaje de humedad, determinación de solidos totales, ceniza, pH y el análisis de sus propiedades organolépticas.

**Resultados:** El tiempo máximo de conservación de la vitamina C para una temperatura de 32°C correspondiente al zumo de naranja fue de 1,02 días y 1,16 días para el zumo de tomate chonto, de acuerdo al modelo matemático de Arrhenius.

**Conclusión:** que el zumo de naranja fue más estable; se determinó que la temperatura a la cual se presenta una

menor degradación de la vitamina C es a 4°C, y además se demostró que la degradación vitamínica mantiene una cinética de orden uno.

**Palabras clave:** Tomate, Naranja, Vitamina C, HPLC, Propiedades Organolépticas.

**Caracterización química y evaluación de la actividad anti-colinesterasa del aceite esencial de *Gliricidia sepium* (matarratón). *Chemical characterization and evaluation of the anticholinesterase activity of essential oil from *Gliricidia sepium* (matarratón).***

Teherán Palencia Jeremías<sup>1</sup>, Mendoza Meza Dary Luz<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Estudiante del programa de Química de la Universidad del Atlántico. E-mail: [jteheranp@gmail.com](mailto:jteheranp@gmail.com)

<sup>2</sup>Docente investigador del grupo de Productos Naturales y bioquímica de macromoléculas de Universidad del Atlántico.

## RESUMEN

**Introducción:** Los insectos o plagas han sido los causantes de grandes pérdidas de cultivos de todo el mundo y los insecticidas sintéticos utilizados para contrarrestarlos son grandes contaminantes del medio ambiente. Por lo anterior se pretende encontrar métodos alternativos para combatir plagas que sean más seguros ecológicamente, utilizando insecticidas naturales que son producidos por las propias plantas y que no sean tóxicos para esta y el hombre.

**Objetivo:** Caracterizar y evaluar la actividad anti-colinesterasa del aceite esencial de las flores, hojas y corteza de *Gliricidia sepium* (Matarrantón).

**Materiales y Métodos:** El material vegetal (Figura) será colectado en el departamento del Atlántico. El aceite esencial se extraerá mediante Hidrodestilación asistida por Microondas. Para determinar la actividad anti-colinesterasa se utilizará el ensayo descrito por

Ellman, además se explicará el posible mecanismo de acción de esta inhibición. Estos aceites se obtendrán por hidrodestilación, y la caracterización de estos se realizara por Cromatografía de gases acoplado a Espectrometría de Masas (GC-MS).

**Resultado esperados:** Se espera contribuir a la generación de nuevo conocimiento aplicable al control de plagas insectos, aportar bases al diseño de metodologías verdes, de acción nacional y mundial, orientadas a prevenir y disminuir la contaminación del medio ambiente causada por los plaguicidas sintéticos. También se espera contribuir al desarrollo de insecticidas naturales que son fácilmente biodegradables, seguros y limpios desde el punto de vista ambiental y de la salud humana, como una eficiente opción agroquímica.

**Palabras clave:** *Gliricidia sepium*, aceites esenciales, bioinsecticida, actividad anti-colinesterasa.

**Actividad antioxidante de extractos etanólicos de Yacón (*Smallanthus sonchifolius* Poepp. & Endl) H. Robinsón, cultivado en Boyacá, Colombia. Antioxidant activity of etanolic extracts of Yacón (*Smallanthus sonchifolius* Poep. & Endl) H. Robinson, cultivated in Boyacá, Colombia.**

Parra Florez Loreinys<sup>1</sup>, Mendoza Meza Dary Luz<sup>1</sup>

<sup>1</sup>.Grupo de Investigación en Productos Naturales y Bioquímica de Macromoléculas. Programa de Química. Universidad del Atlántico. Km 7 antigua vía a Puerto Colombia (Atlántico). E-mail: [lparraflorez@gmail.com](mailto:lparraflorez@gmail.com)

## RESUMEN

**Introducción.** El *Smallanthus sonchifolius* (yacon) es un cultivo andino con importantes propiedades medicinales y nutricionales, usado principalmente como anti-hiperglucemiante y para control del peso corporal. A pesar de su alto potencial biomédico, poco se conoce acerca de la composición química de las hojas de yacon cultivados en Colombia.

**Objetivo general.** Caracterizar fracciones fenólicas con capacidad antioxidante obtenidas de extractos etanólicos de hojas de yacon procedente de Duitama (Boyacá).

**Metodología.** Los compuestos fenólicos fueron separados del extracto etanólico usando fraccionamiento por cromatografía de columna con la resina Amberlita XAD-2. El contenido de fenoles totales en las fracciones se determinó mediante el método espectrofotométrico de Folin-Ciocalteu, los resultados se expresaron como mg de ácido gálico equivalentes por gramo de peso seco de extracto (mg GAE/ g ES); mientras que la actividad antioxidante se evaluó usando un método cinético de reducción de los radicales 2,2-difenil-

1 -picrilhidracilo (DPPH) y 2,2-azinobis (3-etilbenzotiazolina-6-sulfonato) (ABTS<sup>•+</sup>). Las fracciones eluidas con MeOH y MeOH:H<sub>2</sub>O (1:1, v/v) presentaron la mayor actividad antioxidante.

