



FACULTAD DE
CIENCIAS
PONTIFICIA UNIVERSIDAD
CATÓLICA DE VALPARAÍSO



VI JORNADA DE INVESTIGACION EN CIENCIAS

Olmué, 2016



Programa

8:00 – 9:00 **Registro**
(Desayuno bufet)

9:00 – 9:15 **Palabras de Bienvenida**
Decana : Rosa Vera
Sacerdote : Bendición
(Conducción : Manuel Bravo-Pablo Lizana)

9:15 – 10:45 **Presentaciones Orales**

Explorando la Inmunidad desde el Holobionte: La Interacción Microbiota – Sistema Inmune en Bivalvos Marinos.
Paulina Schmitt Rivera. Instituto de Biología.

Propagación de Impulsiones Mecánicas en Medios Granulares 3D.
Francisco Santibáñez Calderón. Instituto de Física.

Develando la Estructura Molecular y Cristalina de la Materia
Mauricio Fuentealba Carrasco. Instituto de Química.

Astroestadística
Alejandra Christen. Instituto de Estadística.

10:45 – 11:15 Café--Votación Concurso “Dibuja un Científico”

11:15 – 12:45 **Presentaciones Orales**

Cosmología
Radouane Gannouji. Instituto de Física.

Formación de Profesores y el Conocimiento Especializado del Profesor de Matemáticas.
Diana Zakaryan. Instituto de Matemáticas.

Vectores Silvestres de la Enfermedad de Chagas en Chile: Aspectos Epidemiológicos y Evolutivos.
Ricardo Campos Soto. Instituto de Biología.

(Momento Cultural)

13:00 - 14:30 **Almuerzo** (límite de votación concurso de dibujos)

14:30 - 15:30 **Presentaciones Posters**

15:40 - 17:10 **Conversatorio: “Conocimiento Científico y su Impacto sobre la Sociedad”.**

Expositores: **Christian Nicolai Orellana**, Director Ejecutivo, Conicyt.

Jorge Babul Cattán, Presidente de Sociedades Científicas de Chile.

Joel Saavedra Alvear, Vicerrector de Investigación y Estudios Avanzados de la Pontificia Universidad Católica de Valparaíso.

17:10 Resultados Concurso
(café-once)

17:30 **Cierre**
(Conducción: Manuel Bravo-Pablo Lizana).

Expositores Invitados



Dr. Jorge Babul Cattán.

Dr. En Bioquímica, Universidad de Iowa, U.S.A, 1971. Profesor de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Chile, dentro de sus investigaciones, se encuentran las líneas de Enzimología, Estructura de Proteínas, Regulación Metabólica, Bases estructurales e importancia fisiológica de la regulación de la actividad de la fosfofructoquinasa-2 de *E. coli*.

Es también Presidente del Consejo de Sociedades Científicas de Chile, órgano que tiene como objetivo fomentar y propiciar la actividad científica chilena dentro del ámbito nacional e internacional. Procurando que tanto la ciencia como la tecnología se conviertan en instrumentos eficaces del desarrollo del país.



Ing. Christian Nicolai Orellana.

Es Ingeniero Civil Electricista de la Universidad de Chile y posee un Diplomado en Dirección de Empresas por la Facultad de Ciencias Económicas y Administrativas de la misma casa de estudios. Actualmente es Director Ejecutivo de CONICYT, cargo que desempeña desde marzo del 2015.

En los últimos años ha desarrollado una amplia actividad de consultorías y asesorías en Asuntos Regulatorios y Políticas Públicas en el ámbito de las Tecnologías de Información y Comunicaciones, Gestión en el Sector Público y Privado, Planificación Estratégica y Control de Gestión, tanto en Chile como en el extranjero.



Dr. Joel Saavedra Alvear.

Licenciado en Física Aplicada de la Universidad de Chile y Doctor en Física de la misma casa de estudios y realizó una Estadía postdoctoral en la Pontificia Universidad Católica de Valparaíso. Actualmente es Profesor Titular del Instituto de Física de la PUCV y además se desempeña como Vicerrector de Investigación y Estudios Avanzados.

Su trabajo científico se ha concentrado en el área de la gravitación y la cosmología. En particular, en la búsqueda de modelos cosmológicos provenientes de teorías de alta dimensionalidad y en el estudio de la física de agujeros negros, área a la cual ha contribuido con más de 40 publicaciones en los últimos diez años.



RESUMENES

VI JORNADA DE CIENCIAS

2016

PRESENTACIONES

ORALES

ASTROESTADÍSTICA

Alejandra Christen

Instituto de Estadística

Se describirán investigaciones de la línea de astroestadística del Instituto de Estadística.

Formación de profesores y el conocimiento especializado del profesor de matemáticas

Diana Zakaryan

Instituto de Matemáticas

La presentación se centrará en una de las líneas de investigación que desarrollamos en el Instituto de Matemáticas: formación de profesores. En esta ocasión se presentaran los principales aspectos que trabajamos de esta línea de investigación y particularmente, el modelo del conocimiento especializado del profesor de matemáticas (MTSK) y su implicación en la formación de profesores.

Explorando la inmunidad desde el holobionte: la importancia de la interacción microbiota – sistema inmune en bivalvos marinos

Paulina Schmitt Rivera

Instituto de Biología

¿A que nos referimos cuando hablamos de holobionte? Nos referimos a un concepto que propone cambiar el enfoque individual que tenemos de los organismos vivos, para entenderlos como asociaciones o sistemas biológicos. Todos los animales y plantas viven asociados con una diversidad de microorganismos, llamada microbiota, los cuales otorgan a sus hospederos características y capacidades específicas. Por esto, el término holobionte define al conjunto formado por un organismo multicelular complejo y todos sus microorganismos asociados como una sola entidad. Estos deben ser estudiados en conjunto para comprender sus características biológicas, ecológicas y evolutivas. Un área de estudio importante para comprender la interacción hospedador-microbiota es la caracterización de la respuesta inmune de los organismos. En este sentido, los bivalvos marinos que habitan en el medio acuático junto a una gran cantidad de microorganismos, los que incluyen tanto patógenos oportunistas como comensales, son un modelo ideal para comprender la interacción funcional desde el punto de vista del holobionte. En esta presentación se exponen algunos resultados obtenidos en el marco de la caracterización molecular de la respuesta inmune del ostión *Argopecten purpuratus*.

Vectores silvestres de la enfermedad de Chagas en Chile: Aspectos epidemiológicos y evolutivos.

Ricardo Andrés Campos Soto

Instituto de Biología

La dispersión biogeográfica de los patógenos zoonóticos y sus vectores asociados pueden proveer información crítica para el manejo, control y entendimiento de la dinámica epidemiológica de las enfermedades zoonóticas. La enfermedad de Chagas causada por el protozoo *Trypanosoma cruzi*, es una de las zoonosis mediadas por vectores más importantes en América. Es transmitida principalmente por hemípteros hematófagos de la subfamilia Triatominae, cuyos representantes en Chile son *Triatoma* y *Mepraia*. El género *Mepraia* cumple un importante papel en la transmisión de *T. cruzi* en el ciclo silvestre. Sin embargo, su distribución entre hábitat silvestre y peridoméstico, sus conductas de alimentación oportunista y el asentamiento humano en zonas de riesgo los hacen potenciales vectores para el hombre. Los vectores más ancestrales y silvestres han tenido un mayor tiempo de coevolución con el parásito y sus reservorios, manteniendo una circulación dinámica y permanente de infección, siendo un posible foco primario de transmisión al ciclo doméstico o hacia nuevos nichos ecológicos. Esta línea de investigación tiene un enfoque integrador y multidisciplinario, estudiando aspectos, biogeográficos, genéticos, evolutivos y epidemiológicos de la enfermedad de Chagas en su ciclo silvestres. Se ha Profundizado en la biogeografía y evolución de los vectores silvestres, su infectividad así como en la interacción parásito-hospedero. Para dichos estudio se han ocupado herramientas moleculares-evolutivas, moleculares-epidemiológicas e informáticas. En esta presentación se expondrán los principales resultados así como avances preliminares que aportan al entendimiento de esta compleja zoonosis.

Propagación de impulsiones mecánicas en medios granulares 3D

Francisco Santibañez C.

Instituto de Física

Resumen:

La propagación de impulsiones mecánicas en materiales granulares es un problema de gran interés y que está relacionado con diferentes áreas de la ciencia. La propagación de ondas sísmicas en la corteza terrestre y la disipación de la energía cinética de una bala en una bolsa de arena, tienen mecanismos físicos comunes que son examinados en este estudio. En esta presentación se mostrarán los últimos resultados experimentales obtenidos y se discutirá la validez de un modelo de disipación de nivel microscópico.

Cosmología Radouane Gannouji

Instituto de Física

La cosmología es el estudio de la evolución del universo. La teoría del Big Bang es el modelo cosmológico predominante para explicar esta evolución.

Voy a presentar algunas de las ideas del modelo estándar y los problemas que enfrentamos; la energía oscura y la materia oscura.

