



## **LIBRO DE RESÚMENES**

**16, 17, 18 y 19 de Septiembre de 2024**

INIFTA, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, CCT La Plata-  
CONICET

La Plata, Buenos Aires, Argentina



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA



I N I F T A

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA / Doris Grumelli ... [et al.] ;  
Compilación de Comité Organizador de XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA –  
1a ed compendiada. - La Plata : Universidad Nacional de La Plata.  
Facultad de Ciencias Exactas, 2025.  
Libro digital, PDF

Archivo Digital: descarga y online

ISBN 978-950-34-2482-7

1. Física. 2. Química. I. Grumelli, Doris II. Comité Organizador de XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA,  
comp.

CDD 540



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA



I N I F T A

## **XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024**

### **COMITÉ ORGANIZADOR**

Dr. Waldemar Marmisollé

Dra. Soledad Belluzo

Dr. Matías Rafti

Dra. Jael R. Neyra Recky

Bioq. Fernanda Santandreu

Dr. Néstor Ariel Pérez Chávez

Dra. M. Laura Dántola

### **Agradecimientos**

Secretaría de Ciencia y Técnica, Facultad de Ciencias Exactas,

Universidad Nacional de La Plata

CCT-La Plata CONICET



INIFTA

**XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024**

M*	LUNES 16			M*	MARTES 17			M*	MIÉRCOLES 18			M*	JUEVES 19			
T. Oberti	08:30	T01	Alí	E. Prieto	08:30	T12	Martire	J. Tuninetti	08:30	T24	Rivera	N. Fagali	08:30	T36	Farías	
	08:45	T02	Ardila Padilla		08:45	T13	Chacon Gil		08:45	T25	Sosa		08:45	T37	Espinosa Manrique	
	09:00	T03	Diforti		09:00	T14	Robledo Candia		09:00	T26	Ventre		09:00	T38	Pagliario	
	09:15	T04	Heredia		09:15	T15	Montero		09:15	T27	Tenti		09:15	T39	Borzi	
Dell'Archiprete	09:30	T05	Bada	G. Ruiz	09:30	T16	Szewczuk	B Rivas Aiello	09:30	T28	Sanchez Dova	P. Badenes	09:30	T40	Cathcarth	
	09:45	T06	Apuzzo		09:45	T17	Calibio Giraldo		09:45	T29	Godoy Ortega		09:45	T41	Hernandez Parra	
	10:00	T07	Cajiao Checchin		10:00	T18	Monascal Rodriguez		10:00	T30	Boggan Simal		10:00	T42	Madero	
	10:15	T08	Zabala		10:15	T19	Matelo		10:15	T31	Scaramutti		10:15	T43	Girardi	
	10:30	<i>Coffee Break</i>				10:30	<i>Coffee Break</i>				10:30	<i>Coffee Break</i>				
	10:45					10:45					10:45					
M. Serrano	11:00	Acto Inauguración		A. Picco	11:00	I01	Grumelli	A. Daza Millone	11:00	I02	Tucceri	A. Albesa	11:00	I03	Ibañez	
	11:15															
	11:30															
	11:45	T09	Vergel Rangel		11:30	T20	Fernandez Molina		11:30	T32	Armijos		11:30	T44	Caballero Lawrence	
	12:00	T10	Villares		11:45	T21	Villarreal		11:45	T33	Sille		11:45	T45	García Beltrán	
	12:15	T11	Lopez		12:00	T22	Huamani		12:00	T34	Tsunoda		12:00	T46	Laviani	
			12:15	T23	Moreno Yalet	12:15	T35	Cruz González	12:15	T47	Gonik	CIERRE				
	13:30	<b>Taller 1</b> a cargo de la <b>Dirección</b>			13:30	<b>Taller 2</b> a cargo de la <b>Secretaría de Vinculación(*)</b>			13:30	<b>Taller 3</b> a cargo del <b>Espacio de Atención de la Violencia Laboral y de Género y de Bienestar(+)</b>			13:30	<b>Taller 4</b> a cargo de la <b>Secretaría de Seguridad e Higiene</b>		
	13:45				13:45				13:45							
	14:00				14:00				14:00							
	14:15				14:15				14:15							

(\*) Este taller tiene como objetivo dar a conocer la oferta disponible de servicios y técnicas experimentales del Instituto y presentar al personal técnico o profesional a cargo. (+) Este espacio está destinado a difundir diversas herramientas relacionadas con la violencia y/o discriminación laboral y de género. Asimismo, poder disponer de un lugar para consultar sus deberes y derechos, y conocer a las personas a las que deben dirigirse en situaciones en las que no se sientan a gusto en el ámbito laboral.

M\*=Moderador/a

## Programa

Lunes 16					
		Expositor/a		Título	Directores
08:30	T01	Alí	Francisco Leonel	Estudio de cinéticas de oxidación de nanopartículas de magnetita: modelos y aplicaciones	Mariano H. Fonticelli y Gabriel C. Lavorato
08:45	T02	Ardila Padilla	Carlos Alberto	Fotoquímica de decil-riboflavina en metanol bajo irradiación con luz azul	María Laura Dántola, Mariana Vignoni
09:00	T03	Diforti	Joaquin Felipe	Sensores (bio)químicos en formato portable basados en nanomateriales para el monitoreo continuo y no-invasivo de biomarcadores	Omar Azzaroni y Esteban Piccinini
09:15	T04	Heredia	Romina María Agustina	Funcionalización de superficies de magnetita con moléculas de porfirinas de Co y Ni: caracterización superficial y comportamiento electrocatalítico frente a la reacción de reducción de oxígeno	Doris Grumelli
09:30	T05	Bada	Romina Andrea	Polimerosomas derivados de un copolímero fumárico para el transporte de fármacos	Peruzzo Pablo y Molinuevo Silvana
09:45	T06	Apuzzo	Eugenia	Desarrollo de nanopartículas basadas en polielectrolitos entrecruzados iónicamente como plataformas adyuvantes y vehiculizantes de antígenos vacunales	Omar Azzaroni
10:00	T07	Cajiao Checchin	Valentina Chiara	Nanopartículas magnéticas de óxido de hierro recubiertas con ácido tánico y decoradas con nanopartículas de plata para recubrimientos antibacterianos.	Mónica Fernandez Lorenzo y Paula Caregnato
10:15	T08	Zabala	Guadalupe Valeria	Desarrollo de membranas fibrosas conteniendo nanopartículas de plata para tratamiento de contaminantes en agua	Pablo José Peruzzo, Patricia Araceli Bolla
10:30	Coffee Break + Posters				
10:45					
11:00	Acto Inauguración				
11:15					
11:30					
11:45					
12:00	T10	Villares	Matías	Determinación de la longitud de localización en redes poliméricas mediante simulaciones de dinámica molecular	Marcelo Ceolin y Marcus Müller
12:15	T11	Lopez	Leandro	Control de tamaño y dispersidad de nanopartículas metálicas con KBr mediante deposición electroforética	Francisco Ibañez

**XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024**
**Martes 17**

Martes 17					
		Expositor/a		Título	Directores
08:30	T12	Martire	Ana Paula	Integración supramolecular de polímeros conductores y nanocarbones micro y mesoporosos derivados de la pirólisis de redes metal-orgánicas para aplicaciones de almacenamiento de energía	Waldemar Marmisollé y Matías Rafti
08:45	T13	Chacon Gil	Claudia	Evaluación cinética teórica de la reacción de $\text{CH}_3\text{SeCH}_3$ con radicales OH y comparación con su análogo de azufre	Dra. María P. Badenes, Dra. Larisa L. B. Bracco
09:00	T14	Robledo Candia	Leonardo Daniel	Maduración electroquímica de Ostwald: efecto de la polidispersidad en la distribución de tamaños	Mariano Fonticelli y Aldo Rubert
09:15	T15	Montero	Marjorie	Transistores Electroquímicos Orgánicos Basados en PEDOT-PAH para la Detección Enzimática de Glucosa	Waldemar Marmisolle y Omar Azzaroni
09:30	T16	Szewczuk	Nicolás Alejandro	Estudio conformacional de peonidina, petunidina y malvidina: actividad antioxidante y antimutagénica en vacío y solventes	Pablo R. Duchowicz y Alicia B. Pomilio
09:45	T17	Calibio Giraldo	Ivon	Películas de agregados amiloides de seroalbúmina bovina sobre PVC: una estrategia antibiofilm	Patricia Schilardi; Carolina Diaz
10:00	T18	Monascal Rodriguez	Yeljair Enrique	Estudio teórico de reacciones de alcanos cíclicos relevantes en procesos de combustión, química atmosférica y astroquímica	María Paula Badenes
10:15	T19	Matelo	Ignacio Tomás	Nanocanales electroquímicamente activos: modulación redox del transporte iónico y sensado amplificado.	Waldemar Marmisollé, Omar Azzaroni.
10:30	Coffee Break + Posters				
10:45					
11:00	I01	Dra. Doris Grumelli		Estabilidad electroquímica de superficies reconstruidas de Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub> 001	
11:15					
11:30	T20	Fernandez Molina	Heryerli del Carmen	Estudio de la fotoquímica del vanillin por radiación UV-A directa e indirecta por procesos fotosensibilizados con Pterina	Carolina Lorente
11:45	T21	Villarreal	Valentín	Estudio teórico de la ozonólisis de halopropenos: formación de intermediarios de criegee halogenados y destino en la atmósfera	María Eugenia Tucceri y Larisa Bracco
12:00	T22	Huamani	Angel Luciano	Modulación del Transporte Iónico en Nanocanales de estado sólido modificados con Redes Metal-orgánicas (MOFs)	Omar Azzaroni, Waldemar Marmisollé
12:15	T23	Moreno Yalet	Nahuel	Estudio DFT sobre la adsorción y disociación de N-nitrosodimetilamina sobre un nanocluster de Ni <sub>8</sub>	Víctor Ranea, Pablo Dammig Quiña

**XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024**
**Miércoles 18**

Miércoles 18					
		Expositor/a		Título	Directores
08:30	T24	Rivera	Juan Pablo	Estudio electroquímico y caracterización de películas de magnetita	Doris Elda Grumelli y Álvaro Tesio
08:45	T25	Sosa	María Virginia	Influencia del agregado de agua en el autoensamblado y en las propiedades fotoquímicas de resorcinarenos	Ezequiel Wolcan
09:00	T26	Ventre	Josefina	Control de las propiedades optoelectrónicas de grafeno e híbridos para bio-aplicaciones	Francisco Ibañez, Martin Bellino
09:15	T27	Tenti	Juan Martín	Análisis del Sueño con Inteligencia Artificial	Marcelo Arlego, Marisa Bab
09:30	T28	Sanchez Dova	Anaclara	Compatibilización de un polímero sintético catiónico y alginato de sodio como biopolímero aniónico	Tamara Oberti, Juan Manuel Fernandez
09:45	T29	Godoy Ortega	Gricelda	Aductos Timina-Pterina: Caracterización y Propiedades Fotosensibilizadoras	Carolina Lorente y Andrés H. Thomas
10:00	T30	Boggan Simal	Guillermina	Diseño de nanopartículas plasmónicas y carbon dots para el desarrollo de métodos alternativos de diagnóstico cito e histopatológico	Carolina Vericat y María Ana Huergo
10:15	T31	Scaramutti	Mariel	Evaluación de tratamientos combinados de oxidación con biorremediación, aplicados a residuos oleosos resultantes del almacenamiento de petróleo	Janina Rosso, Verónica Mora
10:30	Coffee Break + Posters				
10:45					
11:00	I02	Dra. M. Eugenia Tuccheri		Estudios cinéticos para dilucidar mecanismos de reacción atmosféricos y de combustiones	
11:15					
11:30	T32	Armijos	Gerardo	Estructuras supramoleculares basados en ácido fólico para fotoliberación controlada de sensibilizadores	Andrés Thomas y Mariana Serrano
11:45	T33	Sille	Irene Elisabeth	Hidrogeles biodegradables sobre superficies de interés en cirugía protésica: hacia un sistema óptimo para la liberación local de agentes terapéuticos	Patricia Schilardi, María Noel Urrutia
12:00	T34	Tsunoda	Sofia	Estudio electroquímico de la electrodeposición de estaño en un solvente eutéctico profundo basado en cloruro de colina y ácido oxálico	Mariela G.Ortiz, Claudio A. Gervasi, Leticia A. Azpeitia
12:15	T35	Cruz González	Ana María	Nanogeles de polímeros con respuesta a cambios de la calidad del solvente como vehículos de biomateriales: estudios por simulaciones computacionales	Gabriel S. Longo y Alberto Albesa

**XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024**
**Jueves 19**

Jueves 19					
		Expositor/a		Título	Directores
08:30	T36	Farías	Jesúan Javier	Estudio del mecanismo de oxidación fotosensibilizada de triptófano a n-formilquinurenina	Andrés H. Thomas y María Laura Dántola
08:45	T37	Espinosa Manrique	Wilfred	Estudio cinético teórico de la oxidación atmosférica de los productos de degradación de los fungicidas Fluopyram y Fluopicolide iniciada por el radical oh	María Paula Badenes; María Eugenia Tucceri
09:00	T38	Pagliari	Paula Silvina	Modelo de Heisenberg bidimensional con anisotropía uniaxial e interacciones dipolares: caracterización del diagrama de fases	Marisa A. Bab, Gustavo P. Saracco
09:15	T39	Borzi	Maria Alejandra	Desarrollo de estrategias terapéuticas para el tratamiento de la amiloidosis basadas en fototerapia plasmónica con nanopartículas de oro	María Ana Huergo y Eduardo Daniel Prieto
09:30	T40	Cathcarth	Marilina	Control de la adsorción de proteínas mediante estrategias antifouling en superficies de sílica	Gabriel S. Longo, Marcelo R. Ceolin, Agustín S. Picco
09:45	T41	Hernandez Parra	Miguel	Biosensado de creatinina vía respuesta iontrónica de un nanocanal único	Waldemar A. Marmisollé y Omar Azzaroni
10:00	T42	Madero	Agustín	Avances en el desarrollo de kits colorimétricos basados en nanopartículas de oro para el diagnóstico serológico de la tristeza bovina	María Ana Huergo y Sabrina Ganzinelli.
10:15	T43	Girardi	Joaquín	Diseño experimental y estudio teórico de materiales para vectores de energía limpia: baterías de Li	Mariela Ortiz y Claudio Gervasi
10:30	Coffee Break + Posters				
10:45					
11:00	I03	Dr. Francisco Ibañez		Subdominios de grafeno e inteligencia artificial empleados en la detección de iones contaminantes en agua	
11:15					
11:30	T44	Caballero Lawrence	Amanda	Estudio cinético teórico de reacciones de hidrofluoroéteres con radicales OH	Dra. María Paula Badenes
11:45	T45	García Beltrán	Karla Paola	Efecto de la presencia de triptófano en la generación fotoinducida de dímeros de tirosina por sensibilizadores endógenos	Andrés H. Thomas, María Laura Dántola
12:00	T46	Laviani	Magalí	Caracterización y funcionalización de superficies de magnetita con átomos individuales y nanopartículas de platino	Doris Grumelli
12:15	T47	Gonik	Eduardo	Nanomateriales organometalicos fotoactivos basados en Hf con potenciales aplicaciones en salud	González Mónica Cristina



I N I F T A

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### PÓSTERS

	Expositor/a		Título	Directores
P01	Bancalari	Tomás Ezequiel	Estudio sobre la fotofísica de la interacción luminóforo-analito	Fabrizio Ragone
P02	Crespo Ferruscho	Diana Catalina	Nuevos andamios degradables compuestos a base de polímeros naturales y polvos metálicos para regeneración de tejidos	María Soledad Belluzo y Natalia Fagali
P03	Grizzi	Pablo Antonio	Modelado del comportamiento magnético de películas multicapas con fuerte anisotropía perpendicular	Marisa Bab y Gustavo Saracco
P04	Luis	Gabriela	Liofilización de nanopartículas de plata como estrategia para incrementar la estabilidad y potenciar el efecto antimicrobiano	María Noel Urrutia y Fiorela Ghilini



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA



---

I N I F T A

## **XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024**

***CONFERENCIAS INVESTIGADORES***

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### ESTABILIDAD ELECTROQUÍMICA DE SUPERFICIES RECONSTRUIDAS DE

#### Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 001

Doris Grumelli

<sup>1</sup> Laboratorio de NanoElectroCatálisis. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[doriselda@gmail.com](mailto:doriselda@gmail.com)

La superficie de monocristales de magnetita con la orientación 001 (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> 001) revisten gran importancia dado a que la reconstrucción de dicha superficie permite alojar átomos individuales los cuales no logran sinterizar entre ellos se mantienen aislados incluso luego de exponer la superficie a altas temperaturas.<sup>1,2</sup> Esto convierte a Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(001) en una superficie modelo en sí misma y como soporte para el estudio desalojar catalizadores formados por átomos individuales<sup>2</sup>. Sin embargo, dichas tanto la estabildades de Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(001) y de átomos únicos sobre ella, han sido estudiadas en fase gaseosa<sup>3</sup> y pocos experimentos han sido ejecutados en condiciones experimentales cercanas a *las cuales funcionan los electrocatalizadores reales*, por ejemplo, en soluciones acuosas u orgánicas.

En este trabajo se mostrará la estabilidad electroquímica de la reconstrucción superficial ( $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ R45°) de monocristales de Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(001) en condiciones *operando* mediante difracción de rayos X superficial (SXRD)<sup>4</sup>. Los experimentos fueron llevados a cabo en el la línea ID03 del acelerador de partículas de *European Synchrotron Research Facilities* (ESRF). Mediante dichas mediciones hemos podido demostrar que es posible no solo transferir muestras Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>(001)- ( $\sqrt{2} \times \sqrt{2}$ )R45° desde ultra alto vacío (UHV) al setup experimental electroquímico sin pérdida de la reconstrucción, si no que la misma es estable por horas en contacto con soluciones alcalinas. También ha sido posible evaluar la estabilidad de la reconstrucción al variar el potencial electroquímico de la interface, demostrando que la superficie mantiene su reconstrucción superficial a potenciales anódicos donde ocurre la reacción de evolución de oxígeno (OER) con densidades de corriente que alcanzan 10 mA/cm<sup>2</sup>. Sin embargo, a potenciales más negativos donde comienza la reducción de la superficie, sin embargo la reconstrucción es completamente destruida. cuando se alcanzan potenciales que comienzan a reducir la superficie. La estabilidad estructural observada en la región de OER permite el uso de esta superficie tanto como sistema modelo para catálisis como para su futuro uso como sustrato para alojar átomos únicos.

<sup>1</sup> M. W. Louie and A. T. Bell, Phys. Rev. B, **2015**, 92, 075440.

<sup>2</sup> R. Bliem, J. van der Hoeven, A. Zavodny, O. Gamba, J. Pavelec, P.E. de Jongh, Mi. Schmid, U. Diebold, and G. S. Parkinson, Angew. Chem. Int. Ed. **2015**, 54, 13999.

<sup>3</sup> B. Arndt, R. Bliem, O. Gamba, J. van der Hoeven, H. Noei, U. Diebold, G. S. Parkinson, A. Stierle. Surface Science, **2016**, 653, 76.

<sup>4</sup> D. Grumelli T. Wiegmann, S. Barja, F. Reikowski, F. Maroun, P. Allongue, J. Balajka, G. Parkinson, U. Diebold, K. Kern, O. M. Magnussen, Angewandte Chemie, 59, 49, **2000** 21904-21908

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### ESTUDIOS CINÉTICOS PARA DILUCIDAR MECANISMOS DE REACCIÓN ATMOSFÉRICOS Y DE COMBUSTIONES

Tuccheri María Eugenia

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.  
[mtuccheri@inifta.unlp.edu.ar](mailto:mtuccheri@inifta.unlp.edu.ar)

En muchas de las reacciones que se producen en la atmósfera intervienen especies que contaminan el ambiente originando cambios que influyen particularmente en el clima. Para estimar el impacto que las mismas provocan, se requiere del conocimiento de la termoquímica, la cinética, los mecanismos de reacción y los procesos fotoquímicos en los que intervienen estos contaminantes como también las especies estables o radicalarias que puedan originar por degradación. Estos resultados, junto con los provenientes de medidas de campo, se emplean en complejos modelados atmosféricos que permiten evaluar su impacto. Sin embargo, la información empleada en los mismos muchas veces resulta escasa o no posee la calidad adecuada, y las simulaciones realizadas no logran alcanzar la precisión y confiabilidad deseada. Por lo tanto, se requiere de datos termodinámicos y cinéticos derivados a partir de cuidadosas y detalladas determinaciones experimentales o teóricas que permitan obtener información aún no disponible, resolver controversias existentes o ampliar el intervalo de condiciones de presión y temperatura en los cuales puedan emplearse. Esto también se aplica a los datos necesarios para poder realizar modelados precisos de la atmósfera de otros planetas y de mecanismos de combustión.

En las presentes jornadas, se expondrán resultados de investigaciones experimentales y teóricas recientes efectuadas en nuestro grupo de investigación. En particular, en relación con la descomposición térmica de contaminantes halogenados, se presentará un estudio cinético teórico de la pirólisis de 1-bromo-3-cloropropano donde se dilucidaron los posibles canales de reacción y se determinaron las constantes de velocidad de los canales más favorables en un amplio rango de temperaturas y presiones [1]. Por otra parte, se detallará el estudio experimental y teórico de la formación de aerosoles orgánicos secundarios a partir de la fotooxidación iniciada con radicales OH de  $\gamma$ -butirolactona y  $\gamma$ -valerolactona en condiciones atmosféricas [2]. Y por último, se discutirán resultados recientes de investigaciones experimentales y análisis cinéticos teóricos de reacciones entre átomos y radicales halogenados pequeños [3,4].

#### Referencias

- 1) Bracco, L.L.B, Badenes, M.P., Tuccheri, M.E., Cobos, C.J., *J. Phys. Chem. A*, **2022**, 126, 13, 2103–2110.
- 2) Tajuelo, M., Rodríguez, A., Aranda, A., Díaz-de-Mera, Y., Tuccheri, M.E., Rodríguez, D., *Atmospheric Environment*, **2022**, 276, 119051.
- 3) Bracco, L.L.B, Areco, L.T, Tuccheri, M.E., Cobos, C.J, *Chemical Physics Letters*, **2024**. DOI:10.1016/j.cplett.2024.141569



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA



I N I F T A

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### SUBDOMINIOS DE GRAFENO E INTELIGENCIA ARTIFICIAL EMPLEADOS EN LA DETECCIÓN DE IONES CONTAMINANTES EN AGUA

Llaver, Mauricio<sup>1</sup>, Barrionuevo, Santiago D.<sup>2</sup> e Ibañez, Francisco J.<sup>2</sup>.

1 Laboratorio de Química Analítica para Investigación y Desarrollo (QUIANID), Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Cuyo / Instituto

Interdisciplinario de Ciencias Básicas (ICB), CONICET UNCUYO, Padre J. Contreras 300, (5500), Mendoza, Argentina

2 Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[fjibanez73@gmail.com](mailto:fjibanez73@gmail.com)

En esta Jornada les mostraré cómo obtener dominios de grafeno más pequeños (subdominios de 3-8 nm de diámetro) extraídos de grafeno monocapa obtenido por CVD. Estos subdominios son propicios por su confinamiento cuántico y por la presencia de grupos  $sp^2/sp^3$  en su superficie lo que les brinda propiedades de fluorescencia y poder ser modificados químicamente para mejorar la detección selectiva y precisa de iones contaminantes como el  $Hg^{2+}$  presente en agua de consumo. Por otro lado, la incorporación de inteligencia artificial, a través del uso de machine learning (ML), nos permite distinguir con precisión los espectros de fluorescencia del sensor y de esa forma, poder discriminar, por ejemplo: señales de  $Fe^{3+}$  de  $Hg^{2+}$ . Los resultados arrojados por ML fueron luego validados por espectroscópicas de uso convencional dando resultados muy similares lo cual nos permite asegurar que con inteligencia artificial podemos reducir ostensiblemente las horas de laboratorio/hombre e insumos necesarios en aplicaciones de detección ultrasensible.