**Resultado.** El análisis de HPLC-EM de las fracciones demostró la presencia de ácidos fenólicos en forma de agliconas y también en su forma conjugada (glucósidos). En todas las fracciones fue indentificado el ácido cafeico [M-H]<sup>-</sup> 179 m/z; ácido quínico [M-H]<sup>-</sup> 191 m/z y ácido cafeoilquínico [M-H]<sup>-</sup> 353 m/z. Otros compuestos fueron: ácido dicafeoilquínico [M-H]<sup>-</sup> 515 m/z, dicafeoilglucárico [M-H]<sup>-</sup> 533 m/z, ácido cafeoiltartárico [M-H]<sup>-</sup> 311 m/z, ácido ferúlico [M-H]<sup>-</sup> 193 m/z y el flavonoide quercetina [M-H]<sup>-</sup> 301 m/z. Estudios previos han reportado la presencia de ácidos fenólicos como protocatehuico, clorogénico, cafeico, ferúlico, dicafeoilquínico y tricafeoiltartarico en hojas de yacon.

**Conclusión.** Las hojas de yacon cultivado en Duitama (Boyacá) poseen un alto contenido de fenoles totales (1.300 EAG/g ES), comparable a lo reportado para algunos genotipos de yacon cultivados en Perú, estos compuestos

contribuyen significativamente a la actividad captadora de radicales libres de las hojas de yacon cultivadas en Boyacá (Colombia).

**Palabras clave.** *Smallanthus sonchifolius*, capacidad antioxidante, ácidos fenólicos, flavonoides.

## LISTA DE AUTORES

### A

Alvarado Mario .....	38
<u>Angulo Edgardo</u> .....	48, 50
Aragón Jessica.....	54
Ávila Huver .....	18

### B

<u>Barrios Gustavo</u> .....	18
Bermúdez Karolyn.....	18
<u>Blanco Acuña Edgar</u> .....	31, 35
Brito Joaquín .....	26, 28

### C

<u>Cortés Triana José M</u> .....	58
-----------------------------------	----

### D

Dávila Loraine.....	18
De la Rosa Catalino .....	56
Díaz Carlos.....	15, 16, 18, 54

### E

<u>España Puccini Pierine</u> .....	42
-------------------------------------	----

### F

Fernández Vega Lauren.....	31, 35
<u>Florez Santiago Jires</u> .....	23
Fontalvo Gómez Miriam .....	21, 46

### G

<u>García Mónica</u> .....	54
González López Edwin.....	32

### H

Henao Salgado Shaila N .....	58
Hernández Ana.....	18
<u>Hernández Garcés Jorge</u> .....	21

### J

<u>Julio Javier</u> .....	26
---------------------------	----

### L

<u>León Jaramillo Jhair</u> .....	32
<u>León Leonardo</u> .....	38
Luna Daniela.....	18

### M

Martínez Maury Eduardo .....	52
Meléndez Carlos Mario .....	40
Mendoza Meza Dary Luz... 42, 44, 46, 52, 60, 61	
Mendoza Valencia Catrin.....	23
Monsalve Liveida .....	48
<u>Mórolo Alejandro David</u> .....	40
Muñoz Zúñiga Jackeline .....	23

### N

Navarro Karen.....	15, 16, 18
Nieves Vianca .....	18

### O

<u>Ortega Afanador Vivianna</u> .....	46
<u>Osses Garay Marcela</u> .....	44

### P

<u>Parra Florez Loreinys</u> .....	61
<u>Pava Beatriz</u> .....	15, 16, 18
<u>Peñas Kelly</u> .....	36
Pérez Gamboa Alfredo .....	31, 35
Puello Esneyder.....	26, 28

### Q

Quiroga Jairo .....	33
---------------------	----

### R

Rambal Alberto .....	50
Ríos Kathy .....	15, 16
<u>Ronald J. Parra</u> .....	28
Ruiz Calderin Herman .....	23

### S

<u>Salazar Duvernís</u> .....	56
-------------------------------	----

Saldarriaga Ospina Luis .....	21
Solano Wilfrido .....	18

**T**

<u>Teherán Palencia Jeremías</u> .....	60
Trilleras Vásquez Jorge.....	32, 33, 36

**V**

Valdés Nataly .....	48
Vallejo William.....	15, 16, 54
<u>Vargas Didier</u> .....	33, 36
Vargas Milena .....	18
<u>Vásquez Rodríguez Andrés</u> .....	52
Vega Dariana .....	18
Vera Kevin .....	18



Universidad  
del Atlántico