Develando la estructura molecular y cristalina de la materia

Laboratorio de Cristalografía PUCV

Mauricio Fuentealba

Instituto de Química

Como es sabido, la Difracción de Rayos-X (DRX) es la técnica fundamental para conocer la estructura de la materia y así correlacionar esta información con las propiedades a nivel macroscópico. Dentro de este contexto, la DRX de monocristales es la única técnica ampliamente utilizada para determinar la estructura cristalina y molecular de nuevos materiales. El año 2010, nuestro país contaba con un solo equipo de DRX de monocristal que tenía detector de área, el cual prestaba servicio a todas las Universidades de nuestro país. Gracias a que el año 2012 nuestra Universidad se adjudica fondos en el 1er Concurso FONDEQUIP instala el primer equipo de este tipo fuera de Santiago, un DRX BrukerQuest con un detector CMOS Photon 100 de última generación con fuente de Molibdeno.

En el Instituto de Química de nuestra Universidad existen varios grupos de investigación sobre compuestos con diferentes usos, tales como, Química Medicinal, Compuestos para Óptica No-lineal, Compuestos con Propiedades Spin-Crossover, etc. En todos estos casos, el conocimiento de la estructura cristalina es muy importante para hacer correlaciones entre ésta y sus propiedades, sin embargo, hoy en día los nuevos avances en DRX van un poco más allá de sólo la obtención de la estructura tridimensional y permite medir la configuración absoluta, medidas a diferentes temperaturas, determinación de densidad electrónica experimental, medidas en altas presiones, entre otras

En nuestro caso particular, estudiamos materiales con entrecruzamiento de espín (SCO, por sus siglas en inglés) los cuales son compuestos moleculares los cuales pueden conmutar su configuración electrónica entre dos estados en competición termodinámica, un estado de bajo-espín y un estado de alto-espín los cuales son estables a bajas y altas temperaturas, respectivamente. El cambio entre los dos estados es reversible, detectable y ocurre en respuesta a un estímulo externo que puede ser controlado, generalmente un cambio de temperatura, de presión o de irradiación con luz.¹ En general, el proceso de intercambio en el estado sólido es controlado por interacciones cooperativas intermoleculares. Por lo que, dilucidar la correlación de la estructura con las propiedades físicas es fundamental para la identificación de estas interacciones y para una mayor comprensión de los procesos que controlan el SCO. Por este motivo, nuestro laboratorio desarrolla el estudio de una serie de complejos con el propósito de obtener información acerca de las interacciones intermoleculares responsables de los efectos cooperativos entre los complejos, el contraión y/o las molécula de solvente de cristalización.

¹P. Gütllich, A. Hauser and H. Spiering, *Angew. Chem., Int. Ed.* **33**, 2024 (1994); P. Gütllich, Y. Garcia and H. A. Goodwin, *Chem. Soc. Rev.*, **29**, 419 (2000); P. Gütllich, *Struct. Bonding.*, **44**, **83** (1981); E. König, *Prog. Inorg. Chem.*, **35**, **527** (1987); A. Hauser, J. Jeftić, H. Romstedt, R. Hinek and H. Spiering, *Coord. Chem. Rev.*, **190-192**, **471** (1999).

² A. Tissot, R. Bertoni, E. Collet, L. Toupet, M.-L. Boillot, *J. Mater. Chem.* **21**, 18347 (2011).

PRESENTACIONES

POSTER

Diseño, Síntesis y Evaluación de las Propiedades Anticancerígenas de Nuevas "Moléculas Híbridas" Derivadas de Naftoquinonas / Naftohidroquinonas.

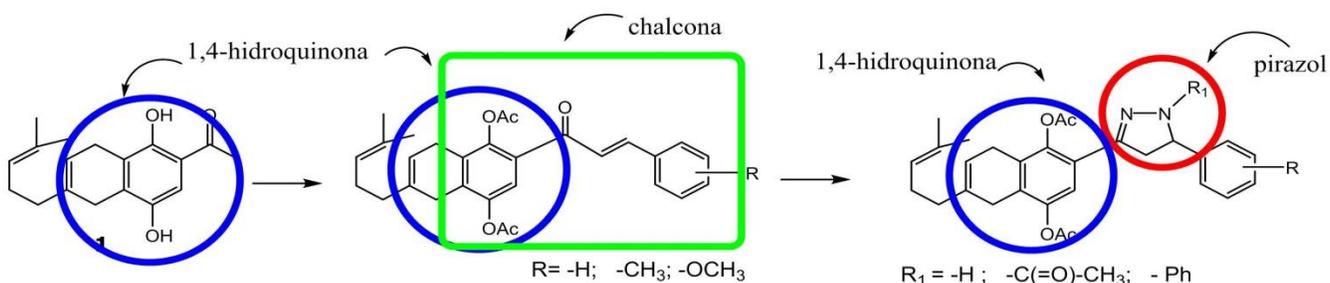
Laboratorio de Investigación de Síntesis Orgánica – Instituto de Química.
Aurora Molinari, Alfonso Oliva, Javier Maldonado, Sebastián Morales, Osvaldo Román.

El cáncer constituye uno de los problemas de salud pública más importante tanto en Chile y en el mundo, causando un gran impacto económico y social. Según la Organización Mundial de la Salud (WHO), se ha establecido que el cáncer es la principal causa de muertes en el mundo, con 14,1 millones de casos y 8,2 millones de muertes en el año 2012 y se prevé que para el año 2030, afectará a 27 millones de personas y causará 17 millones de muertes. En Chile, se atribuye a este mal el 25% de la mortalidad.

Actualmente, la quimioterapia es la principal estrategia empleada para tratar el cáncer, sin embargo, más de un 50 % de los pacientes sufren efectos laterales no deseados y generan resistencia a las drogas. Por lo anterior, es urgente desarrollar nuevos fármacos más selectivos, con menores efectos secundarios y con un alto índice quimioterapéutico. El Instituto Nacional del Cáncer (NCI), ha identificado a quinonas e hidroquinonas como unidades farmacofóricas importantes con actividad citotóxica en células tumorales, y su acción se atribuye a diversos mecanismos de acción, tales como inhibición de la enzima Topoisomerasa II y generación de estrés oxidativo. También, existen estudios en que compuestos, del tipo 1,3-diaril-2-propen-1-ona ("chalconas"), han presentado significativas propiedades quimioterapéuticas. Por otra parte, se sabe que la presencia de heterociclos nitrogenados como los pirazoles, indazoles, etc., en la estructura de fármacos antitumorales, les permite actuar como intercaladores en el DNA, favoreciendo su acción anticancerígena.

Actualmente, los esfuerzos para descubrir nuevos fármacos, se han orientado hacia la "**hibridación de drogas**". Esta es una estrategia en el diseño racional de fármacos basada en la combinación de dos o más fragmentos bioactivos unidos covalentemente, para originar las correspondientes "moléculas híbridas" o "moléculas conjugadas". Éstas presentan perfiles biológicos interesantes ya que impactan simultáneamente a distintos objetivos o receptores celulares, de forma que las acciones farmacológicas que originan cada fragmento pueden actuar de manera sinérgica y mejorar las propiedades de sus precursores.

Considerando lo anterior, en el **Laboratorio de Síntesis Orgánica**, hemos orientado nuestra investigación al desarrollo de nuevos compuestos potencialmente anticancerígenos, utilizando la estrategia de la "**hibridación de drogas**". Llevamos a cabo el diseño, síntesis y la determinación de la actividad citotóxica "in vitro" e "in silico" de una amplia variedad de derivados de naftohidroquinonas /naftoquinonas, conjugadas con diversas estructuras que han sido reportadas como farmacóforos importantes, entre ellos, los heterociclos nitrogenados y los sistemas carbonílicos α,β conjugados. Se han obtenido, una importante cantidad de nuevas moléculas que resultaron ser bioactivas, mostrando una significativa actividad antitumoral frente a diversos cultivos de células neoplásicas, presentando valores de IC_{50} en el orden nM y μ M.



Los investigadores agradecen el financiamiento de esta investigación a Proyecto DI-PUCV 039.331/2016; Beca CONICYT Doctorado J. Maldonado 21140688.

Efecto del Bacteriófago CHOED en la virulencia de *Vibrio anguillarum* PF4

M. León¹, C. Kokkari², P. Katharios² and Roberto Bastías¹

1. Laboratorio de Microbiología, Instituto de Biología, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile.

2. Instituto de Biología Marina, Biotecnología y Acuicultura, Centro Helénico de Investigaciones Marinas, Creta, Grecia.

La acuicultura es una de las industrias de producción animal con mayor crecimiento a nivel mundial, sin embargo, la intensificación de los sistemas de producción ha generado un aumento en las enfermedades infecciosas. Ante los problemas surgidos por el uso excesivo de antibióticos, se ha propuesto el uso de bacteriófagos líticos como una alternativa para controlar las infecciones bacterianas en peces. Sin embargo, antes de que esta tecnología pueda masificarse, aún existen algunos desafíos pendientes. Un ejemplo de esto, es el estudio de la virulencia de las bacterias resistentes que pueden proliferar luego del uso de bacteriófagos, aun cuando existen reportes que sugieren que la resistencia a fago estaría asociada a una reducción en la virulencia de las bacterias resistentes.