Mauricio Llaver, Santiago Barrionuevo, Jorge M. Núñez, Agustina L. Chapana; Rodolfo Wuilloud, Myriam Aguirre, and Francisco J. Ibañez\*. Fluorescent GQDs-enhanced machine learning for the accurate detection and quantification of  $Hg^{+2}$  and  $Fe^{+3}$  in real water samples. *Environmental Science: Nano*. **2024**, 11, 2703



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA



---

I N I F T A

## **XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024**

***Exposiciones orales de estudiantes de postgrado***

# XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

## ESTUDIO DE CINÉTICAS DE OXIDACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE MAGNETITA: MODELOS Y APLICACIONES

Orozco-Henao Juan M.<sup>1</sup>, Alí Francisco L.<sup>1\*</sup>, Lavorato Gabriel C.<sup>1</sup>, Vericat Carolina<sup>1</sup> y Fonticelli Mariano H.<sup>1</sup>.

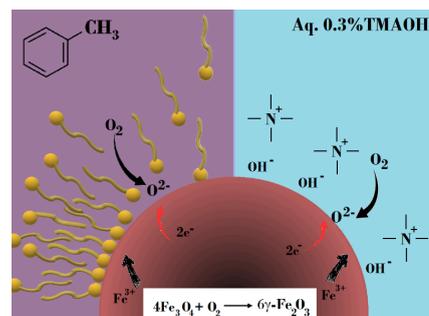
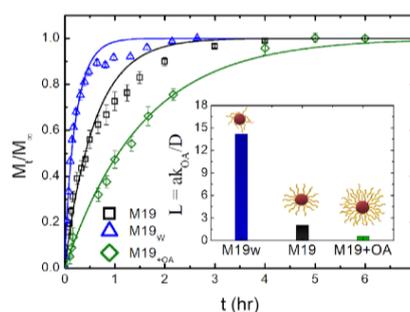
<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET. [franciscoali@inifta.unlp.edu.ar](mailto:franciscoali@inifta.unlp.edu.ar)

**Introducción:** Las nanopartículas de óxidos de hierro (FeOx NPs) son empleadas ampliamente como modelo de estudio para investigar las propiedades de sistemas magnéticos nanoestructurados, con numerosas aplicaciones en biomedicina, remediación ambiental y catálisis. Se plantea estudiar la estabilidad química de las FeOx NPs con el objetivo de diseñar estrategias de síntesis de NPs híbridas que incorporen óxidos de otros metales como cobalto y níquel. Particularmente, el trabajo se centra en las transformaciones rédox mediadas por difusión catiónica.

**Resultados:** Se colaboró con la síntesis y caracterización de nanopartículas de magnetita (Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>) y el posterior estudio de su cinética de oxidación a maghemita (γ-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) mediante espectroscopía UV-Vis. Las cinéticas realizadas en NPs con recubrimiento de ácido oleico (OA) en medio orgánico mostraron un retardo en la oxidación con respecto a las realizadas con recubrimiento de hidróxido de tetrametilamonio (TMAOH) en agua a la misma temperatura. Este efecto es más importante al aumentar la cantidad de OA (**Figura 1**). Se pusieron a prueba distintos modelos para interpretar este efecto, considerando soluciones de la segunda ley de Fick con distintas condiciones de contorno. Entre ellas, se hizo la suposición de que el OA adsorbido en la superficie de las NPs bloquea parcialmente la llegada del oxígeno, mientras que en presencia de TMAOH el proceso puede describirse como uno puramente difusional (**Figura 1**).

**Conclusiones:** El modelo que acopla la difusión de cationes dentro del óxido con la reactividad de la superficie puede explicar satisfactoriamente las diferencias observadas entre cinéticas de oxidación. El entendimiento de cómo regular la estabilidad química de las FeOx NPs mediante el tipo y grado de recubrimiento contribuye al diseño de futuras síntesis de NPs híbridas.

**Figura 1:** Comparación del grado de avance de reacción respecto al tiempo para distintas densidades de OA en la superficie (Izq). Representación de los modelos para los dos tipos de recubrimiento en sus respectivos medios (Der).



## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### FOTOQUÍMICA DE DECIL-RIBOFLAVINA EN METANOL BAJO IRRADIACIÓN CON LUZ AZUL

Ardila Carlos<sup>1</sup>, Sosa María José<sup>1</sup>, Urrutia Maria Noel<sup>1</sup>, Thomas Andrés<sup>1</sup>, Dántola María Laura<sup>1</sup> y Vignoni Mariana<sup>1</sup>

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.  
[cardila@inifta.unlp.edu.ar](mailto:cardila@inifta.unlp.edu.ar)

La riboflavina (Rf) es una vitamina esencial (B2) hidrosoluble y precursora de las coenzimas flavínadenínucleótido (FAD) y flavínmononucleótido (FMN)<sup>[1]</sup>, grupos prostéticos que actúan como portadores de electrones en reacciones de óxido-reducción involucradas en numerosas vías metabólicas. Dependiendo del solvente, pH, presencia de iones y concentración de O<sub>2</sub>, su comportamiento fotoquímico varía, pudiendo sufrir diferentes tipos de procesos intramoleculares. Rf y sus análogos absorben radiación en la región UV y visible con una gran eficiencia de entrecruzamiento de sistemas y pueden actuar como fotosensibilizadores (Sens), es decir absorber radiación en un rango del espectro en el que una molécula blanco no absorbe y generar especies reactivas<sup>[2]</sup> capaces de provocar modificaciones químicas. Se ha propuesto que los Sens lipofílicos pueden interactuar o intercalarse con biomembranas incrementando la eficiencia del daño fotoinducido.<sup>[3]</sup>

Teniendo en cuenta lo anterior, hemos sintetizado diferentes Sens lipofílicos derivados de pterinas y flavinas mediante una reacción de sustitución nucleofílica bimolecular (S<sub>N</sub>2). El derivado alquilado de Rf,<sup>[4]</sup> decil-Rf, presentó propiedades fotofísicas y fotoquímicas similares a Rf con la diferencia de que interactúa eficientemente con biomembranas aumentando su eficiencia de generar daño fotoinducido cuando es expuesto a radiación UVA. En este trabajo se investigó la fotoquímica de decil-Rf irradiando soluciones metanólicas a 445nm a diferente concentración de O<sub>2</sub>. Los productos de fotodegradación se caracterizaron mediante espectrometría de masas, y se compararon con los obtenidos durante la degradación fotoquímica de Rf y otros derivados. Para la fotólisis realizada en presencia de O<sub>2</sub> se encontraron 3 productos principales, dos de ellos derivados del tipo isoaloxazina (espectro de absorción similar al de decil-Rf); el tercer producto no presenta absorción por encima de 425 nm. En cuanto al proceso realizado en anaerobiosis, se observó que la velocidad de fotodegradación es mayor que en presencia de O<sub>2</sub> y se encontraron tres productos adicionales tipo isoaloxazina. Estos resultados indican que decil-Rf es un Sens que sufre cambios químicos al ser expuesto a luz visible, que el mecanismo de fotodegradación es dependiente de O<sub>2</sub>, y que se generan productos que conservan la capacidad de absorción en la región visible que podrían actuar como potenciales Sens.

#### Referencias

- 1) Bornemann, S. *Nat. Prod. Rep.* **2002**, 19, 761-772.
- 2) Bastos, E. L., et-al. *Chem Rev.* **2023**, 123, 9720-9785.
- 3) Calori, I. R., et-al. *J. Photochem. Photobiol. B: Biol.* **2016**, 160, 240 –247.
- 4) Sosa, M. J., et-al. *BBA-Biomembranes*, **2023**, 1865(5).

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### SENSORES (BIO)QUÍMICOS EN FORMATO PORTABLE BASADOS EN NANOMATERIALES PARA EL MONITOREO CONTINUO Y NO-INVASIVO DE BIOMARCADORES

Diforti Joaquín<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

<sup>2</sup>Department of Bioelectronic, GISENS BIOTECH, 2150 Shattuck Ave PH, Berkeley, CA 94704, California, USA.

[joaquin.diforti@gmail.com](mailto:joaquin.diforti@gmail.com)

En el actual contexto donde el costo de la atención médica, mayoritariamente centralizada, continúa en aumento, surge la necesidad de ofrecer a la población un monitoreo continuo y personalizado de su estado de salud, permitiendo abordar a la medicina con un enfoque preventivo y predictivo. A partir de la convergencia de herramientas provenientes de la nanotecnología, la microelectrónica y la electroquímica, han surgido plataformas portátiles de biosensado en formato “wearable”, libres de marcadores, para el monitoreo continuo, no-invasivo y ultrasensible de biomoléculas de interés clínico presentes en el sudor. Entre estas tecnologías, se destacan los biosensores potenciométricos, basados en membranas selectivas, y amperométricos, basados en un reconocimiento enzimático redox construido sobre estructuras capa-por-capas.

En este contexto, hemos desarrollado y optimizado sensores potenciométricos para la cuantificación de sodio y potasio en muestras sintéticas que imitan las condiciones de diversas muestras complejas. Además, hemos puesto a prueba exitosamente su performance electroquímica en muestras biológicas reales como saliva y sangre capilar.

Además, con el objetivo de extender los límites de la biodetección en términos de flexibilidad, sensibilidad y robustez hemos evaluado diferentes modificaciones sobre los electrodos de trabajo y de referencia de los sensores. Sobre el electrodo de trabajo hemos evaluado el efecto electroquímico y topográfico que genera la implementación de polímeros conductores (PCs), como el PEDOT:PSS, y nanomateriales, como las nanosheets de grafito, y su combinación. Con respecto al electrodo de referencia, hemos ensayado el efecto que membranas basadas en plastificantes, PVC y PVB, y PCs generan sobre la estabilidad del potencial en el tiempo y frente a diversos metabolitos.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES DE MAGNETITA CON MOLÉCULAS DE PORFIRINAS DE Co Y Ni: CARACTERIZACIÓN SUPERFICIAL Y COMPORTAMIENTO ELECTROCATALÍTICO FRENTE A LA REACCIÓN DE REDUCCIÓN DE OXÍGENO

Heredia Romina M. A., Guillermo Benitez y Doris Grumelli

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[agustinaheredia179@gmail.com](mailto:agustinaheredia179@gmail.com)

La mejora en las velocidades y eficiencias de las reacciones electrocatalíticas es crucial para el desarrollo de tecnologías de conversión de energía y producción de combustibles<sup>[1]</sup>. La reacción de reducción de oxígeno (ORR), proceso químico muy importante en las pilas de combustible, suele utilizar Pt como catalizador, un material costoso. Las alternativas de reemplazo incluyen metales de transición como Fe, Co, Ni, etc. Las porfirinas metálicas son de gran interés como sustitutos de los catalizadores actuales, ya que son especialmente adecuadas para la funcionalización de superficies a nanoescala comportándose como catalizadores de un sólo átomo (SACs)<sup>[2]</sup>.

Por lo antes mencionado, en este trabajo se explora la utilización de superficies monocristalinas y policristalinas de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , un material económico y abundante, modificado con porfirinas de Co y Ni (CoTPP, CoTPP4N<sup>2+</sup>, NiTPP y NiTPP4N<sup>2+</sup> respectivamente) como materiales de electrodo para mejorar la catálisis de la ORR, empleando dos métodos de inmovilización: **evaporación en fase vapor**, en condiciones de ultra alto vacío (UHV) y **electrografting**, en solución. Las muestras así preparadas se caracterizaron principalmente por espectroscopía fotoelectrónica de rayos X (XPS) y se evaluó la respuesta electrocatalítica para la ORR en medio alcalino.

Los espectros de XPS de CoTPP/  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  (001) revelan la presencia de N, pero la ausencia de Co. El análisis del espectro de alta resolución de N 1s muestra la integridad de la molécula de porfirina, habiendo algunas moléculas metaladas y otras no. Estos resultados podrían explicarse considerando que la ausencia de Co se debe a que el mismo pasa a ocupar los sitios de las vacancias catiónicas subsuperficiales de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  (001) reconstruida<sup>[3]</sup>. Como es de esperarse este sistema exhibe una actividad electrocatalítica hacia la ORR similar a la de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  (001). Por otro lado, para las deposiciones de porfirinas por medio de electrografting, los sistemas CoTPP4N<sup>2+</sup>/ $\text{Fe}_3\text{O}_4$  (001), CoTPP4N<sup>2+</sup>/ $\text{Fe}_3\text{O}_4$  policristalina, NiTPP4N<sup>2+</sup>/ $\text{Fe}_3\text{O}_4$  (001) y NiTPP4N<sup>2+</sup>/ $\text{Fe}_3\text{O}_4$  policristalina muestran señales claras de XPS para N 1s, Co 2p y Ni 2p, demostrando, además, mejoras en la actividad electrocatalítica.

#### Referencias

- 1) Hötger, D., *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2019**, 21, 2587-2594.
- 2) Bliem, R., *Science*, **2014**, 346(6214), 1215-1218.
- 3) Bliem, R. *Physical Review B*, **2015**, 92(7) 075440.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### POLIMEROSOMAS DERIVADOS DE UN COPOLÍMERO FUMÁRICO PARA EL TRANSPORTE DE FÁRMACOS

Romina A. Bada<sup>1</sup>, M. Silvina Molinuevo<sup>2</sup> y Pablo J. Peruzzo<sup>1</sup>.

(1) Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

(2) Laboratorio de Investigaciones en Osteopatías y Metabolismo Mineral (LIOMM), UNLP - CIC PBA, La Plata, Argentina

Bada Romina: [rominabada@inifta.unlp.edu.ar](mailto:rominabada@inifta.unlp.edu.ar) ; Molinuevo Silvina:

[silvinamolinuevo@yahoo.com.ar](mailto:silvinamolinuevo@yahoo.com.ar); Peruzzo Pablo: [pjperuzzo@inifta.unlp.edu.ar](mailto:pjperuzzo@inifta.unlp.edu.ar)

Existe un interés significativo en el uso de nanopartículas como nuevas plataformas para el transporte y liberación de fármacos con limitaciones cuando se administran directamente en el cuerpo [1]. En nuestra investigación, desarrollamos vesículas para encapsular risedronato, una droga utilizada en el tratamiento de alteraciones del metabolismo mineral y óseo, obtenidas por autoensamblaje de un nuevo copolímero anfifílico tribloque. Este copolímero se basa en polietilenglicol (PEG) como bloque hidrofílico y en un copolímero estadístico de benzoato de vinilo (VBz) y fumarato de diisopropilo (FIP) como bloque hidrofóbico.

El copolímero anfifílico, sintetizado mediante polimerización por transferencia de cadena por adición-fragmentación reversible (RAFT), presentó una fracción en masa porcentual de bloque hidrofílico (f) de 30, adecuada para la formación de polimerosomas. Por autoensamblaje de este copolímero empleando el método de inyección directa se obtuvieron vesículas de aproximadamente 54 nm (TEM) y un diámetro hidrodinámico promedio  $Z_D$  de 163 nm (DLS). Para evaluar el potencial de estos sistemas como vehículo de risedronato, se prepararon polimerosomas cargados con este principio activo. Las vesículas resultantes presentaron un tamaño similar al de las vesículas no cargadas, con un contenido de risedronato de  $12 \pm 2$  mg por gramo de polímero determinado por HPLC. Los estudios de liberación realizados durante 10 días en diferentes medios, mostraron que la droga se libera de manera sostenida en este período. Finalmente, evaluamos la viabilidad y la citotoxicidad celular utilizando un modelo *in vitro* de macrófagos murinos (células RAW264.7), encontrando que estos parámetros no se modifican por la presencia de vesículas tanto vacías como cargadas con el principio activo en las concentraciones probadas. Sin embargo, las partículas inhibieron parcialmente la producción de óxido nítrico inducida por lipopolisacárido (LPS) en macrófagos. Este último efecto podría sugerir una actividad antiinflamatoria de las partículas. En conclusión, desarrollamos un copolímero anfifílico tribloque por RAFT el cual pudo generar polimerosomas nanométricos capaces de transportar y liberar risedronato; mostrando ser biocompatibles en modelos *in vitro*.

#### Referencias

[1] Dan N, Design and Development of New Nanocarriers, (2018) Elsevier Inc. Cap 1

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### DESARROLLO DE NANOPARTÍCULAS BASADAS EN POLIELECTROLITOS ENTRECruzADOS IÓNICAMENTE COMO PLATAFORMAS ADYUVANTES Y VEHICULIZANTES DE ANTÍGENOS VACUNALES

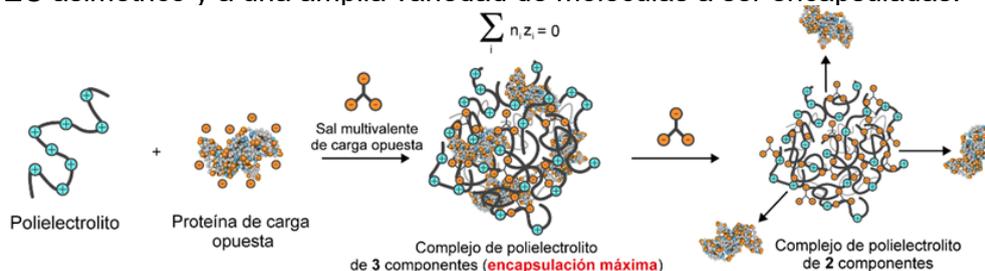
Eugenia Apuzzo<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

INIFTA- 64 y 113 La Plata, 1900

[eugeniaapuzzo@gmail.com](mailto:eugeniaapuzzo@gmail.com)

Durante los dos primeros años de tesis, se logró sintetizar un complejo de polielectrolito (PEC) asimétrico<sup>1</sup> de tamaño nanométrico con gran estabilidad en dispersión coloidal<sup>2</sup> y se utilizó para desarrollar la vacuna ARGENVAC 221, la cual demostró ser segura y efectiva contra el COVID-19 en ensayos preclínicos. Sin embargo, en este camino, enfrentamos dificultades para maximizar y/o controlar la carga del antígeno proteico en los PECs utilizados, obteniendo rendimientos escasos de entre el 10 y el 20%. Más recientemente, centramos nuestro esfuerzo en entender el fenómeno de adsorción proteica en sistemas PEC asimétricos, de los cuales hay pocos datos reportados en bibliografía, con el objetivo de lograr formulaciones con mayor rendimiento y un control más preciso. Para ello, utilizamos un sistema PEC asimétrico basado en tripolifosfato de sodio (TPP) y polialilamina (PAH) como bloques de construcción principales. A partir de una serie de experimentos sistemáticos, determinamos que 1) es posible adsorber proteínas con un 100% de rendimiento sólo cuando existe un balance preciso de concentraciones y 2) que la adsorción de proteínas es selectiva al punto isoeléctrico de la misma. Posteriormente, mediante el análisis cuantitativo de todos los componentes de la mezcla a diferentes concentraciones de TPP, propusimos un mecanismo que explica los fenómenos observados (Figura 1). Este mecanismo, en principio, podría aplicarse a cualquier tipo de PEC asimétrico y a una amplia variedad de moléculas a ser encapsuladas.



**Figura 1-** Esquema del mecanismo propuesto para el fenómeno de encapsulación de proteínas en PECs asimétricos.

#### Referencias:

1-Herrera, S. E.; Agazzi, M. L.; Apuzzo, E.; Cortez, M. L.; Marmisollé, W. A.; Tagliacruzchi, M.; Azzaroni, O. *Soft Matter*, 2023,19, 2013-2041

2-Apuzzo, E; Agazzi, M; Herrera, S.E; Picco, A ; Rizzo, G; Chavero, C; Bianchi, D; Smaldini, P ; Cortez, L; Marmisolle, W; Padula, G ; Seoane, A; Alomar, M ; Denofrio, M.P; Docena, G; Azzaroni, O. *ACS Appl. Bio Mater*, 2023,6, 11, 4714–4727

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS DE ÓXIDO DE HIERRO RECUBIERTAS CON ÁCIDO TÁNICO Y DECORADAS CON NANOPARTÍCULAS DE PLATA PARA RECUBRIMIENTOS ANTIBACTERIANOS.

Valentina C. Cajiao Checchin<sup>\*1</sup>, Jesús Fuentes-García<sup>2</sup>, Diana Arrieta<sup>1</sup>, Mónica Fernández Lorenzo<sup>1</sup>, Gerardo Goya<sup>2</sup>, Natalia Fagali<sup>1</sup>

1 Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

2 INMA, CSIC-UNIZAR, MAGNA, C/ Mariano Esquillor, s/n Campus Río Ebro – 50018 Zaragoza, España

\*valen.svp@gmail.com ; valentinacajiao@inifta.unlp.edu.ar

La rápida evolución de la resistencia bacteriana supera a la velocidad de creación de nuevos agentes antibacterianos, lo que aumenta el riesgo de infecciones intrahospitalarias asociadas a implantes médicos. Aunque las nanopartículas de óxido de hierro (IONPs) poseen una baja actividad antimicrobiana en comparación con otras nanopartículas, su alta biocompatibilidad y sus propiedades magnéticas las hacen de elevado interés para aplicaciones biomédicas. Para mejorar su eficacia antimicrobiana se propone un método de recubrimiento de las IONPs con ácido tánico (AT) y decoración con nanopartículas de plata (NPAg) sintetizadas in situ.

Se llevó a cabo la síntesis de IONPs mediante sonoquímica a partir de sales de Fe<sup>3+</sup> en medio acuoso. Luego se realizó el capping con AT por agitación durante 24h (IONPs@AT). Para la síntesis in situ de NPAg se utilizaron IONPs@AT previamente separadas del medio de síntesis por acción de un imán, AgNO<sub>3</sub> y BH<sub>4</sub><sup>-</sup> y AT como agentes reductores bajo agitación durante 3 horas a 60°C.

Las IONPs, las IONPs@AT y las IONPs@AT-NPAg fueron caracterizadas por FT-IR, TGA, potencial Z y HRTEM-EDS. Las medidas de FT-IR de las IONPs@AT mostraron bandas atribuibles al carbonilo del éster del AT entre 1730 y 1705 cm<sup>-1</sup>, y el análisis TGA de las IONPs@AT reveló una pérdida de peso del 9% a 260°C, consistente con la temperatura de degradación principal del AT. Las mediciones de potencial Z indicaron un valor negativo de  $-21.0 \pm 0.8$  mV para las IONPs@AT, en contraste con el valor positivo de  $+3,9 \pm 1.9$  mV observado para las IONPs sin recubrimiento. Las técnicas de caracterización confirmaron la presencia de AT como recubrimiento. Las IONPs mostraron un tamaño promedio de 62 nm. Las NPAg sintetizadas in situ presentaron dos poblaciones, identificadas por TEM con un tamaño promedio: NPAg1 de 6 nm y NPAg2 de 84 nm. La población de NPAg1 se observaron decorando tanto a las IONPs@AT como a las NPAg2 de mayor tamaño.

En resumen, fue posible sintetizar IONPs recubiertas con AT decoradas con NPAg obtenidas por síntesis in situ. Se observó que las IONPs@AT estaban decoradas principalmente con la población más pequeña de NPAg. Se propone a futuro optimizar el método de síntesis y separación magnética para lograr un decorado uniforme con NPAg pequeñas.

Los autores agradecen al proyecto MSCA-RISE NESTOR (101007629), CONICET (PIP 2021 11220200100315CO); ANPCyT (PICT 2019-00631, PICT-2020-02169, PICT Start Up 2020- 0034) y UNLP (11/X900) por el financiamiento otorgado para realizar este trabajo y se agradece a Y-TEC por las medidas de HRTEM-EDS.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### DESARROLLO DE MEMBRANAS FIBROSAS CONTENIENDO NANOPARTÍCULAS DE PLATA PARA TRATAMIENTO DE CONTAMINANTES EN AGUA

Zabala, Guadalupe Valeria<sup>1</sup>, Peruzzo, Pablo José<sup>1</sup> y Bolla, Patricia Araceli<sup>2</sup>.

<sup>(1)</sup>Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

<sup>(2)</sup>Centro De Investigación y Desarrollo En Ciencias Aplicadas "Dr. Jorge J. Ronco" (CINDECA) - (CONICET - UNLP) CCT La Plata.  
[guadalupezabala@quimica.unlp.edu.ar](mailto:guadalupezabala@quimica.unlp.edu.ar); [pablope@quimica.unlp.edu.ar](mailto:pablope@quimica.unlp.edu.ar);  
[pbolla@quimica.unlp.edu.ar](mailto:pbolla@quimica.unlp.edu.ar)

El agua es un recurso esencial para el desarrollo sostenible, la producción de energía y alimentos, los ecosistemas saludables y, por supuesto, toda forma de vida. Debido a la contaminación ambiental como consecuencia de las actividades humanas, se ha producido el deterioro de su calidad. Por lo tanto, uno de los mayores desafíos globales es proteger los recursos hídricos existentes. La tecnología de membranas basadas en polímeros es una de las más eficientes debido a su alta capacidad de separación, facilidad de operación y rentabilidad. Además, las mismas pueden modificarse mediante la inclusión de nanomateriales dando como resultado membranas de nanocompuestos poliméricos, lo que mejora su rendimiento y sus propiedades intrínsecas. Dentro de los diferentes nanomateriales que pueden emplearse, se destacan las nanopartículas de plata dado que también pueden aportar propiedades antimicrobianas y/o catalíticas. Así, sería posible generar membranas poliméricas que puedan realizar simultáneamente la separación física y la degradación catalítica de contaminantes en un sistema integrado. Si además se utilizan métodos bioinspirados para la preparación de las nanopartículas metálicas, en conjunto con el empleo de técnicas de electrohilado basado en dispersiones poliméricas acuosas para la preparación de estos sistemas, sería posible crear membranas nanocompuestas fibrosas con actividad catalítica utilizando metodologías amigables con el medio ambiente. En este marco, se plantea la obtención de membranas poliméricas fibrosas nanocompuestas producidas por electrohilado de formulaciones basadas en dispersiones de nanopartículas de plata, y dispersiones acuosas poliméricas con el fin de obtener membranas catalíticas con aplicación en el tratamiento de contaminantes orgánicos.

Las actividades propuestas para ello abarcan la síntesis de dispersiones poliméricas en base acuosa, la obtención de nanopartículas de plata empleando biomoléculas aisladas de bacterias gram+, la formulación de dispersiones acuosas polímero-nanopartículas de plata con propiedades adecuadas (contenido de sólidos, viscosidad, etc.), la producción de membranas por electrohilado, y la caracterización de los sistemas preparados. Por último, la evaluación de su desempeño catalítico y su capacidad para el tratamiento de contaminantes en agua.

#### Referencias

- 1) Gonzalez, E., Barquero, A.,..., Leiza, J. R., 2021, *Nanomaterials*, 11(3), 706.
- 2) Huggias, S, 2022. *Tesis Doctoral. Universidad Nacional de La Plata.*

# XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

## DESARROLLO DE NANOHIPOXIPATITA COMO SOPORTE DE FOTOCATALIZADORES

Vergel Rangel, Aldair<sup>1</sup> \*; Dell'Arciprete, María Laura<sup>1</sup> ; Mercado, D. Fabio<sup>2</sup>

<sup>(1)</sup>Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET. <sup>(2)</sup>Grupo de Investigación en Remediación Ambiental y Biocatálisis (GIRAB), Instituto de Química, Facultad de Cs. Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia UdeA, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia. [alveran.ing@gmail.com](mailto:alveran.ing@gmail.com)

Los materiales y procesos ambientalmente sostenibles para el tratamiento de problemáticas vigentes suponen optimizar los métodos de síntesis de estos materiales con el fin de hacerlos eficientes, resistentes, duraderos y con propiedades que permitan ser aplicados en cualquier área del conocimiento. En este contexto, la apatita (Ap) ha sido ampliamente estudiada como soporte de fotocatalizadores debido a sus propiedades versátiles, estabilidad y capacidad de adsorción de contaminantes. En este estudio, se optimizó la síntesis de nanopartículas de hidroxiapatita (nHAp) utilizando dos métodos diferentes: hidrotérmico y por nucleación; a la vez que se utilizaron dos plantillas de crecimiento del material: surfactante cetrimida (CT) y nanopartículas de sílice (nP-SiO<sub>2</sub>) de diferentes diámetros hidrodinámicos de 65, 103 y 355 nm con alendronato. Las nHAp sintetizadas se nombraron de acuerdo con la plantilla precursora de su síntesis seguida del método utilizado, como sigue: **HAp@CTHy**, **HAp@CTNu**, **HAp@SiNu**. Las muestras sintetizadas se caracterizaron mediante microscopía electrónica de transmisión (TEM), espectroscopía infrarroja (ATR-FTIR), análisis de área superficial/porosidad y termogravimetría (TGA). Las nHAp obtenidas por ambos métodos presentan una morfología y estructura adecuadas para su aplicación como soportes en fotocatalisis. Se observó que la ruta de síntesis que implica la plantilla de nP-SiO<sub>2</sub> presenta una dependencia del tamaño de la plantilla con la micro-mesoporosidad y el área superficial, sin grandes cambios en la estructura cristalina; por lo que se utilizaron para evaluar su capacidad de adsorción del colorante azul de metileno (MB) como modelo, obteniéndose los resultados mostrados en la **figura 2**. El análisis de las propiedades fisicoquímicas y su capacidad de adsorción ha permitido establecer que la estructura micro-mesoporosa en primer lugar y la carga superficial son los factores que gobiernan la adsorción del colorante sobre estos nanomateriales. Estos hallazgos son prometedores para el desarrollo de materiales compuestos basados en nHAp y abren nuevas posibilidades para futuras investigaciones en el campo de la fotocatalisis.

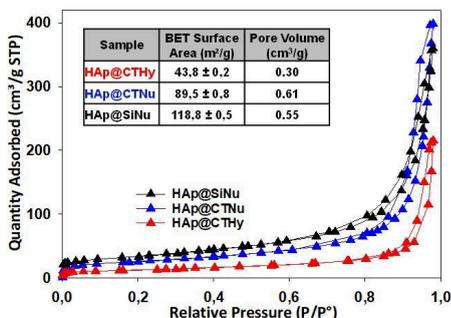


Figura 1. Isotermas de adsorción-desorción de N<sub>2</sub> a 77 K de las muestras de HAp sintetizadas y áreas superficiales BET/volumen de poro (tabla inset).

Figura 2. Isotermas de adsorción de MB a 303 K, pH 7,4 y 250 RPM sobre las muestras de HAp sintetizadas vía nucleación-plantilla de nP-SiO<sub>2</sub> de diferentes tamaños y parámetros del ajuste al modelo de Langmuir (tabla inset).

Sample	BET Surface Area (m <sup>2</sup> /g)	Z Potential (mV)	Q <sub>max</sub> (mg/g)	K <sub>L</sub> (L/mg)
HAp@Si65	103.2 ± 0.4	-3.9 ± 0.6	4,3 ± 0,3	1,1 ± 0,3
HAp@Si103	108.5 ± 0.5	-5.7 ± 2.3	1,5 ± 0,1	12,7 ± 10,5
HAp@Si355	118.8 ± 0.5	-15.1 ± 0.6	1,5 ± 0,1	17,0 ± 26,5

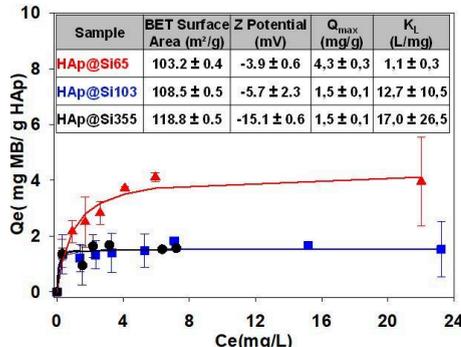


Figura 2. Isotermas de adsorción de MB a 303 K, pH 7,4 y 250 RPM sobre las muestras de HAp sintetizadas vía nucleación-plantilla de nP-SiO<sub>2</sub> de diferentes tamaños y parámetros del ajuste al modelo de Langmuir (tabla inset).

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### DETERMINACIÓN DE LA LONGITUD DE LOCALIZACIÓN EN REDES POLIMÉRICAS MEDIANTE SIMULACIONES DE DINÁMICA MOLECULAR

Villares Matías<sup>1</sup>, Ceolin Marcelo<sup>1</sup> y Marcus Müller<sup>2</sup>.

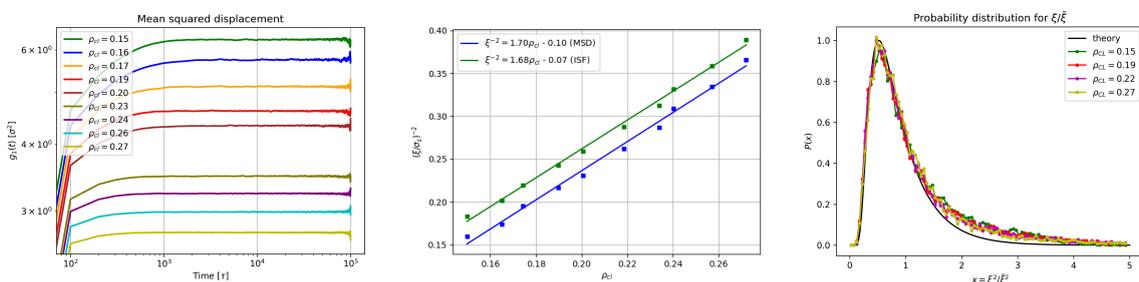
1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

2. Institute for Theoretical Physics, University of Göttingen, 37077 Göttingen, Alemania.

[villaresmatias@gmail.com](mailto:villaresmatias@gmail.com)

**Introducción.** Un parámetro clave en el estudio de redes poliméricas es la longitud de localización, definida como la escala espacial en que un segmento de la cadena polimérica se encuentra localizado y asociada a la distancia media entre los puntos de entrecruzamiento de la red. Estudiamos la dependencia de este parámetro con la densidad de entrecruzamiento por medio de simulaciones de dinámica molecular.

**Resultados.** La longitud de localización fue determinada de dos maneras: (1) a través del desplazamiento cuadrático medio de los segmentos y (2) a través de la función de dispersión intermedia, esto es, la función de correlación de las componentes de Fourier de la densidad de partículas. La teoría de campo medio para redes aleatoriamente entrecruzadas predice: (1) una dependencia inversamente proporcional con la raíz cuadrada de la densidad de entrecruzante y (2) una distribución de probabilidad que puede ser expresada en términos de una función de escala universal con un único máximo bien definido seguido de un decaimiento asintótico.



**Conclusiones.** Los resultados de las simulaciones concuerdan con las predicciones teóricas dando cuenta de un buen acuerdo entre el modelo computacional y la teoría de campo medio.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### CONTROL DE TAMAÑO Y DISPERSIDAD DE NANOPARTÍCULAS DE ORO CON KBR MEDIANTE DEPOSICIÓN ELECTROFORÉTICA

Leandro López,<sup>1</sup> Francisco J. Ibañez,<sup>1</sup> y Martín G. Bellino,<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

<sup>2</sup>Instituto de Nanociencia y Nanotecnología CNEA-CONICET, Av. Gral. Paz, 1499, San Martín, Buenos Aires, B1650, Argentina

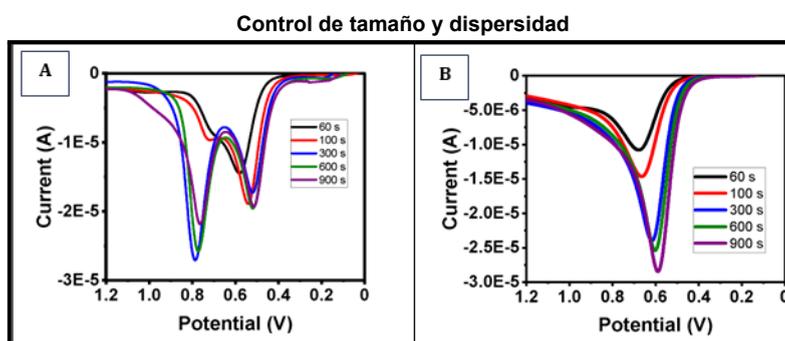
Leandro.lopez@inifta.unlp.edu.ar

#### Introducción

La estabilidad de las nanopartículas es fundamental para mantener su reactividad en su aplicación particular (catálisis, detección, etc.). Los principales procesos que conducen a la inestabilidad de la NP durante las aplicaciones son la disolución, la agregación y la maduración (o el engrosamiento). La maduración es un proceso indeseable que conduce directamente a un aumento del tamaño medio, un aumento de la dispersidad de los NPs y una disminución del número de NPs, lo que resulta en una pérdida de la actividad superficial global de los NPs. (1)

#### Resultados y conclusiones

El control de tamaño y dispersidad de las nanopartículas de oro (sintetizadas modificando la proporción de sal de oro del método desarrollado por Murphy et al (2)), se hizo mediante depósito electroforético sobre electrodo ITO/glass en cinco distintos tiempos: 60, 100, 300, 600 y 900 segundos con potencial de 1V. Estos depósitos fueron caracterizados haciendo uso de la técnica Linear sweep voltammetry (LSV) (1). Los resultados se muestran en la figura 1, donde la figura 1A muestra LSV de Au NPs con tamaños polidisperso, mientras que la figura 1B muestra el control y dispersión con KBr.



#### Referencias

1. Pattadar, D. K., & Zamborini, F. P. The ACS Journal of Surfaces and Colloids, 2019, 35(50), 16416–16426.
2. Jana, N. R., Gearheart, L., & Murphy, C. J. The Journal of Physical Chemistry, 2001, 105(19), 4065–4067.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

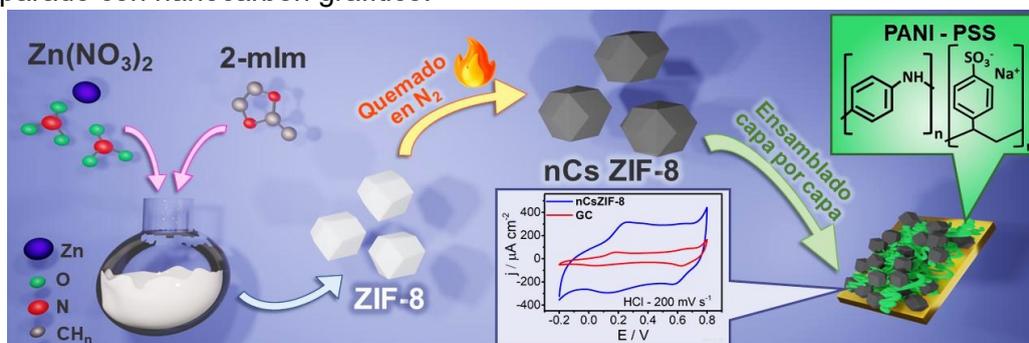
### INTEGRACIÓN SUPRAMOLECULAR DE POLÍMEROS CONDUCTORES Y NANOCARBONES MICRO Y MESOPOROSOS DERIVADOS DE LA PIRÓLISIS DE REDES METAL-ORGÁNICAS PARA APLICACIONES DE ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA

Mártire Ana Paula, Rafti Matías y Marmisollé Waldemar

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.  
[anamartire@quimica.edu.ar](mailto:anamartire@quimica.edu.ar)

Los supercapacitores son dispositivos que almacenan energía usando dos electrodos separados por un electrolito. La capacitancia electroquímica en la doble capa eléctrica aporta a la capacidad del dispositivo, por lo que se busca aplicar nuevos materiales porosos y nanoestructuras en la interfase electrodo-electrolito para mejorar su desempeño. Es posible obtener nanocarbones micro y mesoporosos a partir de la pirólisis de redes metal-orgánicas (MOF). La elevada área superficial de los nanocarbones porosos potencia el almacenamiento de energía en la interfase. Específicamente se estudió al ZIF-8, un MOF basado en  $Zn^{2+}$  y 2-metil-imidazol, que, calcinado en atmósfera de nitrógeno, da lugar a nanocarbones de ZIF-8 (nCsZIF-8). En este trabajo, se modificaron electrodos de oro combinando nCsZIF-8 con polianilina dopada con poliestirenosulfonato de sodio (PANI-PSS) (**Fig.1**). Los nCsZIF-8 se dispersaron en una suspensión coloidal con CTAB para aportar carga positiva, y ambas suspensiones se ensamblaron capa por capa sobre el oro, facilitando la interconectividad eléctrica. Este ensamblado se comparó con otro utilizando nanocarbón de grafito comercial, con menor área superficial, para evaluar el impacto de la porosidad del nCsZIF-8. Los nCsZIF-8 fueron caracterizados por Raman, SEM, adsorción de  $N_2$  y XPS. Se estudió el crecimiento de los ensamblados por UV-visible y QCM. Los ensamblados de hasta 11.5 bicapas fueron evaluados electroquímicamente con voltamperometría cíclica y ciclos de carga y descarga. Los resultados fueron comparados con los obtenidos para carbón grafitico de baja superficie específica (**Fig.1**).

El ZIF-8 se sintetizó con éxito y se obtuvieron los nanocarbones micro y mesoporosos buscados. Se construyeron ensamblados sencillos interconectados eléctricamente. Se logró mejorar la capacidad del sistema con el uso de nCsZIF respecto al ensamblado preparado con nanocarbón grafitico.



**Fig. 1-** Esquema del procedimiento general aplicado. **Gráfico interior:** Voltamperometría cíclica comparando los ensamblados de nanocarbones de ZIF-8 con los preparados con carbón grafitico de menor área superficial.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### EVALUACIÓN CINÉTICA TEÓRICA DE LA REACCIÓN DE $\text{CH}_3\text{SeCH}_3$ CON RADICALES OH. COMPARACIÓN CON SU ANÁLOGO DE AZUFRE

Chacón Gil Claudia, Braco Larisa L. B., Badenes M. Paula

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[claudiachacon@inifta.unlp.edu.ar](mailto:claudiachacon@inifta.unlp.edu.ar)

**Introducción:** Las especies atmosféricas que contienen azufre juegan un papel importante en fenómenos como el calentamiento global, la lluvia ácida y la formación de nubes, lo que hace de gran relevancia su estudio<sup>1</sup>. En el marco de la tesis doctoral, se ha realizado una caracterización teórica de la familia de radicales  $\text{CH}_3\text{SO}_x$  ( $x=1-3$ ), se han estudiado procesos químicos que involucran a los radicales  $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{O}$  y  $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{OO}$ , como también se ha evaluado la reacción de formación del peroxinitrato  $\text{CH}_3\text{SCH}_2\text{OONO}_2$ . La experiencia adquirida en el análisis de las especies mencionadas, y su similitud estructural con especies que presentan selenio nos motiva a la realización de un estudio análogo para estas últimas. Es conocido que la especie atmosférica que contiene selenio de mayor relevancia es el dimetil seleniuro,  $\text{CH}_3\text{SeCH}_3$ <sup>2</sup>. Por este motivo, en esta investigación se realiza un estudio teórico de la termoquímica de la especie  $\text{CH}_3\text{SeCH}_3$  y la cinética de su reacción con radicales OH.

**Resultados:** Con el fin de seleccionar el método más adecuado, se compararon los resultados de varios funcionales híbridos de la densidad con parámetros geométricos y vibracionales experimentales de la especie  $\text{CH}_3\text{SeCH}_3$ . Esto permitió seleccionar el nivel de teoría M06-2X acoplado a la base extendida 6-311++G(3df,3pd). Se conoce que el mismo resulta muy efectivo en estudios termoquímicos, análisis cinéticos y otras múltiples determinaciones. Se estimó la entalpía de formación estándar de la especie  $\text{CH}_3\text{SeCH}_3$  obteniéndose un muy buen acuerdo con el valor experimental disponible en la literatura<sup>3</sup>. Finalmente, se caracterizó la superficie de energía potencial de la reacción entre  $\text{CH}_3\text{SeCH}_3$  y OH con el fin de dilucidar las diferentes vías por las cuales procede, avanzar en el estudio cinético de la misma y determinar tanto las constantes de velocidad de los diferentes canales elementales de reacción como su constante de velocidad global.

**Conclusiones:** En este informe, se determinó un método adecuado para el estudio de especies de Se. Fue estimada la entalpía de formación estándar para  $\text{CH}_3\text{SeCH}_3$ . Por último, en cuanto a la cinética de la reacción  $\text{CH}_3\text{SeCH}_3$  con radicales OH, ha sido determinada una constante de velocidad preliminar a 298 K para el canal de abstracción de átomos de hidrógeno que origina los productos  $\text{CH}_3\text{SeCH}_3$  y  $\text{H}_2\text{O}$ , mientras que se continúa explorando los otros posibles canales.

#### Referencias

- 1) Barnes, I., et al., *Chem. Rev.*, **2006**, 106, 940-975.
- 2) Wang, L., *Chem. Phys.*, **2011**, 382, 98-103.
- 3) Tel'noi, V. I., et al., *Russian Chemical Reviews*, **1995**, 64, 309-316.

# XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

## MADURACIÓN ELECTROQUÍMICA DE OSTWALD: EFECTO DE LA POLIDISPERSIDAD EN LA DISTRIBUCIÓN DE TAMAÑOS

Robledo Candia Leonardo D<sup>1</sup>., Rubert Aldo A. <sup>1</sup> y Fonticelli Mariano H. <sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[robledoleonardo@quimica.unlp.edu.ar](mailto:robledoleonardo@quimica.unlp.edu.ar); [mfonti@inifta.unlp.edu.ar](mailto:mfonti@inifta.unlp.edu.ar); [rubert@quimica.unlp.edu.ar](mailto:rubert@quimica.unlp.edu.ar)

### Introducción

Las nanopartículas metálicas (MNPs) han adquirido gran importancia debido a sus propiedades físicas y químicas. Por ello, comprender cómo tienen curso los procesos de maduración es fundamental para que éstas conserven sus cualidades distintivas. Recientemente hemos desarrollado un modelo basado en cinética electroquímica que permite abordar el problema de la polidispersidad sobre la estabilidad de las MNPs<sup>1</sup>. Hemos demostrado que el potencial redox es un potencial mixto ( $E_{mix}$ ), cuyo valor queda determinado por las contribuciones de todas MNPs de la distribución: las MNPs más pequeñas, cuyo potencial reversible ( $E_{(d)}$ ) es menor que el  $E_{mix}$ , se oxidarán; mientras sobre las de mayor tamaño se depositará material. De este modo, las MNPs grandes crecerán a expensas de las pequeñas, proceso que se conoce como maduración electroquímica de Ostwald.

En este trabajo presentamos simulaciones computacionales con las que estudiamos la maduración de MNPs de Ag polidispersas en condiciones de potencial a circuito abierto (OCP), considerando exclusivamente control por transferencia de carga.

### Resultados y Conclusiones

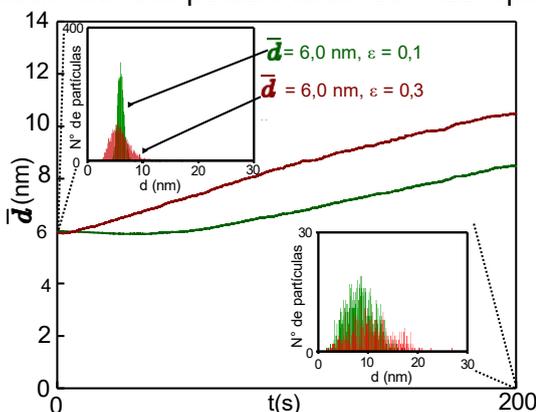
Primero, se simularon conjuntos de MNPs de Ag a partir de funciones de distribución caracterizadas por un diámetro medio ( $\bar{d}$ ) y una desviación estándar ( $\sigma$ ). Luego, se estudió la evolución temporal del diámetro,  $d_k$ , de cada partícula, considerando que la k-ésima partícula, modificará su tamaño en función de su corriente faradaica,  $I_{(d_k)}$ . Utilizamos la ecuación de Butler-Volmer:

$$I_{(d_k)} = I_0 \{ e^{\alpha f (E_{mix} - E_{(d_k)})} - e^{-(1-\alpha) f (E_{mix} - E_{(d_k)})} \}$$

donde  $I_0$ ,  $\alpha$  y  $f$  son la corriente de intercambio, el coeficiente de asimetría y  $f = F/RT$ , respectivamente. Como el  $E_{mix}$  es una cantidad que depende de toda la distribución, las  $I_{(d_k)}$  de las distintas MNPs se encuentran acopladas entre sí. En la **Figura 1** se muestra el comportamiento del  $\bar{d}$  en función del tiempo para dos distribuciones con el mismo tamaño medio inicial, pero diferentes coeficientes de variación ( $\epsilon = \sigma/\bar{d}$ ). Demostrándose que los sistemas con mayor  $\epsilon$  (curva bordó en la Fig.1) evolucionan más rápido. Entonces, como es usual en los procesos de maduración de Ostwald, las diferencias de tamaños pronunciadas resultan en mayores fuerzas impulsoras para la evolución del sistema.