Vibrio anguillarum es una bacteria patógena que produce vibriosis en peces de importancia comercial. Recientemente se aisló un fago (CHOED) capaz de proteger *Salmo salar* de la vibriosis producida por *V. anguillarum*. En este trabajo se reportó la proliferación de bacterias resistentes al fago, sin embargo, se desconoce cómo este fago podría afectar la virulencia de estas bacterias. El objetivo de este trabajo es evaluar el Rol de bacteriófago CHOED en la virulencia de *V. anguillarum*, para ello se aislaron 61 mutantes resistentes al fago CHOED. Se seleccionaron 9 cepas y se analizaron diferentes factores de virulencia asociados a esta bacteria mediante técnicas microbiológicas clásicas. Ninguna de las cepas seleccionadas presenta diferencias en la producción de sideróforos, perfiles de LPS y proteínas de membrana externa, ni en su actividad hemolítica. Sin embargo, la cepa PF4-R8 es inmóvil, las cepas PF4-R1, PF4-R2, PF4-R3 y PF4-R9 poseen mayor actividad proteolítica y las cepas PF4-R1, PF4-R4 y PF4-R6 presenta un aumento en la producción de biopelícula. Además, las cepas PF4-R6, PF4-R7, PF4-R8 presentan una reducción en su crecimiento. El perfil bioquímico obtenido con el sistema BIOLOG GEN III MICROPLATETM reveló varias alteraciones en las cepas resistentes en comparación con la cepa parental; Sin embargo, no existe un patrón bioquímico común para todas las cepas estudiadas. Se realizó un ensayo de virulencia utilizando el modelo de larvas de dorada (*Sparus aurata*) que mostró que la cepa PF4-R8 presenta una marcada reducción en su virulencia, mientras que las cepas PF4-R4 y PF4-R7 no presentan alteración en comparación con la cepa parental. Las cepas PF4-R1, PF4-R2, PF4-R3, PF4-R5, PF4-R6 y PF4-R9 también presentan una virulencia menor que la cepa parental; Sin embargo, siguen siendo más virulentas que la cepa PF4-R8. Estos resultados sugieren que la resistencia al bacteriófago no está directamente asociada a la reducción en la virulencia, ya que las cepas resistentes tienen diferentes fenotipos y grados de virulencia.

Este trabajo demuestra la importancia, para el éxito del uso de bacteriófagos como antimicrobianos, de conocer en detalle la interacción específica fago-bacteria y desarrollar mecanismos alternativos para evitar la proliferación de bacterias resistentes.

Luisa Fernanda Quesada Romero
Instituto de Química

Nomophila indistinctalis es una especie polífaga, con una distribución en Chile desde la I - IX Región y la Isla Juan Fernández. Sus principales hospederos en el país son malezas de hoja ancha y remolacha (productora de azúcar). A partir de los extractos de hembra se ha podido establecer preliminarmente la identificación de la feromona sexual, identificando la presencia de compuestos como: E-11-hexadecenal, Z-11-hexadecenal y la mezcla de algunos hexadecadienales que aún están siendo corroborados.

Mecanismos de adaptación al frío en cepas psicrotolerantes de *Pseudomonas* aisladas en la isla Rey Jorge, Antártida chilena

**Jorge Andrés Olivares Pacheco
Instituto de Biología**

Las bajas temperaturas constituyen un desafío importante para la vida y son muchas las estrategias utilizadas por los organismos para contrarrestar este reto. Muchos estudios están centrados en la búsqueda de soluciones discretas presentadas por las bacterias, tales como la presencia de proteínas anticongelantes, pero se olvidan de los cambios en la fisiología. Entre estos cambios, el aumento de la expresión de dos tipos de proteínas son los más importantes: Las proteínas de shock térmico (CSPs) y las proteínas de aclimatación al frío (CAPs); las primeras sólo se expresan cuando ocurre una baja súbita de la temperatura, mientras que las segundas mantienen su expresión durante todo el episodio de baja temperatura. En el presente trabajo se logró demostrar que algunos de los fenotipos fundamentales de las bacterias están directamente relacionados con la sobre-expresión de las CAPs. En primer lugar, se calculó la velocidad de crecimiento de cada una de las cepas a diferentes temperaturas, y se estimó la temperatura óptima de crecimiento en 25°C, siendo clasificadas de esta forma como organismos psicrotolerantes. Otro de los fenotipos medidos fue la capacidad de formación de biopelículas a diferentes temperaturas. En ambos aislados la mayor capacidad de formación de biopelículas se ve observada a 4°C lo que se sustenta tanto en el aumento de la producción de alginato, como en la expresión de los genes que lo producen. Otro fenotipo que demostró dependencia de la temperatura fue la activación del sistema de quorum-sensing HdtS, ya que se comprobó que a bajas temperaturas la activación no depende de la densidad celular. Toda esta aparente reestructuración de componentes fundamentales en el funcionamiento del organismo, constituyen los verdaderos elementos adaptativos de una bacteria a las bajas temperaturas y quizás estos cambios fueron claves para la colonización de la Antártida por parte de los microorganismos.

El análisis del genoma de *Piscirickettsia salmonis* revela la presencia de diferentes genes que podrían explicar su comportamiento y patogénesis

**Fernando Andrés Gómez Carmona
Instituto de Biología**

Siendo *Piscirickettsia salmonis* uno de los patógenos de mayor impacto en la salmonicultura chilena, aspectos clave de su biología y patogénesis son desconocidos. La reciente secuenciación del genoma de varias cepas permite obtener información clave de genes relacionados con patogénesis y virulencia. Se identificaron genes estructurales del aparato del Sistema de Secreción Dot/Icm, así como también de efectores de virulencia exportados por éste. La sobreexpresión de estos genes a tiempos tempranos de infección, explica la rápida formación de una vacuola replicativa involucrando a clatrina y actina de la célula huésped.

Adicionalmente, se detectó la presencia de los genes involucrado en la biosíntesis flagelar, pudiéndose corroborar la expresión de éstos incluyendo flagelina (FlaA). Siendo *P. salmonis* inmóvil, este sistema podría actuar exportando de FlaA para la activación de TLR5 en células inmunitarias infectadas, lo que fue demostrado al exponer de macrófagos de *S. salar* a FlaA recombinante de *P. salmonis*. Además, se detectó una alfa-hemolisina, lo que podría explicar el efecto citotóxico de la bacteria. Se encontraron dos variantes de la chaperona Hfq (asociada a ARN pequeños), la cual se ha tiene un rol clave en la regulación de la expresión génica en bacterias. En *P. salmonis* ambos genes tienen una expresión diferencial, por lo que tal vez tengan diferentes funciones en la regulación de genes de virulencia y/o estrés. Estos genes, además de otras toxinas explicarían la alta virulencia *P. salmonis* y su capacidad de evadir la respuesta inmune, generando una infección rápida y difícil de controlar.

Marcelo Alejandro Verdugo Cáceres
Instituto de Química

El empleo masivo de antimonio sistemas de freno vehicular, ha generado la contaminación de centros urbanos, presentándose generalmente en material particulado. Este material puede entrar fácilmente por las vías respiratorias, ingresando Sb a la sangre, donde luego puede generar desde irritación cutánea, úlceras estomacales hasta cáncer de hígado, pulmón y riñones, como ha sido encontrado en humanos debido a exposición laboral. Los mecanismos de citotoxicidad pueden abarcar procesos como generación de estrés oxidativo, aberraciones al ADN y agregación proteica, donde se sabe que metales pesados y metaloides presentan un rol fundamental en la etiología de enfermedades. En estos mecanismos, los principales factores a estudiar son las rutas de ingreso, vías metabólicas e interacción del agente contaminante con macromoléculas (por ejemplo, ADN y proteínas).

En el medio celular Sb(III) y As(III) se encuentran como Sb(OH)₃ y As(OH)₃, respectivamente. Estas especies pueden ingresar a células por medio del canal AQP9 en mamíferos, la función de este canal es permitir el ingreso de glicerol, urea y agua a la célula, lo que también puede ocurrir con partículas de similar tamaño y características químicas, como lo son las especies trivalentes de estos metaloides. Por otro lado, se encuentran Sb(V) y As(V), que presentan mayores diferencias a pH fisiológico. As(V) se encuentra como HAsO₄²⁻ y puede ingresar por transportadores de ión fosfato Pho84p y Pho98 (HPO₄²⁻ a pH fisiológico); no es el caso de Sb(V), el que se encuentra como [Sb(OH)₆]⁻ dentro de la célula. Además, existen diferencias metabólicas como es la biometilación, proceso que ha sido evidenciado para As en humanos y no para Sb. En relación a efectos sobre proteínas, se conoce que As(III) y As(V) genera agregación de proteínas, lo que no ha sido evidenciado para Sb.

En general, la interacción de metales y metaloides con proteínas puede generar alteraciones redox en puentes disulfuro e intercambio de grupos sulfhidrilos en la estructura de éstas, generando pérdida de la estabilidad de la estructura nativa y con ello su funcionalidad. Existen diversas técnicas para el estudio de la estructura de proteínas que en general emplean etapas de pretratamiento fuertes que pueden inducir cambios en la estructura de proteínas y no pueden ser aplicadas en células vivas. La técnica fluorescence recovery after photobleaching (FRAP) permite el estudio de movilidad molecular y las interacciones proteína-proteína en células vivas, sin generar daño aparente en la estructura celular. Este análisis se lleva a cabo por la medición de la recuperación de fluorescencia de un marcador fluorescente luego de una etapa de fotoblanqueo en una pequeña región de la célula de interés (ROI).