### Referencias

- 1) Robledo Candia, L. *et al.* Electrochim. Acta. 475 (2024) 143546.



**Figura 1.** Representación de la evolución temporal de  $\bar{d}$  para distribuciones con un  $\bar{d}$  inicial de 6 nm y valores de  $\epsilon = \sigma/\bar{d}$  de 0,1 (—) y 0,3 (—).



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA



I N I F T A

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### TRANSISTORES ELECTROQUÍMICOS ORGÁNICOS BASADOS EN PEDOT-PAH PARA LA DETECCIÓN ENZIMÁTICA DE GLUCOSA

Montero Marjorie

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[marjoriemontero@quimica.unlp.edu.ar](mailto:marjoriemontero@quimica.unlp.edu.ar)

Los transistores electroquímicos orgánicos (OECTs, por sus siglas en inglés) son una tecnología ampliamente usada en el desarrollo de biosensores debido a su alta sensibilidad y su biocompatibilidad. El uso de polímeros electroactivos con polielectrolitos integrados como canal semiconductor permite la incorporación de estructuras supramoleculares. En particular, este estudio se enfoca en la integración de la enzima Glucosa oxidasa, a una matriz de PEDOT (polietilendioxitiofeno) combinado con hidrocloreuro de polialilamina para el desarrollo de un dispositivo capaz de detectar glucosa en matrices complejas, como orina diluida. Estas determinaciones resultan relevantes debido a que la presencia de glucosa en orina es un biomarcador del diagnóstico de diabetes.

A partir de los cambios de la corriente drain-source, evaluados al potencial de máxima transconductancia en un sistema de flujo continuo, se determinó que el dispositivo es sensible a la inyección de concentraciones crecientes de glucosa. Este cambio se atribuye principalmente a las variaciones locales de pH debido a la reacción enzimática, en la que se produce ácido glucónico y peróxido de hidrógeno.

La capacidad del sensor de detectar glucosa en matrices complejas se evaluó a partir de pruebas separadas en medios con alta fuerza iónica y soluciones buffer. Finalmente, se verificó la capacidad del sensor para medir en muestras biológicas usando orina enriquecida con glucosa.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### ESTUDIO CONFORMACIONAL DE PEONIDINA, PETUNIDINA Y MALVIDINA: ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE Y ANTIMUTAGÉNICA EN VACÍO Y SOLVENTES

Szewczuk Nicolas A.<sup>1</sup>, Duchowicz Pablo R.<sup>1</sup> y Pomilio Alicia B.<sup>2</sup>.

<sup>1</sup>Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.<sup>2</sup>Laboratorio de Química y Bioquímica Estructural, Departamento de Bioquímica Clínica, Área Hematología, Hospital de Clínicas “José de San Martín”, Universidad de Buenos Aires, Av. Córdoba 2351, C1120AAF Buenos Aires, Argentina.

[nicoszewczuk@gmail.com](mailto:nicoszewczuk@gmail.com)

#### Introducción

Las antocianinas son pigmentos hidrosolubles naturales de frutos, hojas, flores, tallos y tubérculos, pertenecientes a la familia de los flavonoides. Estructuralmente, son O-glicósidos de las antocianidinas (agliconas), siendo sales de flavilio, también llamadas sales de oxonio, representadas por una carga positiva en O-1.

Se realizó un análisis exhaustivo del espacio conformacional de las tres antocianidinas metoxiladas más abundantes en la naturaleza: peonidina, petunidina y malvidina. Estas estructuras se vincularon además con actividades biológicas de interés, como las actividades antioxidantes y antimutagénicas. Se analizaron conformeros planares (P) y no planares (Z) tanto en vacío como en varios solventes, incluyendo ácido acético, metanol y agua, utilizando el nivel teórico B3LYP/6-311++G\*\*.

#### Resultados

Se identificaron treinta y cinco nuevos conformeros para la peonidina, treinta y cuatro para la petunidina, y diecinueve para la malvidina. La correcta caracterización del espacio conformacional de estos compuestos permitió demostrar la coexistencia de estructuras quinoidales cargadas positivamente junto con otras estructuras de resonancia P y Z. Se emplearon cálculos teóricos para analizar los orbitales moleculares de frontera (HOMO-LUMO), lo que resultó fundamental para explicar la reactividad y bioactividad de estas tres antocianidinas. La polaridad del solvente, la incorporación de grupos donores en el anillo B, y la contribución porcentual de los conformeros P y Z dentro del espacio conformacional influyeron en la actividad antioxidante de estos compuestos.

#### Conclusiones

Las contribuciones porcentuales de átomos al HOMO resultaron apropiadas para demostrar la actividad antimutagénica como inhibidores enzimáticos, así como los requerimientos estéricos y electrostáticos necesarios para formar el farmacóforo. De las tres, la peonidina se destacó como la antocianidina con mayor actividad antioxidante, mientras que la malvidina mostró ser la más eficaz en términos de actividad antimutagénica.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### PELÍCULAS DE AGREGADOS AMILOIDES DE SEROALBÚMINA BOVINA SOBRE PVC: UNA ESTRATEGIA ANTIBIOFILM

Calibio Ivon, Schilardi Patricia y Diaz Carolina.

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[ivoncgiraldo@inifta.unlp.edu.ar](mailto:ivoncgiraldo@inifta.unlp.edu.ar)

El creciente problema de la resistencia a los antimicrobianos y las infecciones asociadas al cuidado de la salud son una preocupación mundial que desafía a los científicos a proporcionar soluciones para combatir las infecciones bacterianas (1). El diseño de modificaciones superficiales de biomateriales ofrece un nuevo enfoque para evitar o disminuir la adhesión bacteriana y, al mismo tiempo, mejorar el efecto de los antibióticos, limitando así la formación de biofilms (2). La seroalbúmina bovina (BSA) es la proteína más común que se encuentra en la sangre, por lo que es un compuesto natural fácil de obtener y económico para desarrollar materiales biocompatibles. Por otro lado, las nanopartículas de plata (AgNPs) poseen una fuerte efectividad bactericida y ofrecen una mejor protección contra la resistencia microbiana.

En este trabajo, hemos utilizado BSA para preparar agregados tipo amiloide que luego se usaron para fabricar recubrimientos híbridos, que contienen AgNPs, sobre cloruro de polivinilo (PVC) y vidrio. El recubrimiento ha demostrado ser estable bajo diferentes condiciones y tener una alta capacidad anti-biofilm. Se ha diseñado un recubrimiento proteico a partir de agregados tipo amiloide mediante la reducción de los puentes disulfuro de la BSA, utilizando el agente reductor ditioneitol (DTT), a pH 7.4 y 37°C. La formación de los agregados se puso en evidencia mediante técnicas de caracterización tales como espectroscopía UV-visible y FTIR. Asimismo, las películas formadas sobre PVC fueron evidenciadas mediante la tinción con Rojo Congo, microscopía de fuerza atómica (AFM) y microscopía confocal, en este caso utilizando la emisión de fluorescencia de los agregados al ser tratados con tioflavina T. Se analizó la estabilidad de las películas, tanto mecánica como en medio acuoso. Los ensayos antimicrobianos preliminares indican que los recubrimientos de agregados amiloides inhiben la adhesión bacteriana, incrementando el efecto antibiótico de la vancomicina frente a *Staphylococcus aureus* (bacteria Gram positiva). Sin embargo, la incorporación de nanopartículas de plata no potenció el efecto antimicrobiano. Los ensayos de biocompatibilidad con células HeLa demostraron que el recubrimiento no afectó la viabilidad celular ni promovió una adhesión celular excesiva. Finalmente, el recubrimiento basado en fibras amiloides presenta una combinación prometedora de estabilidad mecánica, capacidad antimicrobiana y biocompatibilidad, lo que sugiere su potencial aplicación en dispositivos médicos como tubos endotraqueales y cánulas, con el fin de prevenir infecciones en entornos hospitalarios.

#### Referencias

- 1) Muluneh, A.; Azanaw, A. *Infect. Drug Resist.*, **2022**, **15**, 5061-5068.
- 2) Tian, J.; Liu, Y.; Miao, S.; Yang, Q.; Hu, X.; Han, Q.; ...; Yang, P. *Biomater. Sci.*, **2020**, **8**, 6903-6911.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### ESTUDIO TEÓRICO DE REACCIONES DE ALCANOS CÍCLICOS RELEVANTES EN PROCESOS DE COMBUSTIÓN, QUÍMICA ATMOSFÉRICA Y ASTROQUÍMICA

Monascal Yeljair y Badenes María Paula

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[yemonascal@inifta.unlp.edu.ar](mailto:yemonascal@inifta.unlp.edu.ar)

**Introducción.** Las reacciones en fase gaseosa son esenciales en numerosos procesos, que van desde la combustión hasta la química atmosférica e interestelar. En esta tesis doctoral se lleva a cabo una investigación teórica sobre los mecanismos por los cuales transcurren reacciones químicas en las que participan alcanos cíclicos de interés ambiental. En esta presentación, se detallan los resultados obtenidos mediante métodos *ab initio* y DFT sobre las reacciones de algunos de estos compuestos con radicales relevantes en la atmósfera terrestre y en entornos astroquímicos, como lo son los radicales OH y CN, respectivamente. Aunque se conocen varios estudios sobre la oxidación del ciclopropano por el radical OH, no se dispone de mucha información respecto de la reactividad de este radical con ciclopropanos sustituidos [1]. Por ello, en primer lugar, se examinan las reacciones de ciclopropanos con grupos halocarbonados frente al radical OH. En segundo lugar, se exploran las interacciones entre el ciclopropano y el radical CN. Si bien el ciclopropano no es detectable en observaciones astronómicas milimétricas, existe evidencia reciente de su formación en análogos de hielo interestelar [2], lo que motiva el análisis de posibles productos de reacción que puedan identificarse mediante técnicas de radioastronomía.

**Resultados.** Las barreras de energía determinadas para las reacciones  $c\text{-C}_3\text{H}_5\text{R} + \text{OH}$  ( $\text{R} = \text{CH}_2\text{F}, \text{CHF}_2, \text{CF}_3$ ) indican que la abstracción de átomos de H es más favorable en comparación con las vías de adición. Se estima que la vida media de estos sustratos en la atmósfera es  $< 20$  días. Por otro lado, la superficie de energía potencial encontrada para el sistema  $c\text{-C}_3\text{H}_6 + \text{CN}$  reveló una vía de reacción con barreras sumergidas que conduce a la formación de  $c\text{-C}_3\text{H}_5\text{CN}$ . Se prevé estudiar la cinética de este canal en etapas posteriores. Otros mecanismos analizados presentan barreras altas, lo que sugiere que son poco factibles en regiones frías del medio interestelar.

**Conclusiones.** Los cálculos teóricos permitieron derivar las constantes de velocidad para distintas vías de reacción de ciclopropanos halocarbonados con el radical OH. Además, se halló un mecanismo de formación de  $c\text{-C}_3\text{H}_5\text{CN}$  a partir de  $c\text{-C}_3\text{H}_6$  y CN, el cual es exotérmico en  $\sim 20 \text{ kcal mol}^{-1}$  y procede a través de barreras sumergidas.

#### Referencias

- 1) Louis, F., *Int. J. Chem. Kinet.*, **2015**, 47, 232-245.
- 2) Abplanalp, M.J., Góbi, S., Kaiser, R.I., *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2019**, 21, 5378-5393.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### NANOCANALES ELECTROQUÍMICAMENTE ACTIVOS: MODULACIÓN REDOX DEL TRANSPORTE IÓNICO Y SENSADO AMPLIFICADO

Matelo Ignacio Tomás, Marmisollé Waldemar y Azzaroni Omar

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[tomasmatelo@quimica.unlp.edu.ar](mailto:tomasmatelo@quimica.unlp.edu.ar)

El transporte iónico a través de nanocanales depende de las características fisicoquímicas de la superficie del canal. La carga superficial y el tamaño del canal son parámetros que modulan el flujo de iones y, por lo tanto, la corriente transmembrana. La selectividad y asimetría del transporte puede ser modulado, entonces, a partir de la funcionalización de las paredes del nanocanal.

Se ha probado que es posible la regulación eficiente del transporte utilizando el potencial de membrana como variable mediante la integración de polímeros conductores como el poli(3,4,-etilendioxitiofeno) (PEDOT).<sup>1</sup> A su vez, la integración de polielectrolitos en las películas de PEDOT es una estrategia que permite ampliar las posibilidades de funcionalización química sin comprometer la conductividad.

Por otro lado, los polímeros molecularmente impresos (MIPs) son materiales sintetizados química o electroquímicamente en presencia de una molécula de interés (*target*), que luego es removida, dejando “huecos” con afinidad para esta molécula. De esta manera, el material es capaz de unir eficaz y selectivamente al *target* en comparación con moléculas diferentes. En la integración de estos materiales a un nanocanal, si el *target* (analito) tiene una carga neta, su unión a la cavidad del MIP debería generar una variación en la densidad de carga del polímero, fenómeno susceptible de ser evidenciado con la respuesta iontrónica.

En esta tesis se propone continuar explorando la integración de materiales poliméricos conductores basados en PEDOT y otros polímeros electroactivos con dos propósitos principales: por un lado, desarrollar dispositivos en los que el transporte iónico pueda ser modulado y regulado con el potencial de la membrana; y, por el otro, desarrollar sensores de analitos basados en la integración de polímeros molecularmente impresos.

#### Referencias

1. Pérez-Mitta, G., Marmisollé, W. A., Trautmann, C., Toimil-Molares, M. E. & Azzaroni, O. *Advanced Materials* **29**, (2017).

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### ESTUDIO DE LA FOTOQUÍMICA DE VANILLIN POR RADIACIÓN UV-A DIRECTA E INDIRECTA POR PROCESOS FOTSENSIBILIZADOS CON PTERINA

Fernandez Heryerli, Lorente Carolina

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[heryerli@inifta.unlp.edu.ar](mailto:heryerli@inifta.unlp.edu.ar)

**Introducción:** La radiación solar, principalmente la radiación UV produce un incremento dramático en la producción de especies reactivas de oxígeno (EROs) a través de dos vías: (i) directa, que se inicia con la absorción de fotones por los cromóforos de las biomoléculas, o (ii) indirecta, en donde un segundo compuesto denominado fotosensibilizador (FS) absorbe la radiación y se vuelve reactivo <sup>[1]</sup>. La radiación UVA y UVB pueden generar EROs en la piel, que promueven el fotoenvejecimiento y diferentes patologías, que pueden conllevar a la formación de cáncer <sup>[2]</sup>. Los compuestos antioxidantes (AOs), están presentes en los organismos y son responsables de controlar el daño oxidativo mediante la desactivación de especies reactivas de oxígeno (EROs). No obstante, al exponerse a factores externos como la radiación UV se produce un incremento en la concentración de EROs, en donde los AOs presentes en el organismo no son suficientes para prevenir el daño <sup>[3]</sup>, y es por ello que se emplean suplementos alimenticios o farmacéuticos de AOs exógenos. Sin embargo, resulta un desafío encontrar compuestos que eviten o prevengan los daños oxidativos causados por factores externos como la radiación UV, ya que además de tener capacidad antioxidante deben presentar estabilidad térmica, fotoquímica y no deben ser fototóxicos. Un compuesto ampliamente usado en industrias alimenticias, farmacéuticas y cosméticas es 4-hidroxi-3-metoxibenzaldehído, conocido como vanillin (VAN), un polifenol proveniente de las vainas maduras de la orquídea *Vanilla planifolia* con propiedades antioxidantes reportadas <sup>[4]</sup>. Sin embargo, se conoce muy poco acerca de la estabilidad de VAN al exponerse a la radiación UV.

**Resultados y Conclusiones:** En el presente trabajo se evaluó la fotoquímica de VAN en soluciones acuosas (pH = 5.5 – 6) con radiación UV-A directa ( $\lambda = 365$  nm) en ausencia y presencia de un FS. Los resultados obtenidos evidencian que, en ausencia de un FS, VAN no se degrada, pero en presencia de un FS (Pterina, Ptr), VAN se consume generando como producto de oxidación 6,6-dihidroxi-5,5-dimetoxi-[1,1-bifenil]-3,3-dicarboxaldehído. Se determinó mediante cálculos teóricos la factibilidad termodinámica de las reacciones fotoquímicas de VAN, observando que el cambio de energía libre en la transferencia de un electrón de VAN al estado triplete de Ptr (<sup>3</sup>Ptr\*) tiene un valor de -109 kJ/mol, evidenciando que <sup>3</sup>Ptr\* son responsables de la degradación de VAN.

#### Referencias

- [1] Baier J., et al., *J. Invest. Dermatol.* **2007**; 127(6): 1498-1506.
- [2] Kammeyer A., et al., *Ageing. Res. Rev.* **2015**; 21: 16-29.
- [3] MacDonald-Wicks LK., et al., *J. Sci. Food Agri.*, **2006**; 86:2046-2056.
- [4] Arya, S.S., et al., *Adv. Tradit. Med.* **2021**, 21, 1-17.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### ESTUDIO TEÓRICO DE LA OZONÓLISIS DE HALOPROPENOS: FORMACIÓN DE INTERMEDIARIOS DE CRIGEEE HALOGENADOS Y DESTINO EN LA ATMÓSFERA

Villarreal, Valentín, Bracco, Larisa L. B. y Tucceri, María E.

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.  
[vvillarreal@inifta.unlp.edu.ar](mailto:vvillarreal@inifta.unlp.edu.ar)

#### Introducción

Los halopropenos son una familia de COVHs (compuestos orgánicos volátiles halogenados) cuya emisión en la atmósfera juega un rol importante tanto en la capacidad oxidativa de la atmósfera como en la formación de aerosoles [1]. Una de sus principales vías de degradación es la reacción con ozono, conocida como ozonólisis, la cual produce intermediarios muy reactivos llamados Intermediarios de Criegee (IC). Es sabido que los IC pueden estabilizarse y reaccionar con especies atmosféricas que contribuyen a la formación de material particulado y afectan la calidad del aire. Debido a la escasa información experimental disponible sobre este proceso, se realizó un estudio teórico detallado de la ozonólisis de 3-cloropropeno y 3-bromopropeno con el fin de caracterizar por primera vez los IC halogenados resultantes y sus principales destinos en la atmósfera.

#### Resultados

Se empleó el nivel de teoría BMK/6-311++g(3df,3pd) para la caracterización de los puntos estacionarios de la superficie de energía potencial (SEP), y el nivel G4//BMK/6-311++g(3df,3pd) para una mejor estimación de la energética de las reacciones investigadas. Con esta información se calcularon las correspondientes constantes de velocidad ( $k$ ) aplicando la versión canónica de la teoría del estado de transición (CTST). Los valores obtenidos fueron (en  $\text{cm}^3 \text{molecula}^{-1} \text{s}^{-1}$ ):  $k=1.97 \times 10^{-18}$  y  $k=2.48 \times 10^{-18}$  para las ozonólisis de 3-cloropropeno y 3-bromopropeno, respectivamente. Estos resultados se encuentran en excelente acuerdo con los reportados experimentalmente [2,3]. Utilizando los mismos niveles de teoría, se caracterizaron todos los IC halogenados provenientes de las ozonólisis, donde se encontraron un total de ocho confórmeros, siendo los intermediarios syn- $\text{CH}_2\text{X(H)COO}$  y anti- $\text{CH}_2\text{X(H)COO}$  ( $\text{X}=\text{Cl}, \text{Br}$ ), los más estables.

#### Conclusiones

En este trabajo se realizó por primera vez el estudio mecanístico y cinético teórico de las reacciones de ozonólisis del 3-cloropropeno y 3-bromopropeno. Se caracterizaron todos los posibles intermediarios de Criegee halogenados resultantes. Y se investigó la cinética de las principales vías de reacción de los IC más estables en la atmósfera.

#### Referencias

- 1) Schechner, M., Guenther, A., Rhew, R., Wishkerman, A., Li, Q., Blake, D., Lerner, G., Tas, E. *Atmos. Chem. Phys.*, **2019**, 19, 7667-7690.
- 2) Avzianova, E. V., & Ariya, P. A., *International journal of chemical kinetics*, **2002**, 34, 678-684.
- 3) Gai Y., Ge M., Wang W., *Atmospheric Environment*, **2009**, 43, 3467-3471.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

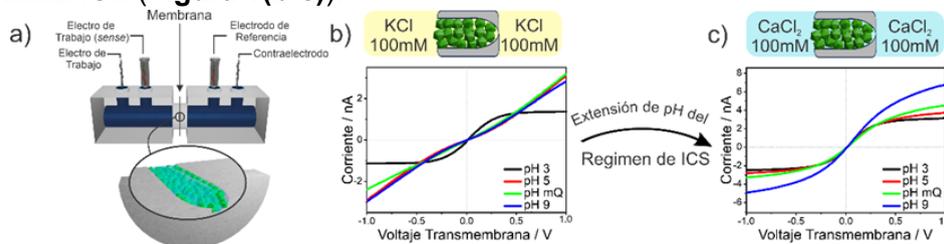
### MODULACIÓN DE LA SATURACIÓN DE LA CORRIENTE IÓNICA EN NANOCANALES DE ESTADO SÓLIDO (SSNs) MODIFICADOS CON REDES METAL-ORGÁNICAS (MOFs)

Angel Luciano Huamani, Matias Rafti, Waldemar A. Marmisollé y Omar Azzaroni  
Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[huamani.luciano@quimica.unlp.edu.ar](mailto:huamani.luciano@quimica.unlp.edu.ar)

**Introducción:** El transporte iónico a través de membranas es esencial en aplicaciones como la generación de energía, la separación de iones y el desarrollo de biosensores nanofluídicos (Arreglo experimental mostrado en **Fig. 1(a)**).<sup>1</sup> Este proceso puede manifestarse en diferentes comportamientos: el transporte óhmico, donde la corriente es proporcional al voltaje en ambas direcciones; la rectificación de corriente, que permite un flujo preferencial de iones en una dirección; y la saturación de corriente iónica (ICS), en la que la corriente alcanza un valor máximo constante a partir de cierto voltaje.

**Resultados:** El MOF UiO-66 fue confinado dentro de nanocanales con forma de bala en membranas de PET irradiadas por iones de alta energía. Investigaciones recientes han revelado que la aparición de ICS en este sistema es resultado de una combinación de factores específicos e inusual en geometrías de tipo bala,<sup>2</sup> lo que resalta la importancia de poder modular su respuesta. En este contexto, el uso de  $\text{CaCl}_2$  como electrolito soporte permitió extender el rango de pH en el que se observa la respuesta ICS (**Figura 1(b-c)**).



**Figura 1.** a) Arreglo experimental para las medidas de transporte. Respuesta de las membranas modificadas con MOF usando b)  $\text{KCl}$ - c)  $\text{CaCl}_2$ - como electrolito soporte.

Se identificó la porosidad construccional, definida como los caminos formados en el MOF entre los frentes de coalescencia de los cristales en crecimiento, como un factor clave en el sistema. Esta porosidad no sólo facilita la aparición de rutas de menor energía para el transporte de iones divalentes como  $\text{Ca}^{2+}$ , sino que también proporciona sitios de unión *-binding-* para estos iones. La presencia de los iones  $\text{Ca}^{2+}$  en la red fue confirmada mediante técnicas como FTIR, TGA e isothermas de adsorción de  $\text{CO}_2$ .