En este trabajo se realizó el estudio de agregación de proteínas en células embrionarias de riñón humano (HEK-293) en presencia de las especies inorgánicas de Sb y As, usando como marcador a proteína verde fluorescente mejorada (EGFP). De esta forma se pudo determinar que Sb y As generaron una disminución de la cinética difusional de EGFP en HEK-293 en términos de fracción móvil, constante de difusión y constante de disociación de agregados, siendo más intenso el efecto en presencia de As(III). Este efecto muestra la existencia de diferencias en la toxicidad de Sb y As, lo que se relaciona con efectos ya constatados por exposición de estos elementos a humanos.

NICOLE SOLEDAD BRIONES SILVA
Instituto de Química

Las nano-estructuras de ZnO se han convertido en uno de los materiales clave en la búsqueda de aplicaciones fotovoltaicas avanzadas. Estas nano-estructuras corresponden a una alternativa interesante para su uso en celdas fotovoltaicas debido a su gran área de contacto cuando forman parte de una hetero-juntura n-p.

La electrodeposición permite obtener nano-estructuras de ZnO. El medio de solvatación más estudiado es el acuoso. La electrodeposición en este medio produce estructuras discontinuas, mientras que cuando se utiliza un disolvente no acuoso, se obtienen películas extremadamente lisas y continuas, lo que repercute en una alta difusividad de la luz.

Considerando las propiedades similares a otros solventes ya utilizados y teniendo en cuenta que no existen estudios sistemáticos del uso del dietilenglicol (DEG), este solvente se utilizará como medio de reacción.

De esta manera, el objetivo de este trabajo fue desarrollar un estudio relativo a la formación electroquímica de nano-estructuras de ZnO obtenidas a partir de un medio orgánico de reacción con miras a su uso como capa ventana tipo-n en celdas solares de alta eficiencia.

Se realizaron estudios de los procesos electroquímicos de los precursores y sus variables experimentales; temperatura, concentración y potencial. Una optimización de los parámetros experimentales para la obtención de películas delgadas y de nano-estructuras de ZnO las que fueron caracterizadas usando espectroscopía de UV-visible, difracción de Rayos-X (XRD), microscopía electrónica de barrido de emisión de campo (FE-SEM) y de fuerza atómica (AFM).

Como resultado, se determinó que las películas delgadas presentaron un carácter amorfo con un valor de E_g de 3,53 eV hecho que pudo ser corroborado a través de los patrones XRD. La caracterización del depósito mostró que está compuesto de islas piramidales que permanecen fuertemente adheridas en la superficie del sustrato.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOESTRUCTURAS DE PIRITA (FeS₂) FORMADAS A TRAVÉS DE UN MÉTODO MIXTO ELECTROQUÍMICO E HIDROTÉRMICO

César Emilio Vásquez Caro
Instituto de Química

El di-Sulfuro de Hierro o Pirita, ha recibido una importante atención debido sus propiedades como material semiconductor. Este material no tóxico presenta propiedades como: i) Capa absorbente activa en celdas solares y en celdas foto-electroquímicas, todo esto a gran escala [1]. ii) Puede ser de tipo-n o tipo-p dependiendo del método de síntesis. iii) Presenta estructura cúbica. iv) Tiene un valor de Band gap de $E_g \text{ FeS}_2 = 0.95 \text{ eV}$ [2]. v) Un elevado coeficiente de absorción de luz ($\alpha > \nu 10^5 \text{ cm}^{-1}$ para un $h > 1.3 \text{ eV}$). A pesar de lo anterior, en bibliografía no existen estudios sistemáticos para la obtención por vía electroquímica de este material. Los sistemas acuosos estudiados sólo llevan a la formación de FeS el cual, requiere de un proceso de sulfurización a vacío para la formación de FeS₂. Por otro lado, la síntesis de este material presenta complicaciones debido a la formación de fases indeseadas las cuales disminuyen su eficiencia cuántica. En este trabajo nosotros mostramos la preparación y caracterización de FeS₂ obtenido a través de un proceso en dos pasos: a) deposición electroquímica desarrollado en una solución que contiene DEG [3], tiourea (TU) y Fe (II) como precursores a 80 °C, b) hidrotérmico [4], desarrollado en un horno-microondas con Na₂S y FeCl₃ a 160°C. Las muestras fueron caracterizadas a través de SEM, AFM, XRD, y RAMAN. La caracterización realizada muestra que se obtiene una mezcla polifásica constituida por Pirita, Troilita y Marcasita, estas dos en menor proporción. Estos resultados corresponden a un avance en la obtención de Pirita en medio orgánico y posicionan al proceso hidrotérmico como una alternativa a la sulfurización, esto se evidencia en el cambio de las características ópticas ($E_g = 0,84 \text{ eV}$) y morfológicas del depósito obtenido.

Entre las proyecciones de la línea de investigación se encuentra en curso el trabajo de Síntesis y caracterización de FeS₂ obtenido por método de micelas inversas.

1. J. Puthussery, S. Seefeld, N. Berry, M. Gibbs, and M. Law, J. Am. "Colloidal iron pyrite (FeS₂) nanocrystal inks for thin-film photovoltaics"; Journal of the American Chemical Society, Vol. 133 (2011), p. 716-719
2. A.J. Clayton, S.J.C. Irvine, V. Barrioz, W.S.M. Brooks, G. Zoppi, I. Forbes, K.D. Rogers, D.W. Lane, K. Hutchings, S. Roncallo, "Metal-organic chemical vapor deposition of ultra-thin photovoltaic devices using a pyrite based p-i-n structure"; Thin Solid Films, Vol. 519 (2011), p. 7360-7363.
3. A.S. Arico, V. Antonucci, P.L. Antonucci, E. Modica, S. Ferrara, N. Giordano, "Electrodeposition and characterization of iron sulphide thin films"; Materials Letters, Vol.13 (1992), p. 12-17
4. X. Qiu, M. Liu, T. Hayashi, M. Miyauchi and K. Hashimoto, "Solution-based synthesis of pyrite films with enhanced photocurrent generation"; Chemical Communications, Vol. 49 (2013), p. 1232-1234.

ESTUDIO ESTRUCTURAL DE COMPLEJOS DE Fe(III) CONTENIENDO LIGANDOS HEXADENTADOS BASE DE SCHIFF



David Villaman Figueroa
Instituto de Química

Desde la pasada década diversos grupos de investigación [1a] han estudiado las propiedades ópticas, magnéticas y estructurales de complejos con esfera de coordinación del tipo $[\text{FeN}_4\text{O}_2]$ y $[\text{FeN}_4\text{O}_2]^+$ conteniendo ligandos base de Schiff. Estos complejos han presentado estados de High-Spin (HS), Low-spin (LS) o Spin-Crossover (SCO). Este último estado permite el desarrollo de nuevos materiales moleculares biestables[1b].

Con estos antecedentes en mente se propuso estudiar las propiedades estructurales en complejos de Fe(III), por consiguiente, se efectuó la síntesis con ligandos hexadentados base Schiff del tipo N_4O_2 [2]. La síntesis template se realizó mezclando salicilaldehído sustituidos (Br [1]+, Cl [2]+) en posición 5, con 1,2-Bis(3-aminopropilamino) etano. La obtención de monocristales se realizó por difusión lenta de éter dietílico sobre una solución saturada del complejo en metanol o por evaporación lenta de una solución saturada del complejo en metanol.

El análisis de las estructuras cristalinas se realizó por difracción de rayos X de monocristal, para los complejos mostrando grupos espaciales quirales $P2_1$, en donde se observa el enantiomero Λ (λ) para cada estructura. Por otro lado, para el complejo con solvente, se reveló el grupo espacial centro simétrico $C2/c$. Con el fin de recopilar información sobre las interacciones intermoleculares, se realizaron las superficies de Hirshfeld, mostrando los efectos cooperativos intermoleculares entre los complejos de Fe(III), el contraión y/o la molécula de solvente, para ello se utilizó el software Crisalexplorer[3].

Referencias: [1] a) Zhang, L.; Xu, G.-C.; Xu, H.-B.; Zhang, T.; Wang, Z.-M.; Yuan, M.; Gao, S. Chemical communications (Cambridge, England) 2010, 46, 2554–2556 b) Gamez, P.; Costa, J. S.; Quesada, M.; Aromí, G. Dalton transactions (Cambridge, England: 2003) 2009, 7845–7853.
[2] R.Pritchard, S.A.Barrett, C.A.Kilner, M.A.Halcrow (2008) Dalton Trans., 3159.