**Conclusiones:** Fue posible modular la respuesta de estos canales sintéticos análogos a los canales biológicos a través del gating mediado por iones con relevancia biológica como  $\text{Ca}^{+2}$ , lo cual abre nuevas posibilidades en el desarrollo de dispositivos nanofluídicos.

#### Referencias

- 1) K. Xiao, *Small*, **2016**, 12, 2810–2831.
- 2) G. Laucirica, *Adv. Mater.*, **2022**, 34, 2207339.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### UN ESTUDIO DFT SOBRE LA ADSORCIÓN Y DISOCIACIÓN DE N-NITROSODIMETILAMINA SOBRE UN NANOCLUSTER DE Ni<sub>8</sub>

Moreno Yalet Nahuel, Ranea Víctor y Dammig Quiña Pablo

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[nahuel.morenoyalet@ing.unlp.edu.ar](mailto:nahuel.morenoyalet@ing.unlp.edu.ar)

**Introducción.** La N-nitrosodimetilamina (NDMA, ONN(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>) es un carcinógeno muy potente investigado por las autoridades sanitarias de algunos países. Dicho compuesto aparece principalmente como subproducto en el tratamiento de aguas residuales [1]. En este trabajo se aplica la teoría funcional de la densidad (DFT) para estudiar la adsorción molecular y disociativa de NDMA en un nanocluster de Ni<sub>8</sub>.

**Resultados.** Se realizaron cálculos de energía total utilizando la teoría del funcional de la densidad (DFT) con el funcional Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Los resultados revelan que la adsorción molecular de NDMA sobre Ni<sub>8</sub> es dos veces más fuerte que la adsorción molecular de NDMA sobre una superficie de Ni{111} (-1.625 eV vs -0.8 eV) [2][3]. A su vez, la adsorción disociativa de NDMA es 1 eV más estable (-2.653 eV) que la adsorción molecular sobre Ni<sub>8</sub>. Para disociar la molécula de NDMA en fragmentos O y NN(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, se necesita una energía de activación de 0,954 y 0,810 eV a partir de las dos configuraciones moleculares más estables encontradas. Sin embargo, para disociar la molécula de NDMA en fragmentos ON y N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>, se necesita una energía de activación menor, 0,654 eV. Con la inclusión de las fuerzas de dispersión de London (funcional optB88-dW), las interacciones moleculares son un poco más fuertes (-1.821 eV y -2.686 eV para la adsorción molecular y disociativa respectivamente). Sin embargo, las energías de activación son ligeramente menores. También aplicando el funcional SCAN Meta-GGA se obtuvieron energías de adsorción -2.092 eV y -2.799 eV para la adsorción molecular y disociativa respectivamente. La inclusión del modelo de "implicit solvation" muestra una interacción más débil de NDMA con el nanocluster de Ni<sub>8</sub>. La adsorción disociativa es más estable que la adsorción molecular, pero la diferencia de energía es un poco menor, 0,850 eV.[3]

**Conclusiones.** Los resultados actuales muestran que los nanoclusters de Ni<sub>8</sub> son catalizadores prometedores para la eliminación de NDMA del agua. Cabe señalar que el nanocluster Ni<sub>8</sub> muestra un momento magnético. Dicha característica podría usarse para separar y eliminar el nanocluster de Ni<sub>8</sub> del agua con la molécula de NDMA adsorbida en él en forma molecular o disociativa.

#### Referencias

- 1) Elif Pehlivanoglu-Mantas. *Water Research*, **2006**, 40(2):341–347,.
- 2) Ranea V. A., *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, **2014**, 392, 157-163.
- 3) Moreno Yalet N., *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, **2023**, 108578

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### ESTUDIO ELECTROQUÍMICO Y CARACTERIZACIÓN DE PELÍCULAS DE MAGNETITA

Rivera Juan Pablo<sup>1</sup>, Grumelli Doris Eida<sup>1</sup> y Álvaro Tesio<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

<sup>2</sup> CIDMEJu-UNJu-CONICET. Palpalá, Jujuy

[riverajuanp13@gmail.com](mailto:riverajuanp13@gmail.com)

#### Introducción

En esta edición de las jornadas, presentaré la preparación y caracterización de películas de magnetita ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ). Más precisamente, comenzaré mostrando el proceso de electrodeposición de las películas sobre sustratos conductores, adaptado desde el trabajo de Switzer y cols.<sup>1</sup> junto con su caracterización. Luego, voy a mostrar el estudio de la electroquímica fundamental de la reacción del  $\text{O}_2$  en medios apróticos, empleando a  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  como electrodo. Por último, comentaré las conclusiones que se desprenden de estos resultados, junto con el trabajo a realizar a futuro.

#### Resultados

Las películas fueron caracterizadas a través de: difracción de rayos X (DRX), perfilometría, espectroscopía Mossbauer y microscopía electrónica de barrido (SEM) y técnicas electroquímicas. A partir del patrón de DRX, se infiere que el óxido de hierro crecido es  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ , policristalino y no orientado; además, no hay co-deposición de otras especies. La espectroscopía Mossbauer permitió corroborar la identidad del óxido. Las medidas de perfilometría arrojaron espesores en el orden de los micrones, con variabilidades grandes, incluso para un mismo tiempo de deposición. Por último, las imágenes SEM muestran a los cristales cubriendo toda la superficie, interpenetrados, formando una película rugosa.

Posteriormente, se realizaron experimentos de voltametría cíclica (CV) utilizando a  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  como electrodo de trabajo, en medios no acuosos (solutos:  $\text{TEABF}_4$  y  $\text{TBAPF}_6$ , solventes: acetonitrilo (ACN) y dimetilsulfóxido (DMSO) y bajo saturación de  $\text{O}_2$ . Se pudo observar en todos ellos la presencia de zonas de reducción y oxidación debidas al  $\text{O}_2$ . Adicionalmente, se realizaron CVs a diferentes velocidades de barrido, con el objetivo de hallar el número de electrones intercambiados ( $n$ ) en la reducción del  $\text{O}_2$ , dando como resultado  $n \sim 1$ . Por último, complementando lo anterior, se hicieron experimentos con electrodo de disco rotatorio (RDE), en una solución de  $\text{TEABF}_4$ -DMSO, obteniéndose por análisis de los datos según la ecuación de Koutecky-Levich, un valor de  $n \sim 1$  para la reducción del  $\text{O}_2$ , sobre la superficie de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$ .

#### Conclusiones

A partir de los resultados, se puede concluir que: i) el método de electrodeposición genera películas de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  policristalinas, en el orden de los micrómetros; ii) en medios apróticos, la superficie de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  es capaz de reducir al  $\text{O}_2$ , con  $n=1$ .

#### Referencias

- 1) Switzer, J., A. *Chem. Mater.* **2009**, 21, 5022–5031.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### INFLUENCIA DEL AGUA EN LA FLUORESCENCIA Y TAMAÑOS DE AGREGACIÓN DE UN RESORCINARENO EN SOLUCIONES DE THF/H<sub>2</sub>O

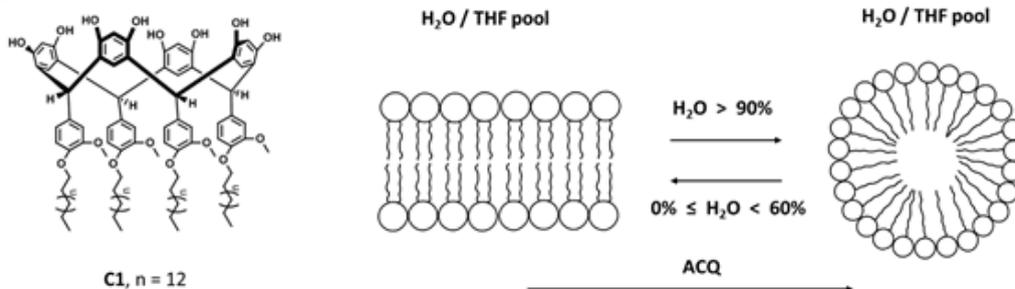
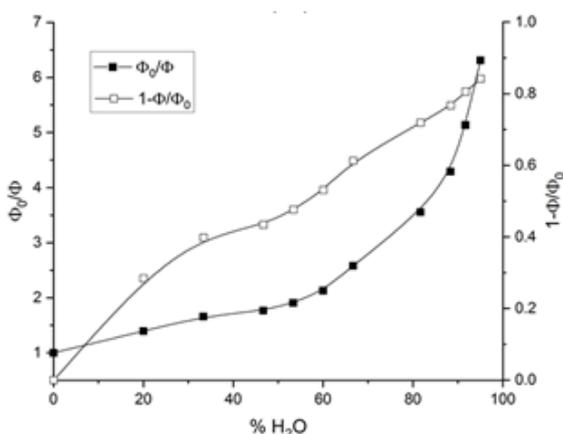
Sosa María Virginia<sup>1</sup>, Prieto Eduardo D.<sup>1,2</sup> y Wolcan Ezequiel<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Fac. Ciencias Exactas (UNLP-CONICET). <sup>2</sup> Departamento de Cs. Biológicas, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP), Instituto Ciencias de la Salud, Universidad Nacional Arturo Jauretche (UNAJ) [mvs@gmail.com](mailto:mvs@gmail.com)

**Introducción:** Los resorcinarenos son bloques macrocíclicos que consisten de anillos aromáticos derivados del resorcinol conectados por puentes de carbono y, debido a su relativa flexibilidad, dos o más conformaciones pueden convivir en equilibrio.<sup>1</sup> Este trabajo estudia cómo el agregado de H<sub>2</sub>O a soluciones de THF modula el comportamiento de autoensamblaje y fluorescencia de un resorcinareno, **C1**.

**Resultados:** Mediante medidas de AFM y DLS se observa la formación de ensamblados grandes de **C1** en THF puro. La adición de H<sub>2</sub>O desencadena una transición a grupos más pequeños. A través de medidas de emisión se evidencia el quenching de la fluorescencia al agregar agua a las soluciones de **C1** en THF, lo que se atribuye a una desactivación no radiativa.

**Conclusiones:** Se demostró una transformación mediada por el agua donde **C1** pasa de formar agregados grandes en THF a grupos más pequeños y bien definidos a medida que aumenta la concentración de H<sub>2</sub>O. Este control preciso sobre el autoensamblaje de **C1** está acompañado por un fenómeno conocido como quenching inducido por agregación (ACQ) que modula de manera efectiva la intensidad de fluorescencia de **C1**.



#### Referencias

- 1) Hogberg A. G. S., *JOC*, 2002, **45**, 4498-4500.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### CONTROL DE LAS PROPIEDADES OPTOELECTRÓNICAS DE GRAFENO E HÍBRIDOS PARA BIO-APLICACIONES

Ventre Josefina, Bellino Martin y Ibañez Francisco.

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[josefina.ventre@ing.unlp.edu.ar](mailto:josefina.ventre@ing.unlp.edu.ar)

#### Introducción

Durante los últimos años, la investigación sobre nanomateriales híbridos basados en grafeno se intensificó debido a que presentan propiedades ópticas, electrónicas y catalíticas sobresalientes. Se ha reportado que el ensamble de materiales basados en Au y C mejora sus propiedades para aplicaciones relacionadas con la optoelectrónica, los bio-sensores o el sensado de moléculas como, por ej., glucosa, entre otras [1–2].

#### Resultados y conclusiones

La mezcla de  $\text{HAuCl}_4$  con puntos cuánticos de grafeno (GQDs) a temperatura ambiente y pH 6-7 conlleva a la formación espontánea de Nanohíbridos (NHs) de tipo core-shell. El producto obtenido fue caracterizado por microscopía de transmisión de alta resolución (HRTEM) donde se observaron nanopartículas de Au recubiertas por un cascarón de grafeno de 1 nm (3-4 capas), con un tamaño medio de 8.6 nm, monodispersas y sin aglomeraciones. La composición química del núcleo y la coraza fue determinada a través de espectroscopía de pérdida de energía de electrones (EELS). También se realizaron caracterizaciones de sus propiedades ópticas por espectroscopía UV-vis, donde se observó la presencia de la resonancia plasmónica superficial típica de nanopartículas de Au alrededor de 520 nm y las transiciones características  $\pi$ - $\pi^*$  de los GQDs. Para confirmar el rol de los GQDs en la síntesis, se bloquearon los grupos funcionales carbonilos y epóxidos bajando el pH entre 1 y 3, con lo cual no se observó la formación de NHs. Además, se estudiaron diferentes condiciones experimentales modificando temperatura, tiempo de reacción y relación entre concentraciones de  $\text{Au}^{+3}$  y GQDs para la obtención de NHs Au/grafeno, estables, de diferentes tamaños y geometrías. También se realizaron experimentos electroquímicos con moléculas patrón a fin determinar el rol del grafeno situado en la coraza de las NPs como agente protector y/o catalítico. Para un mejor estudio de las propiedades superficiales del sistema, se comenzó con el estudio de un modelo simple de estos NHs: una superficie de Au(111) con grafeno pristino y monocapa superpuesto, formando una superred  $(3 \times 3)$ -R $30^\circ$ , es decir, el grafeno rotado  $30^\circ$  respecto a la superficie de Au (111) con una periodicidad de  $(3 \times 3)$ , geometría que ha sido demostrada en un trabajo previo, tener el menor parámetro de discrepancia de la celda cristalina.[3] Una vez optimizada esta estructura, se procedió a adsorber una molécula de interés y realizar varios tipos de cálculos electrónicos como: densidad de estados, mapas de densidad de carga y función trabajo, así como también las energías de adsorción.

#### Referencias

- 1) Ruiyi et al. *Sens. Actuators B Chem.* **2015**, 208, 421–428.
- 2) Luo et al. *Chem. Phys. Lett.* **2015**, 641, 29–32.
- 3) Yortanlı et al. *J. Chem. Phys.* **2019**, 151(21), 214701

# XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

## ESTUDIO DEL SUEÑO USANDO INTELIGENCIA ARTIFICIAL

Tenti Juan Martín<sup>1</sup>, Arlego Marcelo<sup>2</sup> y Bab Marisa<sup>3</sup>.

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET  
[jmtenti@fisica.unlp.edu.ar](mailto:jmtenti@fisica.unlp.edu.ar), [arlego@fisica.unlp.edu.ar](mailto:arlego@fisica.unlp.edu.ar), [marisabab@gmail.com](mailto:marisabab@gmail.com)

**Resumen.** Exploramos los estados de vigilia y sueño mediante el análisis de la actividad electroencefalográfica intracraneal en humanos (iEEG). Utilizamos medidas espectrales y de escala derivadas de iEEG como características para el análisis de redes neuronales, descubriendo patrones intrincados de sueño-vigilia dentro del espacio latente de baja dimensión de los codificadores automáticos variacionales

**Introducción,** El estudio de la actividad electroencefalográfica (EEG) humana durante los estados de vigilia y sueño ha avanzado significativamente [1]. A pesar de este progreso, la investigación sobre EEG intracraneal (iEEG) sigue siendo limitada debido a la escasez de datos, generalmente disponibles sólo de pacientes con afecciones específicas como la epilepsia. Nuestro trabajo aborda esta brecha integrando el análisis espectral y el análisis de fluctuación sin tendencia (DFA) con técnicas innovadoras de aprendizaje automático para investigar la actividad iEEG normal durante los estados de vigilia y sueño. Utilizamos estas medidas espectrales y de escala como entradas para redes neuronales, incluida la exploración de espacios latentes de baja dimensión a través de codificadores automáticos variacionales, para describir los estados de vigilia y sueño [2]. Los métodos espectrales son fundamentales para caracterizar los componentes de frecuencia de las señales EEG e iEEG, lo que ayuda a distinguir entre diferentes etapas del sueño [3, 4].

- Además, DFA se ha utilizado eficazmente para estudiar correlaciones temporales en señales neuronales, lo que ha demostrado ser valioso en diversos entornos clínicos y de investigación [5, 6].

- Por otro lado, los avances en inteligencia artificial enriquecen aún más este campo, como lo demuestran estudios recientes sobre **detección de convulsiones, clasificación de movimientos y estadificación del sueño utilizando enfoques de aprendizaje automático sobre datos iEEG [7-11].**

### Referencias

- 1) Komatsue, L., *J. Chem. Eng. Japan*, **1977**, 10, 200-205.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### COMPATIBILIZACIÓN DE UN POLÍMERO SINTÉTICO CATIONICO Y ALGINATO DE SODIO COMO BIOPOLÍMERO ANIÓNICO

Sanchez Dova, Anaclara<sup>1</sup>; Fernandez, Juan Manuel<sup>2</sup>; Oberti, Tamara<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

<sup>2</sup> LIOMM, UNLP, CONICET.

[sanchezanaclara@inifta.unlp.edu.ar](mailto:sanchezanaclara@inifta.unlp.edu.ar), [jmfernandez@biol.unlp.edu.ar](mailto:jmfernandez@biol.unlp.edu.ar), [toberti@inifta.unlp.edu.ar](mailto:toberti@inifta.unlp.edu.ar)

#### Introducción

Los polímeros naturales, aunque biocompatibles, tienen limitaciones en sus propiedades mecánicas y su alta tasa de degradación. Así, su combinación con polímeros sintéticos es una estrategia muy utilizada para superar estas debilidades. La combinación puede generar incompatibilidad entre polímeros, resultando en un producto con microfases, un problema que puede evitarse empleando ultrasonido para mejorar la calidad de las mezclas.

En este trabajo se diseñó un material compatibilizado por ultrasonido, aprovechando la interacción electrostática entre un polímero natural, el alginato de sodio (AlgNa), como polielectrolito aniónico (PEA) y un polímero sintético obtenido en el laboratorio como polielectrolito cationico (PEC).

#### Resultados

El polímero sintético se obtuvo mediante polimerización radicalaria de distintas relaciones de DMAEMA y AV. Dos de los copolímeros obtenidos con fracciones contrastantes de DMAEMA fueron seleccionados para compatibilizar con AlgNa mediante ultrasonido: DM90AV y DM10AV. Los materiales resultantes fueron caracterizados utilizando por FTIR, donde se encontró un corrimiento en las señales que podría ser un indicio de la interacción entre los componentes.

Finalmente, se realizó un ensayo de *swelling* en el que DM90AV-AlgNa aumentó su %Sw con el tiempo, mientras que DM10AV-AlgNa experimentó degradación.

Con estas mismas muestras se realizaron pruebas biológicas con células Raw 264.7: la evaluación de NO como medida de la proliferación celular y el ensayo de MTT para evaluar la actividad metabólica. Se encontró que no se alteran significativamente las actividades metabólicas o la viabilidad celular y que la proliferación celular resulta ser más favorable en DM90AV-AlgNa que en DM10AV-AlgNa.

#### Conclusiones

Se logró combinar por ultrasonido AlgNa con un PEC obteniendo un material relativamente estable. Los copolímeros DM10AV y DM90AV son muy distintos entre sí y, al combinarse con AlgNa, muestran propiedades contrastantes, lo que demuestra la importancia de una síntesis racional del polímero a emplear.

A partir de la manipulación experimental general y del estudio *in vitro* de DM90AV-AlgNa se observó que éste resulta el mejor candidato para la aplicación deseada.

#### Referencias

Qu H, Fu H, Han Z, Sun Y.. *RSC Adv.* **2019**,9(45):26252-26262.

# XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

## ADUCTOS TIMINA-PTERINA: CARACTERIZACIÓN Y PROPIEDADES FOTOSENSIBILIZADORAS

Godoy Ortega Gricelda, Lorente Carolina y Thomas Andrés H.

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[ggodoy@inifta.unlp.edu.ar](mailto:ggodoy@inifta.unlp.edu.ar)

### Introducción

La radiación solar puede dañar todas las bases nitrogenadas que componen al ADN, en forma directa o indirecta.<sup>[1]</sup> La alteración de bases implica una modificación de la secuencia genética, produciendo mutaciones y contribuyendo al desarrollo de procesos neoplásicos.<sup>[2]</sup> El daño directo ocurre cuando la radiación electromagnética es absorbida por las bases, mientras que en el daño indirecto otra molécula, denominada fotosensibilizador (FS), absorbe la radiación y, posteriormente reacciona con las bases nitrogenadas. El daño indirecto o fotosensibilizado, puede ocurrir mediante mecanismos de tipo I (reacciones de transferencia de electrones) o de tipo II (mediado por oxígeno singlete).<sup>[3]</sup>

Las pterinas son una familia de compuestos heterocíclicos ampliamente distribuidos en sistemas vivos que participan en numerosas funciones biológicas.<sup>[4]</sup> Bajo radiación UV-A, estos compuestos pueden actuar como FS por mecanismos de tipo I y/o II, dependiendo del sustrato, el pH y la concentración de O<sub>2</sub>.<sup>[5]</sup> Se ha reportado que pterina (Ptr) forma estados tripletes (<sup>3</sup>Ptr\*) que reaccionan eficientemente con las bases púricas y pirimidínicas en una reacción de transferencia de electrones para formar el radical anión de Ptr (Ptr<sup>-</sup>) y el radical catión del nucleótido (dNTP<sup>+</sup>). En ausencia de O<sub>2</sub>, los radicales de nucleótidos púricos se recombinan con Ptr<sup>-</sup> y se recuperan, pero los nucleótidos pirimidínicos reaccionan con Ptr<sup>-</sup> formando aductos dNMP-Ptr. Se observó que estos aductos se forman sobre timina (T) en el nucleósido libre (dT), el nucleótido libre (dTMP), oligonucleótidos de timina de cadena corta (dT<sub>5</sub>) y moléculas de ADN.<sup>[6]</sup>

### Resultados

Se llevó a cabo el estudio de las propiedades fotoquímicas y fotofísicas de los aductos dTMP-Ptr y dT<sub>5</sub>-Ptr. Asimismo, se evaluó la capacidad fotosensibilizadora utilizando como sustrato distintas moléculas de interés biológico.

### Conclusiones

Los aductos T-Ptr conservan las propiedades fotosensibilizadoras de Ptr, pudiendo actuar como FS en sí mismos.

### Referencias

- 1) Ravanat J.L. *et al.*, *Photochem. Photobiol.*, **2001**, 63, 88-102.
- 2) Ghissassi F.E. *et al.*, *Lancet Oncology*, **2009**, 10, 751-752.
- 3) Baptista M. *et al.*, *Photochem. Photobiol.*, **2017**, 93, 912-919.
- 4) Murata S. *et al.*, *Top. Heterocycl. Chem.*, **2007**, 127 - 171.
- 5) Lorente C. *et al.*, *Photochem. Photobiol.*, **2021**, 7, 100045.
- 6) Estébanez S. *et al.*, *Dyes and Pigments*, **2019**, 160, 624-632.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### DISEÑO DE NANOPARTÍCULAS PLASMÓNICAS Y CARBON DOTS PARA EL DESARROLLO DE MÉTODOS ALTERNATIVOS DE DIAGNÓSTICO CITO E HISTOPATOLÓGICO

Boggan Simal Guillermina<sup>1</sup>, Huergo María Ana<sup>1</sup> y Vericat Carolina<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[guillerminaboggan@inifta.unlp.edu.ar](mailto:guillerminaboggan@inifta.unlp.edu.ar)

#### Introducción

Las nanopartículas (NPs) plasmónicas presentan propiedades ópticas únicas que permiten su visualización mediante microscopía óptica, a pesar de ser más pequeñas que el límite de difracción de la luz. Mediante la funcionalización con anticuerpos (Ac) específicos las NPs pueden ser utilizadas como marcadores antigénicos en muestras de biopsias tisulares y/o extendidos citológicos. Debido a esto, es posible evaluar el reconocimiento de antígenos (Atg) y su distribución mediante microscopía de campo oscuro (MCO), ofreciendo una alternativa a la técnica actual de inmunohistoquímica (IHQ). Por otro lado, los *carbon dots* (CDs)<sup>1</sup> son nanomateriales de tamaños menores a 10 nm que se caracterizan por ser fluorescentes, económicos, biodegradables y fotoestables. Estas nanopartículas también pueden conjugarse con Ac y, por lo tanto, permiten el reconocimiento de Atg de interés por el método de inmunofluorescencia. Debido a las propiedades mencionadas anteriormente, su utilización como marcadores fluorescentes ofrece algunas ventajas sobre los fluoróforos tradicionales como una marcada resistencia al fotoblanqueo, bajos costos de producción y la utilización de materiales no contaminantes.

#### Resultados y Conclusiones

Se sintetizaron nanopartículas de Au (AuNPs) triangulares por reducción de  $\text{HAuCl}_4$  con  $\text{Na}_2\text{S}_2\text{O}_3$ , las cuales se estabilizaron, purificaron y separaron por fuerzas de depleción<sup>2</sup>. Las mismas presentan un tamaño aproximado de 80 nm de lado lo que permite observarlas por MCO como puntos de color rojo. En paralelo, se sintetizaron AuNPs esféricas por reducción de  $\text{HAuCl}_4$  con citrato de sodio, obteniéndose NPs de 90 nm de diámetro. Estas NPs se observan por MCO como puntos de color amarillo-verdoso. Además se conjugaron con Ac de ratón anti-IgG humana y se probaron en biopsias mediante MCO comparando los resultados con los de la IHQ tradicional. Por otra parte, se sintetizaron CDs a partir de la carbonización de urea y ácido cítrico, obteniéndose partículas con emisión verde (540 nm). Los CDs se conjugaron con anticuerpos IgG anti-proteína N de SARS-CoV-2 y se evaluó el reconocimiento específico de proteína N mediante la cuantificación de fluorescencia en lector de placas. Los resultados fueron comparados con los de un fluoróforo convencional (Alexa flúor).

#### Referencias

1) Pshunder F., Huergo M.A., Ramallo-Lopez J.M., Kommula B., Requejo F. G. y Bhattacharyya S.. *The Journal of Physical Chemistry C*, **2020**, 124 (1), 1121-1128.

2) Otero C., Boggan Simal G., *et.al.* *ACS Applied Nano Materials*, **2022**, 5 (1), 341-350. DOI: 10.1021/acsnm.1c03148.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### EVALUACIÓN DE TRATAMIENTOS COMBINADOS DE OXIDACIÓN CON BIORREMEDIACIÓN, APLICADOS A RESIDUOS OLEOSOS RESULTANTES DEL ALMACENAMIENTO DE PETRÓLEO

Scaramutti Mariel<sup>1</sup>, Rosso Janina.<sup>1</sup> y Mora Verónica<sup>2</sup>.

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET. 2. Centro de Investigación y desarrollo en Fermentaciones Industriales (CINDEFI)

[marielscaramutti@inifta.unlp.edu.ar](mailto:marielscaramutti@inifta.unlp.edu.ar)

La industria petroquímica genera grandes cantidades de desechos peligrosos durante la refinación del petróleo<sup>1,2</sup>, entre ellos, los residuos oleosos (RO). Producidos en los fondos de tanque de petróleo crudo<sup>3,4</sup>, forman emulsiones compuestas por alcanos de cadena larga, hidrocarburos aromáticos policíclicos, hidrocarburos heterocíclicos nitrogenados que contienen azufre, asfaltenos, resinas, además de catalizadores químicos e impurezas metálicas y metales pesados<sup>5</sup>. Por lo tanto, los RO son más recalcitrantes a la degradación que una mezcla de hidrocarburos o el petróleo crudo. Los tratamientos tradicionales (incineración, landfilling, extracción con solventes, pirólisis) implican riesgos de contaminación ambiental<sup>6</sup>. El objetivo de la tesis doctoral es estudiar tratamientos combinados de oxidación química y biorremediación aplicados a un RO procedente de fondos de tanque de almacenamiento de petróleo. Se propone:

Estudiar el efecto de distintas cantidades de oxidantes, dosificación y número de aplicaciones sobre el tratamiento del RO con oxidantes químicos:  $S_2O_8^{2-}$  y  $MnO_4^-$ .

-Evaluar la combinación de los tratamientos oxidativos con biorremediación utilizando un suelo proveniente de un landfarming (LF) que aportará microorganismos previamente expuestos a hidrocarburos de petróleo.

-Caracterizar los sistemas al final del tratamiento para determinar si el residuo generado conserva las propiedades del suelo en cuanto a toxicidad, productividad vegetal y cumple con el plan de cierre de un tratamiento LF, según la Resolución 446/99 de la provincia de Buenos Aires. Evaluar la posibilidad de escalado y estimar los costos operativos asociados.

#### Referencias

1. G. Hu, J. Li, G. Zeng, J. Hazard. Mater, **2013**, 261, 470–490.
2. K. Sivagami, D, Ultrason. Sonochem, **2019**, 51, 340–349.
3. G. Chen, C., J. Pet. Sci. Eng., **2019**, 183.
4. G. Hu, J. Li, H. Hou, J. Hazard. Mater, **2015**, 283, 832–840.
5. S. Quilici, Refinerías: cómo es el negocio y cuáles son los principales jugadores, El Cron. (**2019**) 1–9.
6. S.Y. Hochberg, B. Tansel, S. Laha, J. Environ. Manag, **2022**, 305, 114428.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### ESTRUCTURAS SUPRAMOLECULARES BASADOS EN ÁCIDO FÓLICO PARA FOTOLIBERACIÓN CONTROLADA DE SENSIBILIZADORES

Armijos-Capa Gerardo<sup>1</sup>, Thomas H. Andrés<sup>1</sup> y Serrano P. Mariana<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET. [agarmijoscapa@inifta.unlp.edu.ar](mailto:agarmijoscapa@inifta.unlp.edu.ar)

**Introducción.** Los procesos fotosensibilizados son usados en aplicaciones que incluyen síntesis con regio- y estereo selectividad controlada, terapia fotodinámica (PDT), fotoinactivación de microorganismos (PDI) y tratamiento de aguas para remoción de contaminantes. Estos procesos requieren de especies químicas llamadas fotosensibilizadores (Sens), que absorben radiación electromagnética en un rango espectral específico y, tras al alcanzar un estado excitado (Sens\*), causan alteraciones químicas en sustratos que no absorben luz en la misma región espectral. Esta interacción entre Sens\* y sustrato ocurre a través de una serie de mecanismos, siendo de nuestro interés las oxidaciones fotosensibilizadas<sup>1,2</sup>. Existe un creciente desarrollo de estrategias dirigidas a la inmovilización de los Sens en diferentes plataformas, como nanopartículas, liposomas y polímeros. Estas estrategias buscan que los Sens adquieran ventajas respecto a su forma libre, como mejorar la interacción con el sustrato, incrementar la biocompatibilidad, optimizar los procesos fotosensibilizados, facilitar su eliminación e, idealmente, hacerlos reutilizables. La inmovilización covalente de Sens con polielectrolitos es una vía interesante porque permite la formación de estructuras supramoleculares que modulan las propiedades fotoquímicas mediante la técnica de autoensamblado electrostático capa por capa (Layer-by-Layer, LbL)<sup>2</sup>. **Resultados y Conclusiones.** En este estudio, se sintetizó un fotosensibilizador polimérico basado en el poli(clorhidrato de alilamina) (PAH) y ácido fólico (FA) como Sens. El proceso de funcionalización se optimizó para generar el polímero modificado (PAH-FA), con un rendimiento global de la reacción de funcionalización del 50% y un grado de sustitución de FA por unidad polimérica (300 monómeros) de aproximadamente el 1%. Se demostró que PAH-FA fue adecuado para la construcción de microcápsulas mediante la técnica LbL, utilizando poli(estireno sulfonato) de sodio (PSS) como contrapolielectrolito y microcristales de CaCO<sub>3</sub> como moldes. Tras la eliminación del núcleo de CaCO<sub>3</sub>, se obtuvo una suspensión estable de microcápsulas huecas con capas que incorporan FA (HM-FA). Se estudió el comportamiento espectroscópico y fotoquímico tanto de soluciones de PAH-FA como en suspensiones de HM-FA. PAH-FA a pH ácido presentó un rendimiento cuántico ( $\Phi$ ) de  $5.2 \times 10^3$  y un pKa de 6. El de PAH-FA fue similar al de la forma ácida de FA libre, mientras que el pKa de PAH-FA fue dos unidades menor que el de FA libre. Los ensayos de fotoestabilidad de PAH-FA y MH-FA expuesto a UVA ( $365 \pm 10$  nm) demostraron la fotoliberación de otras especies químicas como, ácido p-aminobenzoilglutámico (PABA-Glu), carboxipterina (Cap), pterina (Ptr) debido a la ruptura de FA tanto en PAH-FA como en HM-FA, siendo Cap y Ptr fotosensibilizadores eficientes. Estos resultados son prometedores para explorar posibles aplicaciones prácticas utilizando tanto el fotosensibilizador polimérico (PAH-FA) como un fotosensibilizador supramolecular (HM-FA) en dianas biológicas o en la descontaminación de agua.

#### Referencias

1. Armijos-Capa, et al., ACS Appl Mater Interfaces 16, 3922–3934 (2024).
2. Serrano, M. P., et al., RSC Adv 9, 19226–19235 (2019).

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### HIDROGELES BIODEGRADABLES SOBRE SUPERFICIES DE INTERÉS EN CIRUGÍA PROTÉSICA: HACIA UN SISTEMA ÓPTIMO PARA LA LIBERACIÓN LOCAL DE AGENTES TERAPÉUTICOS

Sille Irene E., Urrutia M. Noel y Schilardi Patricia L.

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[isille@quimica.unlp.edu.ar](mailto:isille@quimica.unlp.edu.ar)

#### Introducción

Las superficies de los dispositivos biomédicos son susceptibles al ataque y persistencia de microorganismos que generan biofilms [1] provocando infecciones altamente persistentes. El objetivo de este trabajo es el desarrollo de una metodología que permita recubrir titanio, material utilizado en implantes, y PVC, material empleado para tubos endotraqueales, con una película de un hidrogel que sea biodegradable y biocompatible y que contenga agentes antimicrobianos convencionales (antibióticos) y/o alternativos como las nanopartículas de plata (AgNPs). La liberación de estos agentes permitiría obtener superficies autoesterilizables durante ciertos períodos de tiempo.

#### Resultados y conclusiones

Se estudiaron dos hidrogeles, uno de polietilenglicol malato citrato (PEGMC) [2] y otro de quitosano y  $\beta$ -glicerol fosfato de sodio (CS/GP) [3]. Se optimizó la síntesis de los hidrogeles y se desarrollaron protocolos para incorporar los agentes antimicrobianos (AgNPs y gentamicina). Se utilizaron AgNPs sintetizadas según una metodología adaptada por el grupo de investigación [4]. En una primera etapa se estudió la degradación de los hidrogeles masivos en función del tiempo, mediante la medida de la pérdida de masa en agua y se observó que la mayor degradación ocurre durante la primera semana.

En una segunda etapa se evaluaron y optimizaron las condiciones para una eficiente funcionalización de las superficies con una película de los hidrogeles y de los hidrogeles conteniendo agentes antimicrobianos. Se caracterizaron las películas mediante FTIR, microscopía óptica y AFM (Microscopía de Fuerza Atómica), y se ensayó la degradación en continuo de los hidrogeles sobre las superficies, utilizando como medio agua ultrapura y fluido corporal simulado. Para evaluar las propiedades antibacterianas de las superficies modificadas se están realizando ensayos microbiológicos (recuento de bacterias viables) utilizando *Staphylococcus aureus*.

Los resultados indican que los hidrogeles se adhieren a las superficies ensayadas formando películas delgadas de espesor no homogéneo. Las películas son estables (permanecen adheridas) en los medios en los que se ensayó su degradación. Se continuará con los ensayos para determinar su capacidad antimicrobiana.

#### Referencias

- 1) Gbejuade, H. O; *Acta Orthop*, **2015**, 86 (2), 147–158.
- 2) D. Gyawali, *Biomaterials*, **2010**, 31, 9092–105
- 3) Cho J.; *Biomacromolecules*, **2005**, 6, 3267–3275.
- 4) Ghilini, F.; *ACS Applied Materials & Interfaces*, **2018**, 10 (28), 23657–23666.

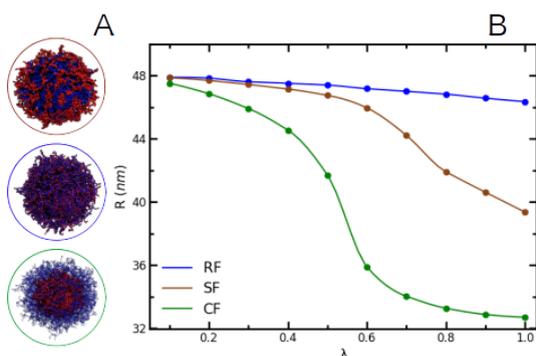
## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### NANOGELES DE POLÍMEROS CON RESPUESTA A CAMBIOS DE LA CALIDAD DEL SOLVENTE COMO VEHÍCULOS DE BIOMATERIALES: ESTUDIOS POR SIMULACIONES COMPUTACIONALES

Cruz-González Ana María, Longo Gabriel S. y Albesa Alberto

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.  
[anamcruzgonzalez@gmail.com](mailto:anamcruzgonzalez@gmail.com)

La organización interna y externa de nanogeles termosensibles de p(NIPAm-HEMA) poly(N-isopropylacrylamide-co-2-hydroxyethyl methacrylate) como función de la calidad del solvente fueron caracterizados con Dinámica Molecular. Diferentes nanogeles fueron funcionalizados con los siguientes criterios: distribución de la unidad funcional en el centro (CF), en la superficie (SF) y aleatoria (RF), porcentaje de 30 y 60 % de NIPAm y longitud de 25 y 50 monómeros entre entrecruzante. Los resultados obtenidos demuestran que la respuesta al cambio de la calidad del solvente varía dependiendo de la ubicación del NIPAm en el nanogel. Este comportamiento se acentúa con el aumento de la fracción de NIPAm<sup>1</sup> y el grado de entrecruzamiento



en la red polimérica<sup>2</sup>. La presencia de un monómero hidrofílico en el sistema da la posibilidad de controlar la transición de fase volumétrica (VPT)<sup>3</sup> presentándose a una mejor calidad del solvente en los nanogeles CF respecto a los nanogeles SF y RF. Además, la hidrofobicidad/hidrofiliidad de la superficie del NG puede ser controlada variando la calidad del solvente<sup>4</sup>. La información obtenida en este trabajo aporta conocimientos importantes sobre la organización interna y externa de nanogeles termo responsivos como respuesta a la calidad del solvente contribuyendo en la consolidación de estrategias que permita su uso eficiente como transportadores y administradores de biomateriales.

en la red polimérica<sup>2</sup>. La presencia de un monómero hidrofílico en el sistema da la posibilidad de controlar la transición de fase volumétrica (VPT)<sup>3</sup> presentándose a una mejor calidad del solvente en los nanogeles CF respecto a los nanogeles SF y RF. Además, la hidrofobicidad/hidrofiliidad de la superficie del NG puede ser controlada variando la calidad del solvente<sup>4</sup>. La información obtenida en este trabajo aporta conocimientos importantes sobre la organización interna y externa de nanogeles termo responsivos como respuesta a la calidad del solvente contribuyendo en la consolidación de estrategias que permita su uso eficiente como transportadores y administradores de biomateriales.

#### Referencias

- 1) Kubo, M.; Higuchi, M.; Koshimura, T.; Shoji, E.; Tsukada, T., *J. Ultrasonics Sonochemistry.*, **2021**, 79, 105752.
- 2) Cirillo, G.; Spataro, T.; Curcio, M.; Spizzirri, U. G.; Nicoletta, F. P.; Picci, N.; Iemma, F., *J. Materials Science and Engineering: C.*, **2015**, 48, 499–510.
- 3) Mustafa, G.; Hassan, A.; Shahid, M.; Irfan, A.; Chaudhry, A. R.; Farooqi, Z. H.; Begum, R., *J. Reactive and Functional Polymers.* **2024**, 200, 105919.
- 4) Ghavami, A.; Winkler, R. G.J. *CS Macro Letters.*, **2017**, 6, 721–725.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### ESTUDIO DEL MECANISMO DE OXIDACIÓN FOTOSENSIBILIZADA DE TRIPTÓFANO A N-FORMILQUINURENINA

Farías Jesuán, Dántola María Laura y Thomas, Andrés

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[jesuanjf@inifta.unlp.edu.ar](mailto:jesuanjf@inifta.unlp.edu.ar)

El triptófano (W) es un aminoácido esencial, de gran importancia estructural y funcional en proteínas, con bajo potencial de ionización<sup>1</sup>, y muy reactivo con especies oxidantes, tales como las especies reactivas de Oxígeno (ROS).<sup>2</sup> Uno de los principales productos de oxidación de W es N-formilquinurenina (NFK). Esta molécula funciona como marcador de envejecimiento y daño oxidativo en proteínas.<sup>3</sup> Su formación incrementa el daño que la radiación puede generar en estas biomoléculas, pues NFK absorbe en un rango del espectro electromagnético donde las proteínas naturalmente no absorben. Por otra parte, actúa como fotosensibilizador (Sens), es decir, al absorber radiación genera especies excitadas que son capaces de dañar a otras moléculas (S) que no absorben en ese rango del espectro.<sup>4</sup> Entre los procesos fotosensibilizados, las oxidaciones fotosensibilizadas son las más frecuentes. Estas pueden ocurrir a partir de la transferencia de electrones entre el Sens y S (mecanismo tipo I) o mediante la oxidación del S por oxígeno singlete (<sup>1</sup>O<sub>2</sub>) generado fotoquímicamente por el Sens (mecanismo tipo II). Si bien se ha reportado que NFK es un producto característico de la reacción entre W y <sup>1</sup>O<sub>2</sub>, también se ha observado su formación durante la irradiación de W en presencia de pterina (Ptr),<sup>5</sup> un Sens que actúa principalmente mediante mecanismo tipo I.

Basándonos en estos antecedentes, nos propusimos estudiar el mecanismo de la generación de NFK a partir de W libre y en péptido, empleando Ptr y Rosa de Bengala (RB) como modelos de Sens que actúan por mecanismo Tipo I<sup>6</sup> y Tipo II, respectivamente. Para llevar a cabo este estudio se utilizaron como molécula blanco W libre y un péptido cuyo único residuo oxidable es W (Ac-SSSGWGSSS). Soluciones acuosas ácidas de la molécula blanco y Sens fueron irradiadas por diferentes períodos de tiempo y en diferentes condiciones, y analizadas por espectrofotometría UV-Vis y HPLC.

Los resultados obtenidos indican que la eficiencia de formación de NFK depende tanto del tipo de Sens utilizado como del entorno donde el W se encuentra, encontrando un mayor rendimiento cuando se usa RB como Sens y péptido como sustrato.

#### Referencias

- 1) Mahmoudi, L., *et al. Biochemistry*, **2016**, 55, 2849.
- 2) Savige, W. E. *Aust. J. Chem.* **1975**, 28, 2275.
- 3) Dyer, J. M., *et al. Photochem. Photobiol. Sci.*, **2006**, 5, 698.
- 4) Pileni, M. P., *et al, Phys. Chem.* **1976**, 80, 1804.
- 5) Thomas, A. H., *et al, Free Radic. Biol. Med*, **2013**, 63, 467
- 6) Redmond R. W., *et al, Photochem. Photobiol.*, **1999**, 70, 391.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### ESTUDIO CINÉTICO TEÓRICO DE LA OXIDACIÓN ATMOSFÉRICA DE LOS PRODUCTOS DE DEGRADACIÓN DE LOS FUNGICIDAS FLUOPYRAM Y FLUOPICOLIDE INICIADA POR EL RADICAL OH

Espinosa Manrique Wilfred, Badenes María Paula y Tuccheri María Eugenia

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.  
[wilfredesp@inifta.unlp.edu.ar](mailto:wilfredesp@inifta.unlp.edu.ar)

**Introducción:** Al ingresar a la atmósfera, especies como 2,6-diclorobenzamida (BAM), trifluorometilbenzamida (TBAM) y los ácidos 3-cloro-5-trifluorometil-piridina-2-benzoico (PCA) y orto-trifluorometilbenzoico (TBA), productos de degradación de los fungicidas fluopyram y fluopicolide pueden llegar a reaccionar de forma primaria con el radical OH, dando lugar a la formación de radicales. Estos últimos, mediante reacciones posteriores, podrían formar nuevos compuestos que representan un potencial riesgo ambiental [1]. A partir de la complejidad que presenta la determinación de estas moléculas in situ (en la atmósfera) y su rápida disolución, resulta de gran utilidad realizar modelados teóricos con el fin de predecir los productos que originan, los mecanismos de reacción en los que intervienen y sus posibles interacciones con otras especies atmosféricas, con el fin de establecer su comportamiento e impacto ambiental.

**Resultados:** En particular, se determinó la energética de reactivos, complejos, estados de transición y productos de las reacciones con el radical OH de las especies mencionadas anteriormente (BAM, TBAM, TBA y PCA), empleando métodos de la teoría del funcional de la densidad (DFT). Más específicamente, se utilizó el nivel de teoría BMK/6-311++G(3df,3pd), obteniendo así las diferentes rutas de reacción tanto de adición de radicales OH como las de abstracción de átomos de H para cada compuesto. También se obtuvieron las constantes de velocidad de cada canal empleando la teoría del estado de transición (TST) y se analizó su comportamiento con la temperatura en el rango de 200 a 400 K.

**Conclusiones:** Los valores obtenidos para las constantes de velocidad en el límite de alta presión para las reacciones de adición de radicales OH (en  $\text{cm}^3 \text{molécula}^{-1} \text{s}^{-1}$ ) para la ruta más probable de cada compuesto se encuentran en el orden de  $10^{-14}$  para BAM,  $10^{-17}$  para TBAM,  $10^{-15}$  para TBA y  $10^{-17}$  para PCA. Mientras que las resultantes para las reacciones de abstracción de átomos de hidrógeno, considerando la aproximación de efecto túnel de Wigner, son (en  $\text{cm}^3 \text{molécula}^{-1} \text{s}^{-1}$ ):  $10^{-17}$  para BAM,  $10^{-18}$  para TBAM,  $10^{-13}$  para TBA y  $10^{-20}$  para PCA. Se observa entonces que sólo en el caso de TBA esta última ruta resulta significativa.

#### Referencias

- 1) Atkinson, R. *Water, Air, and Soil Pollution*. **1999**, 115, 219-243.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### MODELO DE HEISENBERG BIDIMENSIONAL CON ANISOTROPÍA UNIAXIAL E INTERACCIONES DIPOLARES: CARACTERIZACIÓN DEL DIAGRAMA DE FASES

Pagliari, Paula S., Bab, Marisa A. y Saracco, Gustavo P.

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.  
[pspagliaro@gmail.com](mailto:pspagliaro@gmail.com)

#### Introducción

Se estudió una película ferromagnética mediante simulaciones Monte Carlo, modelada mediante una red bidimensional de espines clásicos de Heisenberg, cuyo Hamiltoniano incluye términos de anisotropía, interacciones de intercambio y dipolares magnéticas. El diagrama de fases del sistema a campo externo nulo presenta una rica fenomenología que incluye a bajas temperaturas ( $T$ ) fases caracterizadas por dominios tipo franjas alternadas (SO), orientadas en forma perpendicular al plano de la película, o bien una fase ferromagnética planar (FM), dependiendo de los valores de la constante de anisotropía relativos a la constante dipolar,  $\eta$ . Mientras que a altas temperaturas se observa una fase paramagnética (PM). El ancho ( $h$ ) de las franjas en la fase SO varía con la relación entre la constante de intercambio y dipolar,  $\delta$ , que también puede generar una fase intermedia nemática (NM). El objetivo de este estudio es caracterizar las transiciones de fase correspondientes.

#### Resultados

Como primer paso se consideró el valor  $\delta=1$  correspondiente a  $h=1$ . Para este valor, el diagrama  $\eta$ - $T$  presenta una línea de transiciones de reorientación SO-FM, reportada de primer orden, mientras que las líneas FM-PM y SO-PM de segundo orden. Sin embargo, el comportamiento crítico de las últimas no ha sido caracterizado y existen controversias acerca del carácter de las transiciones en la región próxima al punto triple, la existencia de una región de reentrancia y un punto tricrítico.