GASTÓN CARVALLO BRAVO
Instituto de Biología

En este trabajo se presentan los ámbitos de investigación del laboratorio de Ecología Vegetal, del Instituto de Biología, los que están relacionados con describir las propiedades y estructura de las comunidades de plantas de Chile central, evaluando los factores que dan cuenta de su composición taxonómica, filogenética y funcional, contribuyendo al conocimiento del patrimonio natural de nuestro país en un contexto de cambios ambientales mediados por humanos. Específicamente, la investigación desarrollada se guía por dos principios: (i) analizar la Biodiversidad proponiendo y evaluando experimentos, modelos y teorías que permitan entender la relación y dinámica de sus componentes; (ii) generar información de sistemas Ecológicos que se relacionan y contribuyen con el bienestar humano. Los sistemas de estudio corresponden a especies, poblaciones, comunidades y ecosistemas de Chile central, considerado uno de los 34 puntos calientes o hotspot de diversidad biológica reconocido a nivel mundial [Nature 403, 2000] por el alto nivel de endemismo de sus especies, esto quiere decir, está habitado por especies exclusivas y propias de esta región del planeta, aunque una alta proporción de sus ecosistemas han sido degradados (> 70%). Sin embargo, se desconoce profundamente cuál es rol de las especies y sus interacciones sobre el funcionamiento de las comunidades y ecosistemas, además de los potenciales servicios que prestan a las poblaciones humanas.

Ricardo Andrés Campos Soto
Instituto de Biología

La distribución actual de las especies y sus poblaciones es el resultado de múltiples procesos biogeográficos y evolutivos. Estos diversos procesos evolutivos dejan señales en el genoma de las poblaciones. La principal línea de este laboratorio es pesquisar estas señales e integrarlas con los diversos procesos geológicos con el fin de reconstruir la historia de las poblaciones que las llevo a su actual distribución. Este conocimiento es aplicable a la Taxonomía, zoología, epidemiología de reservorios y la evolución. En este póster mostraremos resultados preliminares bajo una especie de insecto y dos de reptiles utilizadas como modelos de estudio y se discutirá su importancia Taxonómica, biogeográfica y epidemiológica.

Estudio de la eliminación de derivados de pesticidas en matriz acuosa, mediante adsorción sobre carbón activado con diferentes contenidos metálicos de níquel y plata.

**Camila Fernanda Matus Corral
Instituto de Química**

Los compuestos nitroaromáticos han sido detectados en diferentes efluentes líquidos, ríos y suelos tratados con pesticidas. En general muchos de estos compuestos se encuentran clasificados por la agencia de protección ambiental (EPA) como contaminantes prioritarios debido a su elevada toxicidad acoplada relativamente a largos tiempos de vida y escasa biodegradabilidad. Por esto se estudió la eliminación de 4-Nitrofenol (4-NF), 2,4-dinitrofenol (2,4-DNF), 4,6-dinitro-2-metilfenol (4,6-DN-2-MF) en matriz acuosa mediante el método de adsorción en sistema batch utilizando carbón activado (CA) como soporte y modificado a diferentes contenidos de níquel (Ni) y plata (Ag). Las muestras de Ni(x) y Ag(x) (x= 2, 4, 6%), soportadas en CA se prepararon por impregnación húmeda, posteriormente fueron secadas a 100°C por 12 horas, siendo finalmente calcinadas a 300°C por 4 horas. Estas muestras se caracterizaron mediante adsorción – desorción de N₂, acidez superficial y migración electroforética (ME). La determinación de la adsorción de estos nitrofenoles se realizó en un sistema batch con agitación durante 8 horas, considerándose que todas las muestras recolectadas fueron medidas en un espectrofotómetro Shimadzu UVmini-1240 a una longitud de onda de 318 nm (4-NF), 359 nm (2,4-DNF) y 370 nm (4,6-DN-2-MF). La determinación de la capacidad de adsorción se calculó a partir de la diferencia de concentración registrada en relación a la concentración inicial de 20 ppm. Los resultados indican que la capacidad de adsorción no presenta cambios significativos al comparar por sistema batch a diferentes contenidos metálicos. Sin embargo, si hay una dependencia de la capacidad de adsorción en relación al metal impregnado, donde los mejores resultados se observan para el níquel a un contenido metálico de 2%.

Desarrollar un Método Analítico para Estudiar la Distribución y Cambios Químicos de Sb(III), Sb(V) y NMG-Sb(V) en Cultivo Primario Renal y de Bazo y sus Efectos Tóxicos Asociados

Nicole Roldán^{1,2}; Alexis Gonzalez², Waldo Quiroz¹

1) Laboratorio de Química Analítica y ambiental, Pontificia Universidad Católica Valparaíso, Valparaíso, Chile;

2) Laboratorio de Química Biológica, Pontificia Universidad Católica Valparaíso, Valparaíso, Chile

e-mail nicole.roldan.m@gmail.com

La contaminación ambiental y la Leishmaniasis son las principales fuentes de antimonio (Sb). Dentro de las primeras se destacan las actividades antropogénicas, las concentraciones de Sb reportadas en el aire fluctúan entre 1-170 ng mL⁻¹ [1]. Cabe destacar que individuos expuestos a faenas mineras presentan niveles de Sb anormalmente altos en orina [2]. Con respecto a las segundas fuentes de ingreso, se tienen dos medicamentos, cuyos nombres son: Glucantime y Pentostam. Ambos contienen antimonio (V) ya que se cree que éste metaloide ayuda a la apoptosis del parásito que causa dicha enfermedad, mediante 2 modelos propuestos por Frezard y colaboradores en el año 2008.

Hasta la fecha se han utilizado diversas metodologías analíticas para determinar y cuantificar Sb(V), Sb(III) y NMG-Sb(V) tanto en el medicamento como en matrices biológicas, entre ellas cromatografía de intercambio iónico. Sin embargo los trabajos existentes, evidencian que aún faltan mejoras en el método propuesto para desarrollar esta interrogante, como por ejemplo la separación simultánea de las especies de antimonio (tanto orgánicas como inorgánicas) en Glucantime, ya que se han encontrado que los estudios relacionados evidencian que las especies eluyen en el tiempo muerto, además de una baja resolución entre las especies; además de lo anterior se requiere considerar evaluar las transformaciones químicas de las especies de Sb en la misma matriz ya que se debe tener en consideración que posiblemente se podría reducir la especie inorgánica de Sb(V) haciendo que los resultados de esta última se encuentren subestimados.

Por otro lado, existe una evidencia empírica que luego del consumo de la droga de Sb pentavalente, el Sb total se distribuye principalmente en el bazo y en el riñón; sin embargo, aún falta considerar estudios que demuestren los efectos tóxicos de estas especies de antimonio en estos sistemas celulares. Con respecto a este último punto se deberían considerar las especies de Sb (Sb(V), Sb(III) y NMG-Sb(V)) y sus efectos secundarios por separado en los sistemas celulares antes mencionados. Para ello en este trabajo se evaluará tanto a nivel proteico como RNAm marcadores de fibrosis, apoptosis y se evaluará la morfología de estas células con el objetivo de evidenciar efectos secundarios provocados tanto por el consumo de Glucantime como también los que causarían las especies de este metaloide ingresado al organismo por fuentes antropogénicas. Además de lo anterior y sumado a que el Sb(V) produce cambios redox en otros sistemas celulares, se analizarán los cambios redox que produciría esta especie en los sistemas celulares anteriormente mencionados.

Actualmente la IARC no puede clasificar al antimonio como carcinogénico, ya que aún faltan estudios para determinar esta afirmación. Con el objetivo de ayudar a demostrar que el Sb puede ser más dañino de lo que se cree hasta el momento, en este trabajo se evidenciará si el metaloide forma complejos con el DNA ya que de esta manera se recolectará información necesaria para demostrar nuestra hipótesis.

Por lo tanto, este trabajo es novedoso ya que al determinar las distintas especies de Sb provenientes de fuentes antropogénicas y médicas a las que el ser humano se encuentra expuesto, proporcionaría la información necesaria para evaluar los posibles efectos que tiene sobre ciertas células las distintas especies de Sb. Junto con lo anterior, se destaca que la formación de complejos Sb-DNA (in vitro) será la primera evidencia mostrada en la literatura.

Agradecimientos: FONDECYT 11150528

[1] J. Tan, J. Duan, N. Zhen, K. He, J. Hao, Atmos. Res., 167 (2016) 24-33.

[2] W. Quiroz, H. Arias, M. Bravo, M. Pinto, M.G. Lobos, M. Cortés, Microchemical Journal, 97 (2011) 78-84.

Remoción de compuestos contaminantes provenientes del petróleo (azufrados y nitrogenados) sobre óxidos y sulfuros de Mo y W, modificados con Ni y Co, soportados en alúmina

**María Fernanda Ramírez Becerra
Instituto de Química**

La quema de combustibles fósiles y de biomasa es la fuente más importante de contaminantes atmosféricos tales como SO₂, CO y ciertos óxidos nitrosos conocidos colectivamente como NO_x. El petróleo puede contener hasta un 10% de azufre, es por eso que las normativas ambientales y las tecnologías en los procesos del crudo se centran en reducir o eliminar dichos contaminantes.

El proceso convencional utilizado actualmente (HDS), utiliza catalizadores de Ni-Mo/ γ -Al₂O₃, Co-Mo/ γ -Al₂O₃, o Ni-W/ γ -Al₂O₃; bajo condiciones de operación elevadas: temperaturas entre 300 - 400°C y presiones de H₂ entre 20 - 100 atm. Estas condiciones disminuyen el índice de octanaje. Además, los compuestos de nitrógeno son fuertes inhibidores de la reacción de HDS, debido a su adsorción preferencial, envenenando los catalizadores. Por ello, la remoción de estos compuestos es de gran importancia para cumplir las especificaciones de combustible diesel de bajo azufre (ULSD) y así contribuir con la protección del medio ambiente.