Se definieron parámetros de orden apropiados para cada tipo de transición y se analizó su evolución dinámica, así como de sus momentos, en el régimen de tiempos cortos para valores selectos de  $(\eta, T)$ . En todos los casos se obtuvieron las  $T$  de transición, el comportamiento de los puntos espinodales para la transición SO-FM y se determinaron los exponentes críticos de las transiciones SO-PM y FM-PM.

#### Conclusiones

- Los resultados para la línea de transiciones SO-FM son consistentes con transiciones de primer orden. Las espinodales se debilitan hacia el punto triple.
- La línea FM-PM se mantiene continua y aporta evidencia de la existencia de reentrancia.
- Los valores estudiados de la transición SO-PM permiten confirmar que son continuas y caracterizarlas a partir de los exponentes críticos dinámicos.
- Las temperaturas críticas halladas en las transiciones SO-PM al crecer  $\eta$ , tienden al valor correspondiente al modelo de Ising dipolar, es decir al límite  $\eta \rightarrow \infty$ .

#### Referencias

- H. Komatsu, Y. Nonomura, M. Nishino, Phys. Rev. B 100, (2019).
- M. Carubelli, O.V. Billoni, S.A. Pighin, S.A. Cannas, D.A. Stariolo y F.A. Tamarit, Phys. Rev. B 77 (2008).
- C. M. Horowitz, M. A. Bab, M. Mazzini, M. L. Rubio Puzzo, y G. P. Saracco, Phys. Rev. E, 92,04127 (2015).

# XVI Jornadas de Tesisistas del INIFTA 2024

## DESARROLLO DE ESTRATEGIAS TERAPÉUTICAS PARA EL TRATAMIENTO DE LA AMILOIDOSIS BASADAS EN FOTOTERMIA PLASMÓNICA CON NANOPARTÍCULAS DE ORO

Borzi, María Alejandra<sup>1</sup>, Prieto, Eduardo Daniel<sup>1</sup> y Huergo, Maria Ana Cristina<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET. [alejandraborzi@inifta.unlp.edu.ar](mailto:alejandraborzi@inifta.unlp.edu.ar)<sup>1</sup>

### Introducción

La amiloidosis es una enfermedad grave, de baja incidencia, causada por el plegamiento anómalo de proteínas en conformación de lámina beta. Este plegamiento lleva a la formación espontánea de fibrillas amiloides que resultan resistentes a la proteólisis natural por lo que se van acumulando en diferentes órganos y tejidos. Actualmente no existen tratamientos curativos y los pacientes suelen evolucionar a la insuficiencia de los órganos afectados. La hipertermia plasmónica es una estrategia terapéutica relativamente nueva que permite la generación de aumentos localizados de temperatura mediante la excitación de nanopartículas plasmónicas. Particularmente, la excitación con luz en el infrarrojo cercano (NIR) permite excitar las nanopartículas sin afectar a los tejidos circundantes<sup>1</sup>. En base a lo anteriormente mencionado, en este proyecto se plantea la generación de hipertermia plasmónica mediante la excitación de nanotriángulos de oro (AuNTs) con absorción en el NIR, para la degradación de los acúmulos amiloides como posible tratamiento para la amiloidosis. Para ello se utilizará el modelo de fibrilación amiloidogénica de Apolipoproteína A-I (Apo A-I), ampliamente estudiado y aceptado por la bibliografía internacional como modelo de fibrillas amiloides<sup>2</sup>.

### Resultados

Se sintetizaron y purificaron muestras de proteínas Apo A-I *wild type* (wt) y una mutante por delección (Lys) y se indujo la formación de fibras amiloides.

Las fibras se incubaron con diferentes concentraciones de AuNTs y fueron sometidas a ciclos de irradiación con un láser de onda continua y 808 nm de longitud de onda, por períodos de 8 minutos.

Todas las muestras, tanto irradiadas como no irradiadas se caracterizaron mediante las técnicas de TEM (microscopía electrónica de transmisión) y AFM (microscopía de fuerzas atómicas)

### Conclusiones

Los resultados preliminares indican que el tratamiento con hipertermia plasmónica, en las condiciones descritas, sobre las fibras amiloides de Apo A-I genera cambios significativos de tamaño, morfología y estructura de las mismas. Se pudo constatar la conservación de la estructura de las nanopartículas sometidas a irradiación láser.

### Referencias

- 1) Otero, C. M. et al. *ACS Appl Nano Mater*, **2022**,5, 341–350.
- 2) Ramella, N. A. et al. *PLoS One*, **2012**,7(8),e43755

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### CONTROL DE LA ADSORCIÓN DE PROTEÍNAS MEDIANTE ESTRATEGIAS ANTIFOULING EN SUPERFICIES DE SÍLICA

Cathcarth Marilina, Ceolin Marcelo R., Picco Agustín S. y Longo Gabriel S

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[mcathcarth@inifta.unlp.edu.ar](mailto:mcathcarth@inifta.unlp.edu.ar)

**Introducción:** La adsorción de proteínas en superficies de nanomateriales es un desafío crucial en nanomedicina, afectando la estabilidad y funcionalidad de las nanopartículas en entornos biológicos. El desarrollo de estrategias antifouling y herramientas teóricas para su evaluación es esencial. En nuestro trabajo previo, desarrollamos una teoría molecular para estudiar la adsorción de proteínas en superficies de sílica<sup>1</sup>. Recientemente, hemos extendido nuestro modelo incorporando interacciones no coulómbicas entre aminoácidos y la superficie, lo que nos permitió predecir la adsorción de BSA y, adicionalmente, capturar fenómenos como la repulsión entre proteínas a pH bajo y disminuir la influencia de la fuerza iónica en la adsorción.

En este estudio, evaluamos la eficacia de modificaciones superficiales con grupos zwitteriónicos cortos (sulfobetaina, ZS) y polietilenglicol (PEG) como estrategias antifouling en superficies de sílice, analizando su capacidad para prevenir la adsorción de lisozima (pI 10.9) y albúmina sérica bovina (BSA, pI 5.7) a pH 7.4.

**Resultados y Conclusiones:** Como se esperaba, un aumento en la densidad de grafteo de ZS reduce la adsorción tanto de BSA como de lisozima. Observamos que la fuerza iónica tiene un efecto diferencial en la adsorción de estas proteínas. Para BSA, que está cargada negativamente a pH 7.4, un aumento en la fuerza iónica incrementa la adsorción. Esto se debe al apantallamiento de las cargas que reduce la repulsión electrostática entre BSA y la superficie de sílice negativa, permitiendo que otras interacciones, como las no coulómbicas, cobren mayor importancia. En contraste, para la lisozima, que está cargada positivamente a pH 7.4, un aumento en la fuerza iónica disminuye la adsorción. Esto se explica por la reducción de la fuerte atracción electrostática inicial entre la lisozima y la superficie de sílice negativa debido al apantallamiento de cargas.

La modificación con PEG demostró ser altamente efectiva para prevenir la adsorción de BSA, prácticamente eliminándola. Para la lisozima, que representa un mayor desafío, el PEG logró disminuir significativamente la adsorción, aunque no la eliminó por completo. En comparación, el PEG mostró un mejor rendimiento general como estrategia antifouling que la ZS, especialmente para BSA. Estos resultados teóricos concuerdan con observaciones experimentales previas<sup>2</sup>.

#### Referencias

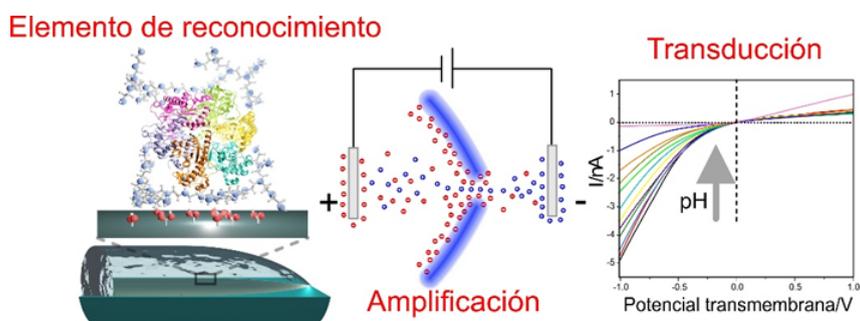
- 1) Cathcarth, M., et al. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **2022**, 34, 364001.
- 2) Galdino, F. E., et al. *Colloids and Surfaces B: Biointerfaces*, **2020**, 186, 110677.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### BIOSENSADO DE CREATININA VÍA RESPUESTA IONTRÓNICA DE UN NANOCANAL ÚNICO

Hernandez L. Miguel, Marmisollé Waldemar A, Azzaroni Omar  
 Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
 Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.  
[lumihe@inifta.unlp.edu.ar](mailto:lumihe@inifta.unlp.edu.ar)

La creatinina es el segundo analito más común en la química clínica, después de la glucosa. Su concentración en orina es aproximadamente constante en un individuo sano y se utiliza como biomarcador en el diagnóstico de enfermedades[1]. Existen diferentes métodos de cuantificación de creatinina; el biosensado es uno de los más estudiados en los últimos años.



La creatinina deiminasa (CD) es una enzima que, en presencia de creatinina y agua, genera amoníaco, modificando el pH local en función de la concentración del sustrato. Con esto en mente, se desarrolló un dispositivo nanofluídico responsivo a pH, basado en un nanocanal biomimético soportado en una membrana polimérica, con una modificación superficial mediante ensamblado capa a capa de polietilenimina (PEI) y CD. Tanto el polielectrolito como la enzima poseen grupos funcionales anfóteros sensibles a los cambios de pH generados por la reacción enzimática, la protonación o desprotonación de dichos grupos funciona como mecanismo de transducción, modificando el flujo iónico a través del nanocanal, que se registra como corriente iontrónica cuando se aplica un potencial de transmembrana. Esta corriente no solo es afectada por la magnitud de la carga superficial, sino también por su polaridad, de manera que el dispositivo adquiere la capacidad de rectificar la corriente [2]. Para este sistema se demostró que la respuesta en términos de factores de rectificación (frec) es lineal con el logaritmo de la concentración de creatinina en solución, permitiendo el sensado de este analito mediante la monitorización de la salida iontrónica, incluso en matrices complejas como la orina diluida.

#### Referencias

- 1.Kashani, K., Rosner, M.H., Ostermann, M., *Eur J Intern Med*,**2020**, 72, 9–14.
- 2.Laucirica, G., Toum Terrones, Y., Cayón, V., Cortez, M.L., Toimil-Molares, M.E., Trautmann, C., Marmisollé, W., Azzaroni, O., *TrAC Trends in Analytical Chemistry*,**2021**, 144, 116425.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### AVANCES EN EL DESARROLLO DE KITS COLORIMÉTRICOS BASADOS EN NANOPARTÍCULAS DE ORO PARA EL DIAGNÓSTICO SEROLÓGICO DE LA TRISTEZA BOVINA

Madero Agustín<sup>1,2</sup>, Daza Millone Antonieta<sup>1</sup>, Rodriguez Jéscica<sup>3</sup>, Barredo-Vacchelli Gabriela<sup>3</sup>, Primo Evangelina<sup>4</sup>, Schnittger Leonhard<sup>2</sup>, Vericat Carolina<sup>1</sup>, Camperi Sillvia<sup>3</sup>, Florin-Christensen Mónica<sup>2</sup>, Ganzinelli Sabrina<sup>2</sup>, Huergo María Ana<sup>1</sup>.

1 Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

2-Instituto de Patobiología Veterinaria INTA-CONICET, CICVyA, INTA. Hurlingham.

3-Instituto de Nanobiotecnología y Cátedra de Biotecnología, Facultad de Farmacia y Bioquímica, UBA, CABA. 4-Instituto de Investigación de la Cadena Láctea INTA-CONICET, EEA-INTA. Rafaela, Santa Fe.

[madero.agustín@inta.gob.ar](mailto:madero.agustín@inta.gob.ar)

#### Introducción

*Babesia bovis* es un protozoo intraeritrocitario, transmitido por la garrapata común del ganado, que provoca cuadros severos de babesiosis en bovinos que no han sido expuestos al parásito o vacunados previamente. Esta enfermedad genera significativas pérdidas económicas en nuestro país y otras áreas cálidas del mundo. En las zonas endémicas, se emplea el diagnóstico serológico para evaluar la inmunidad del ganado y tomar decisiones sobre la vacunación. Sin embargo, los métodos actuales utilizan preparaciones crudas de parásitos que son difíciles de obtener y conllevan el riesgo de reacciones cruzadas. Por esta razón, se propone el desarrollo de métodos de diagnóstico serológicos empleando nanopartículas de oro, que sean fáciles de estandarizar, económicos y sencillos de aplicar. En esta primera etapa, nuestro objetivo fue identificar epítopes B antigénicos que puedan servir como candidatos para la determinación serológica de *B. bovis*.

#### Resultados

Mediante análisis bioinformático se predijeron los epítopes B presentes en el antígeno de superficie inmunodominante de *B. bovis*, MSA-2c (Dominguez M, et al 2010) y se identificaron aquellos que estuviesen conservados entre diferentes aislamientos geográficos. Se seleccionó uno para ser sintetizado en fase sólida, y se le añadió un brazo espaciador y un grupo tiol terminal para facilitar la unión al oro. La correcta funcionalización del péptido con la placa de oro se verificó mediante voltametría cíclica. Posteriormente, se estudió por medio de la técnica de resonancia de plasmones superficiales (Chain CY, et al 2019) su reconocimiento por anticuerpos presentes en el suero de un animal infectado experimentalmente con este parásito y de un animal sano, utilizado como control. Se observaron marcadas diferencias entre los sueros, aun con diluciones bajas como 1:12800.

#### Conclusiones

Estos resultados confirmarían que el péptido sintetizado corresponde a un epítope B de *B. bovis* y sugiere su potencial como candidato para el desarrollo de *tests* de diagnóstico serológico.

#### Referencias

- 1) Chain CY, et al 2019. ACS Infectious Diseases. 5(11):1813-9.
- 2) Dominguez M, et al 2010. Vet Parasitol 167(2-4):216-26.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### DISEÑO EXPERIMENTAL Y ESTUDIO TEÓRICO DE MATERIALES PARA VECTORES DE ENERGÍA LIMPIA: BATERÍAS DE LI

Girardi Joaquín<sup>1</sup>, Ortiz Mariela<sup>1,2</sup> y Gervasi Claudio<sup>1</sup>

1 Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET. 2 Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencia y Tecnología de Materiales (CITEMA), Universidad Tecnológica Nacional-CICPBA, Av. 60 esquina 124, Berisso, Argentina. [girardijoaquin99@gmail.com](mailto:girardijoaquin99@gmail.com)

El marco estratégico a nivel global que vira hacia energías renovables presenta un inconveniente desde el punto de vista práctico, el cual radica en que las fuentes de energía de este tipo suelen ser de generación intermitente, dado que dependen de las condiciones ambientales al momento de su generación. Consecuentemente, resulta indispensable desarrollar dispositivos de almacenamiento de energía adecuados, que puedan utilizar la energía en el momento demandado con el poder requerido. Uno de los medios de almacenamiento que, por su implicancia nacional y potencialidades teóricas se encuentra como principal candidato son las baterías de litio [1-2].

El objetivo general del proyecto es el de desarrollar nuevos y más eficientes electrodos para baterías de litio, a partir del desarrollo de materiales de obtención local, con estructuras compuestas o híbridas, a partir de óxidos de metales de transición, acoplados a materiales conductores como polímeros o compuestos grafiticos, evaluando su comportamiento como parte de baterías de litio.

El proyecto involucra las etapas de:

- Diseño de los materiales. (estructuras laminares ( $\text{LiMO}_2$ ) y espinelas ( $\text{LiM}_2\text{O}_4$ ), con  $M = \text{Mn, Ni, Al, Ti}$ . Además, se prepararon materiales poliméricos (a base de PEO, PAN y PVDF) y carbonosos a partir de residuos agrícolas y domiciliarios [3]).
- Síntesis de los materiales (métodos con mayor facilidad de ser escalados, de baja toxicidad y bajo costo).
- Caracterización fisicoquímica y estructural de los materiales obtenidos.
- Caracterización electroquímica.
- Preparación y optimización de nuevos electrolitos orgánicos.
- Prueba de los materiales optimizados en celdas prototipo.

#### Referencias

- 1) Naoki Nitta, Feixiang Wu, Jung Tae Lee, Gleb Yushin, *Materials Today*, **2015**, 18, 5, 252
- 2) Jun Lu, Zonghai Chen, Zifeng Ma, Feng Pan, Larry A. Curtiss & Khalil Amine, *Nature Nanotechnology* (Review) **2016**, 11, 1031.
- 3) Jing Xu, Feng Lin, Marca M. Doeff, Wei Tong, *J. Mater. Chem. A*, **2017**, 5, 874.

# XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

## ESTUDIO CINÉTICO TEÓRICO DE REACCIONES DE HIDROFLUOROÉTERES CON RADICALES OH

Caballero Lawrence, Amanda<sup>1</sup> y Badenes, María Paula<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET. aclawrence@inifta.unlp.edu.ar

**Introducción:** Los hidrofluoroéteres (HFE) pueden oxidarse en la atmósfera con radicales altamente reactivos como lo es el radical hidroxilo (OH), reacción que constituye el primer paso de su degradación. Se espera que presenten una corta vida atmosférica debido a la presencia del enlace -O-, sin embargo, el gran número de enlaces C-F que contienen puede originar compuestos de vida mayor [1]. Por este motivo es de suma importancia conocer la cinética de las reacciones de los HFE con el radical OH. En este trabajo se presenta un estudio de la cinética de las reacciones de abstracción de átomos de hidrógeno por radicales OH de los HFE conocidos como HFE-227mc o  $\text{CF}_3\text{CHFOCF}_3$  y HFE-246cb2 o  $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{OCF}_3$ .

**Resultados:** El éter  $\text{CF}_3\text{CHFOCF}_3$  posee un sólo átomo de hidrógeno susceptible a ser abstraído por radicales OH, mientras que  $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{OCF}_3$  presenta dos de ellos. Sin embargo, para este último caso, ambos átomos de hidrógeno son equivalentes. Por lo tanto, para los dos éteres estudiados se espera un único camino de reacción (ver Fig. 1), procediendo a través de estados de transición (mostrados en la Fig. 2). Las constantes de velocidad se determinaron en un rango de temperatura de 200-1000 K mediante la Teoría del Estado de Transición y se corrigieron por efecto túnel mediante el método de Wigner [2]. La información estructural y termoquímica se derivó de cálculos previos con el funcional de la densidad M06-2X/6-311++G(3df,3pd).

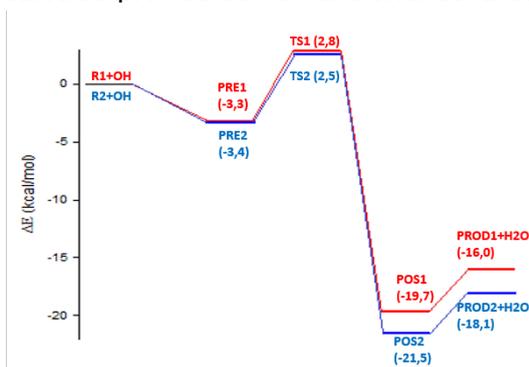


Figura 1. Diagrama de la superficie de energía potencial de  $\text{CF}_3\text{CHFOCF}_3+\text{OH}$  (rojo) y  $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{OCF}_3+\text{OH}$  (azul).

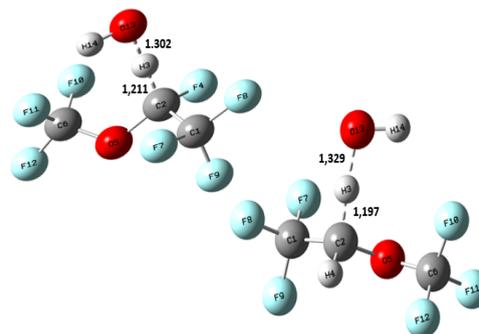


Figura 2. Estructuras de los Estados de Transición de  $\text{CF}_3\text{CHFOCF}_3$  (arriba) y  $\text{CF}_3\text{CH}_2\text{OCF}_3$  (abajo). Dist. en Å.

**Conclusiones:** Resultados preliminares muestran que las constantes de velocidad de ambas reacciones exhiben una dependencia con la temperatura del tipo no Arrhenius.

### Referencias

- 1) Jia, X., et al., *J. Phys. Chem. A*, 114, **2010**, 417-424.
- 2) Wigner, E.P., *Z. Phys. Chem. B*, 40, **1932**, 749-759.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### EFFECTO DE LA PRESENCIA DE TRIPTÓFANO EN LA GENERACIÓN FOTOINDUCIDA DE DÍMEROS DE TIROSINA POR SENSIBILIZADORES ENDÓGENOS

García Beltrán Karla Paola, Thomas Andrés H. y Dántola María Laura.

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.  
[beltrankarlap@inifta.unlp.edu.ar](mailto:beltrankarlap@inifta.unlp.edu.ar)

La radiación ultravioleta (UV) es capaz de dañar a las proteínas a través de reacciones fotosensibilizadas en las cuales un sensibilizador (Sens) al absorber radiación, genera un cambio químico en las biomoléculas. Las oxidaciones fotosensibilizadas pueden ocurrir por transferencia de electrones entre el Sens y el sustrato (mecanismo tipo I) o mediante la oxidación del sustrato por oxígeno singlete ( $^1\text{O}_2$ ) generado fotoquímicamente por transferencia de energía del Sens excitado al oxígeno molecular (mecanismo tipo II).<sup>1</sup> Entre los Sens que se conocen se encuentran las pterinas, tetra-azo-naftalenos que participan en un amplio rango de funciones biológicas. Se ha demostrado que el daño fotosensibilizado de las cadenas laterales de los aminoácidos tirosina (Y) y triptófano (W), empleando pterinas como Sens, ocurre principalmente por mecanismo tipo I. Por otro lado, en una proteína que posee ambos aminoácidos, puede ocurrir una transferencia de electrones desde un residuo de Y a un residuo de W oxidado ( $W^+$ ), recuperando el residuo de W y generando un nuevo radical centrado en Y ( $Y^+$ ). Esta migración depende de la proximidad en la que se encuentran ambos aminoácidos,<sup>2</sup> y la generación de  $Y^+$  en una proteína puede dar lugar a la formación de dímeros de tirosina ( $Y_2$ ), productos de mayor peso molecular que afectan la solubilidad y las propiedades elásticas de las proteínas, implicados en patologías como Parkinson, cataratas del cristalino y carcinomas epidérmicos.

Por lo anterior, se evaluó el efecto de la presencia de triptófano en la eficiencia de formación de  $Y_2$  en reacciones fotosensibilizadas por pterina en aminoácidos libres y en péptidos diseñados de secuencia específica. Para ello soluciones acuosas ácidas fueron expuestas a radiación UVA (350 nm) por diferentes períodos de tiempo y analizadas HPLC y fluorescencia. Los resultados obtenidos indican que a altas concentraciones de W ( $[W] > 500 \mu\text{M}$ ), Y no solo se consume por su reacción con el estado excitado triplete del sensibilizador ( $^3\text{Ptr}^*$ ), sino que hay una vía de degradación adicional, que es su oxidación cuando le transfiere un electrón al  $W^+$ , recuperando de esta manera a W. Así también, encontramos que en péptidos la eficiencia de formación de  $Y_2$  es menor cuando los residuos de Y y W se encuentran a dos aminoácidos de distancia que cuando se encuentran contiguos.

#### Referencias

- 1) Cadet J., et. al., *Mutation Research*, **2005**, 571, 3-17
- 2) Prutz, W. A., Land, E. J., Sloper, R. W. J., *Chemical Society*, **1981**, 77, 281-292

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### CARACTERIZACIÓN Y FUNCIONALIZACIÓN DE SUPERFICIES DE MAGNETITA CON ÁTOMOS INDIVIDUALES Y NANOPARTÍCULAS DE PLATINO

Laviani Magali<sup>1</sup>, Benítez Guillermo<sup>1</sup>, Cometto Fernando<sup>2</sup> y Grumelli Doris<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

<sup>2</sup> Instituto de Investigaciones en Físicoquímica de Córdoba, Universidad Nacional de Córdoba. Ciudad Universitaria, Córdoba X500HUA, Argentina.