Se estudió la remoción de Tiofeno (T), Dibenzotiofeno (DBT), 4,6-Dimetildibenzotiofeno (4,6-DMDBT), Quinolina (Qy) y Carbazol (Car), mediante la técnica de adsorción sobre catalizadores de Mo, W, Ni, Co, Ni-Mo y Co-Mo, soportados en γ -Al₂O₃, en su forma oxidada y sulfurada. Los adsorbentes monometálicos se prepararon mediante impregnación húmeda y los bimetálicos por impregnación sucesiva. La sulfuración se realizó con un flujo continuo de H₂S/N₂ al 10% a 300°C por 4h. Los adsorbentes se caracterizaron por: adsorción-desorción de N₂ (BET), migración electroforética (ME), determinación del contenido de azufre (%S₂) y fuerza ácida (FA). Las caracterizaciones confirman la formación de los óxidos metálicos de Mo y W con una mayor dispersión de Mo sobre el soporte. Los estudios de adsorción se realizaron con muestras sintéticas de 500 ppm de cada una de las moléculas por separado en 2-etoxietanol a un flujo de 0,5 mL min⁻¹. Los adsorbentes oxidados presentaron mayores capacidades de adsorción que los sulfurados, debido a la posibilidad de adsorción mediante el par electrónico antienlazante del azufre y del nitrógeno (para moléculas de carácter básico), sobre las vacancias positivas presentes en los óxidos metálicos de Mo y W. Los resultados de contenido de azufre indican que posiblemente las vacancias fueron sustituidas por el azufre en vez de intercambiarse al oxígeno de los óxidos metálicos presentando en la mayoría de los casos porcentajes de azufre mayores a los determinados teóricamente. La presencia de Ni y Co favorece el mecanismo de adsorción planar, mediante retrodonación electrónica entre metales de la primera serie de transición y los anillos aromáticos ya que se observan mayores capacidades de adsorción en las moléculas con mayor aromaticidad y a su vez más impedidas estéricamente.

Diseño de complejos metálicos que contienen grupos tiofenilo como precursores de metalopolímeros:

Guillermo Andres Ahumada Toro

Instituto de Química

Los complejos metálicos ofrecen una alta versatilidad de aplicaciones en diferentes áreas, en los últimos años, estos han ganado importante atención, especialmente, en el área de los polímeros que contienen centros metálicos, debido principalmente a sus potenciales aplicaciones. Incorporando un centro metálico a una macromolécula (polímeros), las propiedades físico-químicas del material resultante pueden ser modificadas por el complejo metálico presente.

Dentro de las vías para obtener metalopolímeros, la electropolimerización ofrece diferentes ventajas en comparación con técnicas comunes de polimerización, es importante señalar que el respectivo complejo metálico debe estar unido a un grupo electropolimerizable para actuar como unidad monomérica, por ejemplo, grupos tienilos.

Nuestros actuales esfuerzos de investigación se han centrado en la síntesis de complejos metálicos funcionalizados con grupos tiofenilo. En el presente trabajo mostraremos la síntesis y caracterización de complejos metálicos para ser usados como precursores para la síntesis de polímeros que contienen centros metálicos por la vía de la electropolimerización.

Juan Carlos Ahumada Castillo
Instituto de Química

Durante los últimos años los polímeros conjugados han tenido un gran auge por su aplicación en la fabricación de diversos dispositivos electrónicos. Este interés radica en el bajo costo de fabricación de estos materiales, peso ligero, flexibilidad mecánica y por la modulación de las propiedades químicas de ellos mediante cambio en su estructura [1]. En la actualidad la investigación de este tipo de sistemas orgánicos está enfocado en obtener nuevos materiales con bajo bandgap, siendo los que han obtenido mejores resultados aquellos que incorporan, dentro de la cadena polimérica, distintos fragmentos con diferentes densidades electrónicas, conocidos como sistemas del tipo push/pull [2]. En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización (RMN, Masas) de tres distintos monómeros en base a tiofeno y benzodioxazol, como también la electropolimerización, estudio morfológico (SEM), espectroscópico (Raman) y propiedades ópticas (UV-Vis) de los polímeros depositados

Polímeros Conductores: síntesis, caracterización y electropolimerización de copolímeros de carbazol y etilendioxitiofeno

Cindy Escalona, Juan Soto, Felipe Gallardo, Juan Ahumada.

Instituto de Química

Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Avda. Universidad 330, Curauma, Valparaíso Chile,

Diversas investigaciones han propuesto que la formación de un polímero conductor con fragmentos donador-aceptor (D-A), fomenta la distribución electrónica en el polímero resultante 1, viéndose reflejado en un aumento en el rango de absorción de la radiación 2 lo que lo hace altamente atractivo como material en la fabricación de fotoceldas solares 3. Además, al realizar la copolimerización se logra que propiedades como la alta conductividad, solubilidad y estabilidad de los respectivos homopolímeros se combinen e idealmente se potencien.

Marlene Natalia Arismendi Macuer
Instituto de Química

El Instituto Nacional del Cáncer (INC) ha identificado a los derivados quinónicos/hidroquinónicos como importantes elementos farmacofóricos para la bioactividad y en base a propiedades estructurales y biológicas se ha considerado que las estructuras de importancia en química medicinal son las 1,2 y 1,4 naftoquinonas/naftohidroquinonas debido a sus numerosas bioactividades tales como antibacterianas, fungicidas, antitumorales, entre otras [1]. Con estos antecedentes, nuestro grupo de investigación realizó trabajos previos enfocados en la síntesis, caracterización y evaluación citotóxica de una serie de nuevos derivados del tipo 1H-benzo[f]indazol-4,9-dionas, que contienen en su estructura pirazoles-N-sustituídos fusionados a la unidad naftoquinónica [2]. Las 1H-benzo[f]indazol-4,9-dionas **2** (R = -H; -CH₂CH₂OH; -CH₂CH₂OAc) son utilizadas como sustrato de partida, el cual se obtiene por una reacción de ciclación directa de la 2-acetil-6-(4-metil-3-pentenil)-1,4-naftoquinona **1** con hidracinas, trietilamina y ácido acético glacial como catalizador [3]. Con el objetivo de dilucidar el posible mecanismo de reacción de las 1H-benzo[f]indazol-4,9-dionas, se ha propuesto que el primer paso de la reacción podría ser: (i) la adición conjugada de la hidracina a la unidad 1,4-naftoquinona **1** obteniendo el compuesto 1,4-hidroquinona-3-sustituida **1'** o (ii) la reacción de condensación entre el grupo acetyl y la hidracina para formar la correspondiente hidrazona **1T'**. Para explorar cuál paso de la reacción es más favorable, se realizaron cálculos computacionales utilizando la teoría del funcional de la densidad (DFT) de los posibles productos y comparamos su energía total respecto a la energía total de los reactantes (esquema 2). Una vez identificado el primer paso de la reacción, se realizaron cálculos para encontrar el posible estado de transición que llevaría a la ciclación y obtención de los derivados del tipo 1H-benzo[f]indazol-4,9-dionas [3].

Romina Andreina Bassi Castillo
Instituto de Química

Se estudió la hidrogenación de quinolina sobre catalizadores de ReS_2 soportados en Al_2O_3 , SiO_2 , ZrO_2 y TiO_2 en un reactor batch a $300\text{ }^\circ\text{C}$ y 5 MPa de presión de hidrógeno. Los catalizadores se prepararon por impregnación húmeda con una carga de $1,5$ átomos de Re por nm^2 de soporte. Los catalizadores se caracterizaron por adsorción de N_2 , espectroscopia de fotoelectrones de rayos X (XPS) y difracción de rayos X en polvo (XRD). Los catalizadores de renio muestran una alta actividad en la conversión de quinolina, pero una baja conversión a los productos libres de nitrógeno. Las actividades intrínsecas de ReS_2 fueron modificados por el efecto del soporte y disminuyó en el siguiente orden: $\text{Re/TiO}_2 > \text{Re/ZrO}_2 > \text{Re/SiO}_2 > \text{Re/Al}_2\text{O}_3$. La mayor actividad fue observada por el catalizador Re/TiO_2 y se correlacionó con la dispersión de renio y formación de especies ReS_2 . Mientras tanto, la menor conversión de quinolina obtenida sobre los catalizadores de Re/ZrO_2 , Re/SiO_2 y $\text{Re/Al}_2\text{O}_3$ se relaciona por un efecto combinado de las propiedades texturales de los catalizadores y la formación de especies de $\text{ReS}_{(2-x)}$ en los soportes.