[magalilaviani@gmail.com](mailto:magalilaviani@gmail.com)

Las reacciones electroquímicas basadas en moléculas de la atmósfera se presentan como una solución prometedora a la creciente demanda de energía y el avanzado deterioro ambiental [1], aunque requieren del uso de catalizadores costosos para acelerar la velocidad de reacción. En busca de alternativas más eficientes y económicas, los catalizadores de átomos individuales (SAC, del inglés: *single atom catalysts*) han ganado importancia. Estos catalizadores se basan en la inmovilización de átomos metálicos individuales sobre soportes con baja o nula actividad catalítica, como los óxidos metálicos. Sin embargo, la reducción del tamaño del catalizador puede disminuir su estabilidad termodinámica, lo que lleva a la formación de clústeres menos activos. Para mitigar este problema, se utilizan sustratos que estabilizan a los átomos metálicos individuales, tales como superficies monocristalinas de magnetita ( $\text{Fe}_3\text{O}_4$ ) orientadas en 001, que al ser preparadas en condiciones de ultra alto vacío (UHV, del inglés: *ultra high vacuum*), mantienen una reconstrucción superficial estable para los SACs [2].

Por lo tanto, el objetivo de este proyecto es estudiar la respuesta electrocatalítica de SACs de Pt depositados sobre una superficies monocristalina de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  (001) para la reacción de reducción de oxígeno (ORR, del inglés: *oxygen reduction reaction*) en medio alcalino saturado con oxígeno (NaOH 0,1M). Para validar el efecto catalítico del tamaño de partícula, además, se depositaron nanopartículas de platino de 200 nm en magnetita mono- y policristalina a partir de una dispersión. La presencia, cobertura y naturaleza química del Pt se verificó con espectrometría de fotoelectrones emitidos por rayos X (XPS, del inglés: *X-ray photoelectron spectrometry*) y las propiedades cristalográficas de la superficie se analizaron con difracción de electrones de baja energía (LEED, del inglés: *low-energy electron diffraction*).

Resultados preliminares confirman la presencia del metal antes y después de la reacción electroquímica, ORR, para las deposiciones de Pt-SACs y Pt-NPs. Además, tanto la superficie funcionalizada con nanopartículas como con átomos individuales mostró una mejora significativa en la actividad catalítica para dicha reacción.

#### Referencias

- 1) Seh, Z.W., *Science*, **2017**, 355, eaad4998.
- 2) Bliem, R., *Science*, **2014**, 346 (6214), 1215-1218.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### NANOMATERIALES ORGANOMETÁLICOS FOTOACTIVOS BASADOS EN Hf CON POTENCIALES APLICACIONES EN SALUD

Gonik Eduardo, Cacciari R. Daniel y Gonzalez Mónica Cristina

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[gonik@quimica.unlp.edu.ar](mailto:gonik@quimica.unlp.edu.ar)

Comunmente, en terapia fotodinámica (TFD) se utilizan moléculas capaces de generar oxígeno singlete bajo irradiación. Sin embargo, la tendencia de estas moléculas a agregarse en soluciones concentradas y ambientes acuosos puede reducir su eficiencia fotoquímica. En este trabajo se propone la síntesis de nanomateriales organometálicos, basados en Hf y TCPP, para la formación de estructuras que eviten esta agregación, preservando sus propiedades fotoquímicas incluso a altas concentraciones.

Los materiales sintetizados presentaron una morfología esférica con un diámetro promedio de 150 nm, como se observó en las imágenes de microscopía SEM y HRTEM. Estas últimas también revelaron una capa difusa de material alrededor de las partículas, sugiriendo una posible redistribución del ligando TCPP o la presencia de una fase amorfa. Mediante EXAFS, se encontró que el Hf se podría encontrar en una estructura compatible con un clúster  $Zr_6O_8(H_2O)_8$ , lo que sugiere una integración efectiva del metal en la estructura.

El análisis térmico por TGA indicó una estequiometría clúster-TCPP de 1:1.5 en el bulk del material, mientras que el análisis superficial por XPS mostró una proporción de 3:1, lo que sugiere una mayor densidad de clústeres en la superficie o una interacción diferente del TCPP en esta región. Mediante experimentos de Láser Flash Fotólisis en presencia y ausencia de KI y O<sub>2</sub> se evidenció la existencia de un intermediario con un espectro idéntico al estado triplete de la porfirina de origen, pero con un tiempo de vida ampliamente superior, que, mediante ensayos en presencia de KI y O<sub>2</sub> no aparenta tener el comportamiento esperado para un triplete convencional. Medidas con sondas químicas revelaron un rendimiento cuántico de generación de oxígeno singlete de 0.7, valores que indican una alta eficiencia fotoquímica del material.

Se han logrado sintetizar materiales organometálicos basados en Hf y TCPP que han sido caracterizados tanto desde el punto de vista de la ciencia de materiales, como la fotoquímica y fotofísica. El material obtenido ha sido capaz de superar las limitaciones asociadas con la agregación de porfirinas en soluciones concentradas. La capacidad de estos nanomateriales para mantener una alta eficiencia fotoquímica, evidenciada por el elevado rendimiento cuántico de generación de oxígeno singlete, sugiere que pueden ser utilizados con éxito en aplicaciones de terapia fotodinámica. Sumado a esto último, el tamaño y morfología del material lo hacen apto para TFD.



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA



---

I N I F T A

## **XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024**

***Exposiciones de estudiantes de grado en la modalidad póster***

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### Estudio sobre la fotofísica de la interacción luminóforo-analito

Bancalari Tomás Ezequiel<sup>1</sup>, Ragone Fabricio<sup>1</sup>.

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) –  
Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.  
[bancalaritomasezequiel@gmail.com](mailto:bancalaritomasezequiel@gmail.com)

**Introducción:** El presente trabajo se presenta el estudio de la interacción entre el fluoróforo ReBiTio y antimonio en su forma  $\text{SbCl}_3$  en medio orgánico, empleando para esto técnicas espectroscópicas para el estudio de los estados excitados (LFF y Fluorescencia) y el estado basal (Absorción UV-Vis).

**Resultados:** La caracterización del sistema estudiado, basado en la asociación local del antimonio con el complejo, está dada en los N fenantrolínicos e imidazólicos<sup>[1]</sup>. En cuanto a las técnicas para el estudio del estado basal (Absorción UV-Vis), realizamos mediciones de ReBiTio en DMF en dos condiciones: ausencia total de analito y a una concentración de  $1,2 \cdot 10^{-4}$  M del mismo (Fig. 1), encontrando en primer lugar un corrimiento del máximo hacia el UV y en segundo la desaparición de un máximo local a 540 nm (asociado a una banda de transferencia de carga).

Para realizar el estudio de los estados excitados se llevó a cabo la técnica de Laser Flash Fotolisis (LFF), en la cual se empleó una solución de ReBiTio en DMF (Abs = 0,1 a 530 nm) a distintas concentraciones de  $\text{SbCl}_3$ .

Cuando la longitud de onda de excitación de láser corresponde a 530 nm se puede observar un cambio en la forma del espectro de emisión cuando aumenta la cantidad de  $\text{SbCl}_3$  (Fig. 2), corriendo su centro de 630 a 540 nm. Además, los transientes de emisión a 540 nm y 630 nm presentan tiempos de vida de 9,5 y 8,0 ns respectivamente, los cuales aumentan a 10,5 ns con el aumento del antimonio.

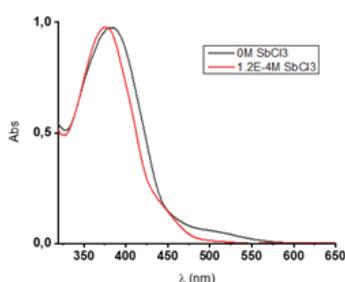


Fig. 1. Espectros de absorción del complejo a diferentes concentraciones de  $\text{SbCl}_3$ .

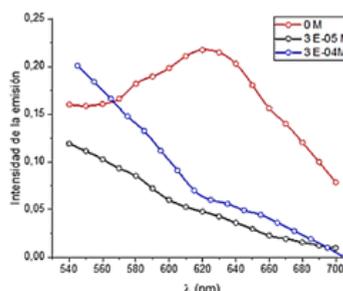


Fig. 2. Espectro del transiente de emisión del complejo ReBiTio en DMF con distintas concentraciones de  $\text{SbCl}_3$ ,  $\lambda_{\text{ex}}=530\text{nm}$

**Conclusiones:** Los estudios llevados a cabo indican que en el estado excitado del complejo conviven dos especies transientes que se desactivan por vías no radiativas, las cuales creemos asociadas a los estados excitados  $^3\text{IL}$  y  $^3\text{MLCT}$ . Estos aumentan su tiempo de vida como respuesta al aumento en la concentración de  $\text{SbCl}_3$ . Existe también otro transiente luminiscente asociado al estado  $^1\text{MLCT}$  cuya banda se desplaza a mayores energías producto de la interacción con el analito.

### Referencias

<sup>[1]</sup>Libro de Resúmenes XXIII Congreso Argentino de Fisicoquímica y Química Inorgánica 2023 Calafate, Argentina. DESARROLLO DE UN NUEVO OPTOSENSOR PARA LA DETECCIÓN DE As Y Sb.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### NUEVOS ANDAMIOS DEGRADABLES COMPUESTOS A BASE DE POLÍMEROS NATURALES Y POLVOS METÁLICOS PARA REGENERACIÓN DE TEJIDOS

Crespo Ferruscho Catalina, Fagali Natalia S. y Belluzo María Soledad

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[katacrespo50@gmail.com](mailto:katacrespo50@gmail.com)

#### Introducción:

La multiresistencia bacteriana es un desafío creciente en la salud global, según la Organización Mundial de la Salud (OMS) [1]. Esta problemática, derivada del uso inapropiado y excesivo de antibióticos, hace imprescindible el desarrollo de nuevos y más potentes antimicrobianos y/o de nuevas estrategias para su erradicación. En particular, en el tratamiento de infecciones óseas tales como la osteomielitis, los biofilms bacterianos representan un obstáculo significativo debido a la limitada penetración de antibióticos en el tejido y la alta incidencia de bacterias resistentes. La falla del tratamiento a menudo conduce a intervenciones quirúrgicas adicionales para desbridar abscesos y hueso necrótico, con reemplazo eventual del implante utilizando rellenos óseos y andamios [2].

En este trabajo se presenta la obtención de andamios biodegradables compuestos por dos polímeros naturales procedentes de la industria nacional (Quitano y Carboximetilcelulosa), reforzados con polvos comerciales de hierro, a fin de conferirle mayor resistencia al material y propiedades antimicrobianas. Los biomateriales se obtuvieron utilizando ultrasonido para su compatibilización, una metodología amigable con el medio ambiente, con distintos porcentajes (0-7%) de refuerzo. Se estudiaron la eficiencia de incorporación del polvo de refuerzo al material, sus propiedades superficiales (mediante microscopía electrónica de barrido) y sus propiedades mecánicas mediante ensayos por compresión.

#### Resultados y Conclusiones:

Los resultados indican que es posible la incorporación de estos refuerzos metálicos a los biomateriales, manteniendo la estructura y porosidad adecuada y mejorando las propiedades mecánicas del mismo, lo cual los convierte en una opción prometedora para la regeneración de tejido óseo.

#### Referencias

- 1) World Health Organization, <https://www.who.int/es/news/item/09-12-2022-report-signals-increasing-resistance-to-antibiotics-in-bacterial-infections-in-humans-and-need-for-better-data>, (n.d.).
- 2) Li, C., Renz, N., Trampuz, A. *Hip Pelvis*, **2018**, 30, 138–146.

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### MODELADO DEL COMPORTAMIENTO MAGNÉTICO DE PELÍCULAS MULTICAPAS CON FUERTE ANISOTROPÍA PERPENDICULAR

Grizzi Pablo A., Saracco Gustavo P. y Bab Marisa A.

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[grizziantonio@gmail.com](mailto:grizziantonio@gmail.com)

**Introducción:** Las heteroestructuras formadas por multicapas ferromagnéticas acopladas antiferromagnéticamente mediante espaciadores no-magnéticos, metamagnetos, han captado la atención de la comunidad científica por su amplia aplicabilidad, por ejemplo, en tecnologías de almacenamiento de datos o spintrónica. En particular, los metamagnetos que exhiben una fuerte anisotropía perpendicular al plano de las capas han sido descritos mediante un metamagneto de Ising, donde cada capa está formada por un número  $n$  de subcapas bidimensionales. Cuando se aplica un campo magnético externo  $h$  dirigido perpendicularmente al plano de la multicapa, su comportamiento depende fuertemente de si el número de capas  $C$  es par o impar. Si  $C$  es impar, en el estado fundamental a bajos  $h$  las capas ferromagnéticamente ordenadas se acoplan antiferromagnéticamente (fase AF). A  $h=2J/n$  se presenta una transición a la fase paramagnética (PM) donde los espines se orientan en dirección de  $h$  [1]. Si el número de capas es par aparece una fase intermedia (FI) en donde las capas extremas superior e inferior se alinean con el campo aplicado, en consecuencia, se producen dos transiciones: AF-FI y FI-PM. Este último ha sido extensamente estudiado, y se ha mostrado que para  $T>0$  la transición AF-FI es de primer orden y la FI-PM cambia de primer orden a continua en un punto tricrítico [1,2]. Además, las líneas de transición muestran fuerte dependencia con  $n$  manteniendo el número de capas fijo.

**Resultados y Conclusiones:** Los estudios reportados para metamagnetos de capas impares son escasos, tanto en el carácter de la transición AF-PM como en la existencia de un punto multicrítico y la dependencia del diagrama de fases ( $h$ - $T$ ) con el número de capas  $C$  y de subcapas  $n$  a  $T>0$ , y por lo tanto son temas abiertos. En este trabajo, se aborda el estudio del diagrama de fases de metamagnetos anisotrópicos con un número impar de capas entre  $C=3, 5, 7, 9$  y  $11$  con  $n=2$ . Se realizaron simulaciones Monte Carlo con condiciones de contorno periódicas en el plano y abiertas en la dirección del  $h$ . Se estudió la evolución dinámica hacia el equilibrio de las capas, observándose como las interfases afectan el acoplamiento con el campo  $h$ . Se definió el parámetro de orden se aplicó el estudio de la dinámica de tiempos cortos [3] para obtener la línea AF-PM correspondiente a los valores  $3.65 \leq T \leq 4.50$  y  $0 \leq h \leq 1.0$ , demostrándose que es continua e independiente de  $C$ . Se determinó que las transiciones son continuas y se caracterizaron por medio del cálculo de los exponentes críticos.

#### Referencias

- [1] Allbano E. V. Bab, M. A., Baglietto G., Borzi R., Grigera T. S., Loscar E., Rodriguez D. Rubio Puzzo M. L. and Saracco G. P., Rep. Prog. Phys 74, 026501 (2011).
- [2] Mayberry J., Tauscher K., and Pleimling M., Phys. Rev. B, 90, 014438 (2014).
- [3] Prudnikov P., Elin A., and Medvedeva M., J. of Phys. conf. series, 510, 012019 (2014).

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### LIOFILIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE PLATA COMO ESTRATEGIA PARA INCREMENTAR LA ESTABILIDAD Y POTENCIAR EL EFECTO ANTIMICROBIANO

Luis, Gabriela, Ghilini, Fiorela, Schilardi, Patricia y Urrutia, María Noel

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA) – Departamento de Química, Fac. de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET.

[gabrielalsoprانزetti@gmail.com](mailto:gabrielalsoprانزetti@gmail.com)

La liofilización de nanopartículas de plata (AgNPs) se presenta como una excelente opción para prolongar su estabilidad en el tiempo y potenciar su actividad antibacteriana, siendo de gran interés en las industrias alimenticia y médica.<sup>[1]</sup> Sin embargo, tanto la congelación previa como el proceso de liofilización en sí, puede afectar las propiedades fisicoquímicas y antimicrobianas de las AgNPs y por lo tanto, requerir el uso de agentes crioprotectores adecuados.<sup>[2]</sup> En este trabajo se evaluaron diferentes concentraciones de manitol y de dextrosa, empleados como compuestos crioprotectores, se optimizó el volumen final de las nanopartículas liofilizadas redispersadas en medio acuoso y se determinó la actividad antimicrobiana.

Se sintetizaron AgNPs <sup>[3]</sup> obteniendo dispersiones azuladas con  $\lambda_{\text{máx}} = 670$  nm y radio hidrodinámico de  $50 \pm 20$  nm, medido mediante dispersión dinámica de luz (DLS). Para evaluar la congelación de las AgNPs se prepararon muestras con y sin manitol o dextrosa, utilizando concentraciones entre 1% y 15% p/v de cada uno. Las muestras se mantuvieron a  $-80^\circ\text{C}$  por 24 h, se descongelaron y se sometieron a baño ultrasónico por 30 minutos, caracterizándose por UV-visible y DLS. Asimismo, se analizaron alícuotas de las dispersiones congeladas liofilizadas, luego de resuspenderlas en agua ultrapura hasta el volumen original. Además, se evaluó la resuspensión de las muestras en menores volúmenes a fin de obtener suspensiones más concentradas. Por otro lado, se estudió la estabilidad en caldo Müller-Hinton, caldo nutritivo y medio mínimo GMP de las AgNPs redispersadas, incubando durante 2 h a  $37^\circ\text{C}$ . También se evaluó su estabilidad a temperatura ambiente y a  $4^\circ\text{C}$ . Por último, se determinó un porcentaje de inhibición bacteriana enfrentando diluciones seriadas de las muestras a *Staphylococcus aureus*.

Las AgNPs sin crioprotectores cambiaron sus propiedades fisicoquímicas respecto a las AgNPs originales luego de la congelación y liofilización, y lo mismo se observó empleando manitol en todas las concentraciones. Las dispersiones con dextrosa 10% p/v y 12,5% p/v evidenciaron un tamaño de  $60 \pm 20$  nm y  $55 \pm 20$  nm luego de la congelación y de  $53 \pm 16$  nm y  $70 \pm 18$  nm luego de la liofilización, sin cambios significativos en la  $\lambda_{\text{máx}}$ . Además, las mismas dispersiones resultaron estables en todos los medios ensayados y presentaron inhibición bacteriana a partir de la quinta dilución.

Las actividades desarrolladas permitieron obtener AgNPs liofilizadas que podrían emplearse en materiales biomédicos y en preparaciones farmacéuticas con propiedades antimicrobianas.

#### Referencias

- 1) Chen, X.; Schluesener, H.J. *Toxicol Lett.* **2008**, 176 (1): 1-12.
- 2) Gokce, Y.; Cengiz, B.; Yildiz, N.; Calimli, A.; Aktas, Z.; *Colloids Surf A Physicochem Eng Asp*, **2014**, 462: 75-81.
- 3) Ghilini, F.; Rodríguez González, M.C.; Miñán, A.G.; Pissinis, D.; Hernández Creus, A.; Salvarezza, R.C.; Schilardi, P.L. *ACS Appl Mater Interfaces*, **2018**, 10 (28): 23657–23666.



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA



---

I N I F T A

## **XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024**

**TALLERES**



UNIVERSIDAD  
NACIONAL  
DE LA PLATA



I N I F T A

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### TALLER 1: ORGANIGRAMA INSTITUCIONAL

A cargo de la Dirección del INIFTA.

Coordinador: Dr. Félix Requejo

La idea de este taller es dar a conocer la organización interna del instituto, identificando a sus autoridades, personal administrativo, técnico y la integración de las diferentes comisiones que asesoran a las autoridades en diferentes temas. Se presentará a los responsables de cada área de trabajo, describiendo sus funciones, objetivos y localización.

contacto: [secretaria@inifta.unlp.edu.ar](mailto:secretaria@inifta.unlp.edu.ar)



I N I F T A

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### TALLER 2: VINCULACIÓN Y COMUNICACIÓN INSTITUCIONAL

A cargo de la Secretaría de Vinculación y Comunicación Institucional con la colaboración de miembros del Personal de Apoyo.

Coordinadora: Mg. M. Fernanda Santandreu

La Secretaría de Vinculación y Comunicación Institucional funciona como nexo entre el INIFTA y un cliente potencial. El objetivo es vincularse con empresas e industrias para desarrollar nuevos productos y mejorar procesos, encontrar soluciones innovadoras a sus problemas tecnológicos y lograr aplicarlas. También generar vínculos internamente, y con otros centros científicos-tecnológicos, unidades académicas y entidades gubernamentales.

La manera de transferir tecnología es a través de convenios colaborativos de I+D y Servicios Tecnológicos de Alto Nivel (STAN) de servicios y asesoramiento.

Los servicios que brindamos están relacionados con las 6 áreas de investigación (conversión y almacenamiento de energía, nanociencia y nanotecnología, materiales e interfases, cinética y fotoquímica, modelado y simulación en física, química y sistemas complejos, fisicoquímica orgánica y de sistemas biológicos) y talleres especializados en tornería, electrónica, informática y vitroplastía.

En el taller, se darán a conocer las diferentes técnicas que están disponibles en el instituto para todo el personal que quiera acceder a ellas, se explicará, de primera mano, de las personas encargadas de esos equipos. De esta manera se tendrá a disposición una cartera de servicios y conocerá al personal capacitado para brindarlos.

contacto: [sayd@inifta.unlp.edu.ar](mailto:sayd@inifta.unlp.edu.ar), [vinculacioninifta@gmail.com](mailto:vinculacioninifta@gmail.com)



I N I F T A

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### TALLER 3: ESPACIOS DE ATENCIÓN A LA VIOLENCIA LABORAL Y DE GÉNERO Y DE BIENESTAR

Coordinadora: Psicóloga Jessica Jara

Este taller tiene como objetivo la presentación de los Espacios de Atención a la Violencia Laboral y de Género y de Bienestar, a cargo de la profesional referente regional y agente de intervención de las dos áreas dependientes del CCT- La Plata-CONICET.

El Espacio de Atención a la Violencia Laboral y de Género se encarga de atender, como dice el nombre, situaciones de violencia que se den dentro de CONICET y con personal CONICET.

El área de Bienestar atiende situaciones de vulnerabilidad y de salud mental que generan desigualdades dentro del ámbito CONICET.

Este taller está destinado a difundir diversas herramientas relacionadas con la violencia y/o discriminación laboral y de género. Asimismo, poder disponer de un lugar para consultar sus deberes y derechos, y conocer a las personas a las que deben dirigirse en situaciones en las que no se sientan a gusto en el ámbito laboral.

contacto: [bienestar@laplata-conicet.gov.ar](mailto:bienestar@laplata-conicet.gov.ar)



I N I F T A

## XVI Jornadas de Tesistas del INIFTA 2024

### TALLER 4: SEGURIDAD E HIGIENE

A cargo de la Secretaría de Seguridad e Higiene y miembros de la Comisión de Seguridad e Higiene.

Coordinador: Bioq. Andrés Curto

En la presentación se abordarán diferentes aspectos relacionados con la Seguridad e Higiene en el ámbito laboral del Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA).

Inicialmente, se brindará información sobre la organización de este área en el Instituto, presentando a la Secretaría de Seguridad e Higiene y a la Comisión de Seguridad e Higiene, y su composición y funciones. A continuación, se presentarán los tópicos más relevantes relacionados con las normas de funcionamiento del instituto, el empleo de reactivos químicos y la gestión de los residuos comunes y especiales. También se dará información sobre acciones a llevar adelante frente a incidentes, presentando los aspectos más relevantes del plan de emergencia y evacuación, ubicación de kits antiderrame y extintores y teléfonos de contacto importantes ante accidentes.

Por último, se remarcará la importancia de la formación continua en temas vinculados a seguridad en el ambiente laboral y se invitará a los presentes a la lectura de las normas de funcionamiento para su toma de conocimiento.

contacto: [comisiondeseguridad@inifta.unlp.edu.ar](mailto:comisiondeseguridad@inifta.unlp.edu.ar)