Esteban Alonso Camú Macaya
Instituto de Química

Para el presente estudio, utilizando H_3BO_3 y por medio del método de impregnación en exceso de solvente se realizó la modificación de las propiedades ácidas de $\gamma-Al_2O_3$ mediante la incorporación de distintos contenidos de boro. Cada uno de estos adsorbentes fue caracterizado por adsorción-desorción de N_2 utilizando el método BET, acidez superficial, migración electroforética y difracción de rayos X. Como alimentación se utilizó una solución de 250 ppm de tiofeno (T), dibenzotiofeno (DBT) y 4,6-dimetildibenzotiofeno (4,6-DMDBT). Los resultados indican una disminución del área BET al incorporar boro; no obstante, luego al aumentar el contenido de boro, se observa un aumento en el área específica, lo que está relacionado con la formación de nuevos poros. Por otro lado, los resultados de acidez superficial muestran que la incorporación de boro posee un rol fundamental en la modificación en la cantidad y fuerza de los sitios ácidos de Lewis y Brønsted. Finalmente, los resultados de capacidad de adsorción de los materiales utilizados, muestran que la incorporación de boro posee un efecto positivo en la remoción de estas moléculas sulfuradas presentes en los derivados petrolíferos, lo cual puede deberse principalmente a la formación de diboruro de aluminio sobre la superficie de la alúmina

Johana Andrea Gomez Uribe
Instituto de Química

La inserción de un fragmento organometálico en aminoácidos, péptidos y carbohidratos ha sido una forma efectiva para influenciar selectivamente en las propiedades físicas, estructurales, electroquímicas y biológicas de diversos bioconjugados. En este sentido, en este proyecto se propone modificar estructuralmente, mediante la inserción de grupos organometálicos en distintas posiciones a péptidos lineales y cíclicos que poseen un efecto antibiótico. En una primera etapa, se sintetizarán y caracterizarán tres series de bioconjugados de péptidos cíclicos y lineales conectados y no conectados electrónicamente a fragmentos organometálicos de ferroceno y ciretreno. Con este estudio sintético se pretende abordar dos aspectos interesantes, i) combinar dos estrategias de síntesis química, en fase sólida y en solución; y ii) determinar si la naturaleza electrónica opuesta de los fragmentos organometálicos y la existencia de comunicación electrónica influyen en sus potenciales propiedades químicas, biológicas y estructurales, tal como anteriormente se ha observado para otros derivados organometálicos. En una segunda etapa, se evaluarán las propiedades biológicas in vitro frente a la inhibición del crecimiento de bacterias, responsables de producir diferentes tipos de infecciones microbiales. Es de resaltar que estos nuevos bioconjugados serán caracterizados tanto en solución como en estado sólido, mediante técnicas espectroscópicas (FTIR, RMN de ^1H y ^{13}C , espectrometría de masas), HPLC, difracción de rayos-X, y el análisis conformacional de los compuestos generados será evaluado a través de dicroísmo circular (CD).

CARACTERIZACIÓN MOLECULAR DEL RECEPTOR DE ESTRÓGENO EN MUESTRAS CLÍNICAS Y LÍNEAS DE CÁNCER GÁSTRICO

Cárdenas P.1, López L.1, Marchant MJ.1, Corvalán A.2 y Guzmán L.1.

1Instituto de Química, Facultad de Ciencias Biológicas, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Valparaíso, Chile. 2 Laboratorio de Oncología, Facultad de Medicina, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile.

Introducción: Estudios recientes muestran que estrógeno (E2) tiene un rol clave en la patogénesis del cáncer gástrico (CG). Estos estudios señalan que E2 aumenta la proliferación tumoral vía receptor de estrógeno (RE) en CG. Malik et al (2010). mostraron que E2 media la represión de reprimó (RPRM) a través de la formación de un complejo RMRP-RE α en cáncer de mama. Basados en esto resultados, el objetivo general fue Caracterizar a nivel molecular el efecto de los estrógenos sobre la expresión de RPRM en líneas cáncer gástrico con expresión endógena y exógena de RPRM. Para ello, nuestro grupo evaluó el efecto de estrógeno en la proliferación de la línea celular AGS-RPRM negativo (AGS-) y en la línea celular transfectada de manera estable con la región codificante para RPRM (AGS+). Observamos en una serie de pruebas a diferentes concentraciones de E2 una disminución en la proliferación celular comparado a la condición control AGS- con E2. Al mismo tiempo, encontramos un alto nivel de RE β en muestras clínicas por inmuno-histoquímica, indicando un rol clave en cáncer gástrico.

Métodos: La expresión de RE α , RE β , FOXA1 y RPRM fue evaluada en líneas celulares de CG (AGS-, AGS+ y KATO III) por RT-PCR. Los niveles de FOXA1 y RPRM fueron detectados por Western blot. Evaluamos el efecto de E2 en células en proliferación usando CellTiter-Glo®. Detectamos RE β por inmunohistoquímica en muestras clínicas de pacientes con CG. Resultados: Determinamos que todas las líneas de CG estudiadas expresan RE α , RE β , FOXA1 y RPRM. Encontramos que la proliferación decrece en un 53.46% en AGS+ en presencia de E2 con respecto al control AGS (-). Por RT-PCR, los estrógenos actúan regulando negativamente la expresión génica de RPRM en la línea AGS+, lo que podrían estar relacionado con el desarrollo de CG. También observamos altos niveles de RE β en muestras de pacientes con CG.

Conclusión: Los resultados sugieren que RE y los estrógenos podrían estar involucrados en el desarrollo de CG. El papel real del RE dentro de la patogénesis de CG, requiere ser dilucidada. Agradecimiento: DI 0,36.497/2915.

Protective effect of polyphenols from plants extracts against Helicobacter pylori-induced infection of gastric cancer cell lines

**Guzmán, Leda¹, Saavedra, Carla¹, Marchant, María José ¹, Corvalán, Alejandro²,
¹Química, Facultad de Ciencias, Pontificia Universidad Católica De
Valparaíso.²Laboratorio de Oncología, Facultad de Medicina, Pontificia Universidad
Católica de Santiago.**

INTRODUCTION. Gastric cancer (GC) is the second most deadly cancer in Chile. Helicobacter pylori (Hp) infection leads to gastroduodenal inflammation mediated by reactive oxygen species (ROS) as well as superoxide dismutase (SOD) and cyclooxygenase (COX-2) expression, both events being involved in the development of GC. We evaluated the protective effect of natural sources of polyphenol on the production of ROS and the expression of superoxide dismutase (SOD) in CG cells infected with (Hp).

METHODS: The human gastric cancer lines AGS and SNU1, were incubated with two plants extracts (E1 and E2) by 24 h. Then, the cells were exposed to H₂O₂ and Hp. The effect of each treatment on the cell viability, production of ROS and SOD expression was determined by MTS assay, 2',7'-dichlorodihydrofluorescein diacetate probe test and western blot analysis, respectively.

RESULTS. After 24 h of incubation with extracts, the viability of AGS and SNU1 cells infected with Hp was increased and the generation of ROS diminished. Under the same conditions, the expression of SOD was increased.

CONCLUSIONS. The results indicate that both natural extracts had an anti-oxidative effect against generation of ROS induced by Hp. Accordingly, these molecules could have an anti-inflammatory role leading to attenuated cell damage by bacterial infection; this mechanism anti-inflammatory require to be elucidated. This work was funded by grant; DIE037-728/2015 And DI 0.37-274/2015.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS METÁLICAS COMO POSIBLE HERRAMIENTA DIAGNÓSTICA TEMPRANA DE CÁNCER GÁSTRICO.

Marchant M1, Guerrero A2, Guzmán L1, Corvalán A3, y Kogan M2.

1Laboratorio de Química Biológica, Instituto de Química, Facultad de Ciencias, Pontificia Universidad Católica de Valparaíso, Avenida Universidad 330, Valparaíso, Chile.

2Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santos Dumont 964, Independencia, Santiago, Chile. **3**Centro de Investigación en Oncología, Pontificia Universidad Católica de Chile.

Las nanopartículas metálicas, en particular las de oro y hierro han sido de gran interés científico debido a las múltiples aplicaciones, sobre todo en el área de la salud. Además, poseen propiedades optoelectrónicas únicas que las hacen útiles para el desarrollo de biosensores¹. Nuestro equipo descubrió un nuevo biomarcador, el gen Reprimo, el cual se inactiva en estadios tempranos del cáncer gástrico. Lamentablemente las técnicas de detección actuales tienen bajos niveles de selectividad y/o sensibilidad, no siendo útiles para el diagnóstico de la patología². Por ello proponemos el uso de nanopartículas metálicas funcionalizadas con oligonucleótidos de reconocimiento específico de Reprimo como herramienta para su detección. Se sintetizaron nanopartículas de oro (AuNPs) de 13 y 55 nm, mediante método de reducción de H₂AuCl₄ con citrato³. Las AuNPs fueron funcionalizadas con α -SH-PEG- ω -COOH y amino-oligo. Todas fueron caracterizadas mediante espectroscopia UV-Vis, DLS y TEM. Se realizaron ensayos de hibridación para verificar las funcionalizaciones realizadas incubando las distintas nanopartículas con ADN de Reprimo a 37°C O.N. a 300 rpm. Todas las nanopartículas sintetizadas mantienen sus propiedades optoelectrónicas post modificación. Los resultados muestran cambios en el potencial zeta de las nanopartículas obtenidas a medida que se agregan moléculas a la superficie. Las micrografías del TEM revelan un aumento en promedio de 10 nm en tamaño, atribuibles a la funcionalización, corroborando lo obtenido por potencial zeta. Los ensayos de hibridación demuestran la formación de un híbrido nano-ADN, siendo posible la detección de Reprimo. Nuestros resultados demuestran el potencial de estos sistemas como herramientas diagnósticas en Cáncer Gástrico.

Agradecimientos: Los autores agradecen a Patricio Ponce por las micrografías del TEM. M. Marchant agradece a proyecto de apoyo a tesis doctoral DI 036.497/2015 de la PUCV y a Beca Doctorado Nacional de CONYCIT. A. Guerrero agradece a FONDECYT Postdoctoral No 3150360, etapa 2015. L. Guzmán agradece a proyecto DI 037.274/2015 de la PUCV. A. Corvalán agradece a FONDECYT No. 1151411. M. Kogan agradece a FONDECYT No 1130425. Los autores agradecen a FONDAP ACCDis No. 15130011.

1 Chatterjee, K., Sarkar, S., Jagajjani, R., and Paria, S. *Advances in Colloid and Interface Science*, 209, (2014), 8-39.

2 Saavedra, K., Valbuena, J., Olivares, W., Marchant, M. J., Rodríguez, A., Torres-Estay, V., and Corvalán, A. H. *PloS one*, 10, (2015), 5

3 Zhao X., and cols. *Analytical Chemistry*, 80, (2008), 9091-9096.

Variación estival de la composición corporal en un grupo de Adultos Mayores chilenos

López L., Rubén(1); Lizana A., Pablo(2)

(1) Escuela de Kinesiología. Pontificia Universidad Católica de Valparaíso

(2) Instituto de Biología. Pontificia Universidad Católica de Valparaíso

Introducción

En Chile un 24,65% de los Adultos Mayores (AM) posee sobrepeso y/o obesidad. La evidencia refiere que los AM presentan cambios en su composición corporal tales como disminución en la masa libre de grasa por pérdida de la masa muscular (MM) y aumentan la grasa corporal. También se ha visto que los períodos estivales pueden influir sobre estos componentes por modificación en la ingesta calórica y baja actividad física. Este fenómeno pone de manifiesto la necesidad de identificar periodos críticos que permitan implementar campañas de promoción y prevención.

Objetivos

El objetivo de este estudio fue evaluar los posibles cambios en la composición corporal en AM durante las vacaciones de verano.

Sujetos y métodos

Se invitó a participar a todos los AM de un centro comunitario del sector de Curauma, comuna de Valparaíso (n=28). Solo 12 AM (9 mujeres) cumplieron con los criterios de inclusión y firmaron el consentimiento informado. Los sujetos evaluados tuvieron una edad promedio de $71,92 \pm 6,97$ los que fueron sometidos a una evaluación inicial (E1) y final (E2) al inicio y término del período transcurrido entre el 26 de enero del 2015 y el 16 de marzo del 2015. Todas las evaluaciones fueron realizadas en el mismo lugar.

Se determinó la masa con una balanza Seca 813 y la estura con un estadiómetro Seca 217. Se calculó el índice de masa corporal ($IMC = kg/mt^2$) y se categorizó de acuerdo a la norma chilena. Para la evaluación de la composición corporal: masa grasa (MG), masa magra (MM) y masa ósea (MO) fue utilizado un equipo de impedancia bioeléctrica (Tanita BC420SMA).

Análisis estadístico: Se presentan estadísticos descriptivos como media y desviación estándar. La comparación de los grupos para las medidas antropométricas y de composición corporal se realizó usando t-test o U de Mann-Whitney para muestras pareadas según el test de normalidad de Shapiro-Wilk. Los análisis fueron desarrollados utilizando el programa STATA 12.1. El nivel alfa aceptado como significativo para todos los procedimientos estadísticos fue de 0,05.

Resultados

Los sujetos presentan una talla promedio de $1,56 \pm 0,52m$, la que se estandarizó para ambas evaluaciones. Se reporta una variación del peso de $-0,03gr$ entre la E1 ($73,00 \pm 15,49$) y la E2 ($72,97 \pm 15,71$) ($p=0,784$), el IMC presenta una variación de 0,04 entre E1 ($29,84 \pm 6,09$) y E2 ($29,88 \pm 6,31$) ($p=0,937$) y en relación a su categoría el 58,8% son eutróficos, 8,3% con sobrepeso y 33% obesos, categorías que no cambiaron de la E1 y la E2. Se presenta un aumento significativo entre la E1 ($27,63 \pm 10,91$) y E2 ($28,64 \pm 11,39$) en la MG ($p=0,007$) y una disminución significativa entre la E1 ($43,08 \pm 5,62$) y E2 ($42,07 \pm 5,10$) en la MM ($p=0,006$) y entre la E1 ($2,30 \pm 0,27$) y E2 ($2,26 \pm 0,26$) en la MO ($p=0,026$).

Conclusiones

La evaluación del IMC no logró ser un indicador importante para distinguir cambios de la composición corporal en un periodo crítico. Por otro lado, los datos indican que los AM evaluados han ganado una cantidad significativa de MG y han disminuido su MM y MO durante este período estival. Estos cambios de la composición corporal en un periodo de vacaciones pueden tener potenciales consecuencias en salud a corto y largo plazo en AM. Estos antecedentes requieren de otros estudios que apoyen nuevas medidas de prevención.

Juan Ignacio Oyarzo Montalvan
Instituto de Química

La química organometálica es una ciencia interdisciplinaria que se encuentra aún en desarrollo (lleva solo un par de décadas). Esta se encarga de estudiar la síntesis y reactividad de este tipo de compuestos.

Pero ¿Qué es un compuesto Organometálico?

En términos generales, la designación organometálica se define como un compuesto en que un grupo orgánico está unido directamente a un metal a través de al menos un átomo de carbono.

¿Por qué son importantes los compuestos Organometálicos?

Su relevancia se relaciona con un sinnúmero de aplicaciones para las cuales pueden ser utilizados, tanto para química pura como aplicada. Dentro de la química aplicada, resultan atractivos para su aplicación en áreas tales como: materiales moleculares, sensores ópticos y electroquímicos, química de coordinación, compuestos con propiedades médicas y óptica no lineal.

Esta transversalidad le ha permitido a nuestro grupo de trabajo explorar actualmente dos líneas de investigación: Bioorganometálica y química de coordinación, la primera se basa en el estudio de nuevos compuestos que presenten interés médico y biológico (se combinan la organometálica con componentes biológicos) y la segunda en buscar compuestos que puedan actuar como sensores o presenten una respuesta electroquímica, óptica o visual frente a diferentes metales de transición.

En el poster a presentar se explicará con un poco más de detalle ambas líneas de investigación con el fin de difundir, el trabajo que realiza nuestro laboratorio día a día.

Integrantes: Alejandra Acuña, Patricia Toro, Johana Gomez, Juan Oyarzo, A. H. Klahn.

KIWIPHAGE: Desarrollo de un antimicrobiano natural contra el cancro bacteriano del Kiwi utilizando bacteriófago

Proyecto FONDEF Idea: Dra. Oriana Flores (Investigadora Postdoctoral), Mg. Mauricio Nuñez (Profesional de apoyo), Camila Prince (Tesisista de pregrado), Dr. Roberto Bastías (Director), Dra. Carolina Yañez (Co-directora).

Laboratorio de Microbiología, Instituto de Biología, Facultad de Ciencias, PUCV.

La bacteria fitopatógena *Pseudomonas syringae* pv. *actinidiae* (Psa) es la responsable de la enfermedad del cancro bacteriano del kiwi, que causa pérdidas millonarias a los productores de kiwi a nivel nacional y mundial, siendo considerada como una pandemia. El Servicio Agrícola Ganadero (SAG) ha aprobado una serie de compuestos en base a cobre y antibióticos para combatir esta bacteria, sin embargo, su utilización continua puede generar toxicidad en las plantas y la proliferación de bacterias resistentes, pudiendo afectar además a otros microorganismos presentes. Los antecedentes sugieren que hoy en día no existe una herramienta única y específica que sea capaz de combatir las infecciones provocadas por Psa en Chile. Dentro de este contexto, el objetivo del proyecto es desarrollar un antimicrobiano natural basado en bacteriófagos (KIWIPHAGE) capaz de combatir el cancro bacteriano del kiwi producido por la bacteria Psa. La investigación es actualmente financiada por un proyecto FONDEF y cuenta con el apoyo privado del Comité del kiwi y público del SAG. Hasta la fecha, se ha trabajado en la elaboración de un cepario representativo de los aislados chilenos de Psa y en el aislamiento de bacteriófagos contra la bacteria. Actualmente, contamos con 20 aislados de Psa provenientes desde las distintas regiones afectadas por la enfermedad (VI, VII y VIII) durante los años (2010-2016). La identificación de los aislados se realizó mediante análisis moleculares por PCR utilizando partidores específicos para Psa y actualmente se está trabajando en la caracterización de las cepas por BIOLOG. La variabilidad genética de los aislados se está analizando para su clasificación mediante las técnicas moleculares de box/eric-PCR y MLST. Los resultados preliminares sugieren que no existen diferencias significativas entre los aislados obtenidos desde distintas regiones de Chile. Hasta la fecha, hemos logrado elaborar un banco de bacteriófagos contra el fitopatógeno, los que fueron aislados desde muestras ambientales de distinto origen. Los resultados obtenidos son prometedores para cumplir con los desafíos planteados en el proyecto, que tiene como fin construir una alternativa natural para el control de la enfermedad del cancro del kiwi.

Agradecimientos: FONDEF idea ID15I10032, Comité del Kiwi, Servicio Agrícola Ganadero (SAG).