



Jornadas de
Tesistas

INIFTA

LIBRO DE RESÚMENES

XVIII Jornadas de Tesistas del INIFTA

7 al 9 de septiembre de 2026

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

La Plata, Buenos Aires, Argentina

XVIII Jornadas de Tesistas del INIFTA / Maximiliano Agazzi ... [et al.] ; Compilación de

Soledad Belluzo ... [et al.]. - 3a ed. - La Plata : Universidad Nacional de La Plata. Facultad de Ciencias Exactas, 2026.

Libro digital, PDF

Archivo Digital: online

ISBN 978-950-34-2797-2

1. Física. 2. Química. I. Agazzi, Maximiliano II. Belluzo, Soledad, comp.
CDD 530



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA

I N I F T A



XVIII Jornadas de Tesistas del INIFTA 2026

COMISIÓN ORGANIZADORA

Dra. M. Laura Dántola
Dra. Soledad Belluzo
Dr. Waldemar Marmisolle
Dra. M. Lorena Cortez
Mag. M. Fernanda Santandreu
Dra. Jael Neyra Recky
Dr. Néstor Ariel Pérez Chávez
Lic. Emilia Serrano

AGRADECIMIENTOS

Secretaría de Ciencia y Técnica, Facultad de Ciencias Exactas,
Universidad Nacional de La Plata
CCT-La Plata CONICET

Jornadas de Tesistas INIFTA 2026 — Cronograma			
Horario	Lunes 7 de septiembre	Martes 8 de septiembre	Miércoles 9 de septiembre
8:30–8:45	Laviani	Huamani	Borzi
8:45–9:00	Ardila Padilla	Montilla Saavedra	Caballero Lawrence
9:00–9:15	Matelo	Tsunoda	Calibio
9:15–9:30	Godoy Ortega	Montero Jimenez	Arcidiacono
9:30–9:45	Heredia	Fernandez	Montejo
9:45–10	Villares	Martire	Armijos Capa
10–10:15	Cathcarth	Organigrama institucional	Alí
10:15–10:20	Toledo (5 min)	Mutuberría (5 min)	Inchaurredo (5 min)
10:20–10:25	Paz (5 min)	Paino (5 min)	Alvarez (5 min)
10:25–11:00	COFFEE BREAK	COFFEE BREAK	COFFEE BREAK
11:00–11:30	Charla inaugural institucional	María Ana Huergo (INV)	Yanina Bava (INV)
11:30–11:45	Pagliaro	Laura Gomez Velazquez (PD)	Ariel Perez Chavez (PD)
11:45–12:00	Sanchez Dova	Lopez	Cruz
12:00–12:15	Vitaller	García Beltrán	Bujan
12:15–12:30	Ventre	Apuzzo	Tenti
12:30–12:45	Rabasa (5 min)	Scaramutti	CIERRE

JORNADAS DE TESISISTAS INIFTA 2026 -PROGRAMA

7, 8 y 9 de septiembre de 2026

LUNES 7 DE SEPTIEMBRE

Horario	Expositor/a	Título del trabajo	Director/es
8:30–8:45	Magalí Laviani	EFICIENCIA ELECTROCATALÍTICA DE NÍQUEL SOBRE MAGNETITA: ÁTOMOS INDIVIDUALES COMO CENTROS ACTIVOS	Doris Grumelli
8:45–9:00	Carlos A. Ardila Padilla	EVALUACIÓN DEL DAÑO FOTOINDUCIDO POR SENSIBILIZADORES LIPOFÍLICOS E HIDROSOLUBLES EN PROTEOLIPOSOMAS DE DOPC Y DOPC:COLESTEROL	Laura Dántola, Mariana Vignoni
9:00–9:15	Ignacio Tomás Matelo	NANOCANALES Y MESOCANALES DE ESTADO SÓLIDO FUNCIONALIZADOS CON POLI(4-VINILPIRIDINA) PARA GENERACIÓN DE ENERGÍA OSMÓTICA	Waldemar Marmisollé, Omar Azzaroni
9:15–9:30	Gricelda Godoy Ortega	FOTOOXIDACIÓN DE COMPONENTES DEL ADN SENSIBILIZADA POR PTERINA: UN ESTUDIO MECANÍSTICO SOBRE LA INFLUENCIA DEL PH Y LA ESTRUCTURA DEL SUSTRATO	Andrés H. Thomas, Carolina Lorente
9:30–9:45	Romina María Agustina Heredia	CARACTERIZACIÓN DE MAGNETITA FUNCIONALIZADA CON PORFIRINAS DE COBALTO PARA SU USO EN ELECTROCATÁLISIS	Doris Grumelli
9:45–10	Matias Villares	MODELO DE SLIP-SPRINGS PARA EL ENTRELAZAMIENTO DE CADENAS EN REDES POLIMÉRICAS	Marcelo Ceolin, Marcus Müller
10–10:15	Marilina Cathcarth	EFFECTOS DE CURVATURA Y REGULACIÓN DE CARGA EN LA ADSORCIÓN COMPETITIVA DE PROTEÍNAS	Gabriel S. Longo, Agustín S. Picco
10:15–10:20	Florencia Emilia Toledo	BIOESPECTROSCOPÍA DE LÁGRIMA PARA EL ESTUDIO DE ALTERACIONES EN LA SUPERFICIE OCULAR	Paula Faccia, Federico Rasse Suriani
10:20–10:25	Guadalupe Paz	ESTUDIOS OPERANDO EN LA INTERFAZ DE LA SUPERFICIE DE NANOMATERIALES MEDIANTE EL EMPLEO DE RADIACIÓN DE SINCROTRÓN	Lisandro Giovanetti
10:25–11:00	COFFEE BREAK		
11:00–11:30	Charla inaugural institucional		
11:30–11:45	Paula Silvina Pagliaro	PROPIEDADES CRÍTICAS DE PELÍCULAS MULTICAPA FERROMAGNÉTICAS FUERTEMENTE ANISOTRÓPICAS CON INTERACCIONES DIPOLARES	Marisa Bab, Gustavo Saracco
11:45–12:00	Anaclara Sanchez Dova	HIDROGELES COMPUESTOS Y APATITAS BIOACTIVAS COMO BASE PARA BIOMATERIALES	Juan Manuel Fernandez, Tamara G. Oberti
12:00–12:15	Maria Julia Vitaller	GENERACIÓN DE UN FANTOMA ANTROPOMÓRFICO PERSONALIZADO PARA LA SIMULACIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE ACTIVIDAD EN SPECT CON 131I	Yamil Chain, Luis Illanes
12:15–12:30	Josefina Ventre	EFFECTO DE LA COMPOSICIÓN ORO:PLATA EN NANOHÍBRIDOS BIMETÁLICOS CON PUNTOS CUÁNTICOS DE GRAFENO PARA LA DETECCIÓN Y DEGRADACIÓN DE CONTAMINANTES	Francisco Ibáñez, Martín Bellino
12:30–12:45	Matías Rabasa	NANOZIMAS FOTOACTIVABLES PARA LA DETECCIÓN INTRACELULAR DE MANGANESO Y EL MODELADO DE ESTRÉS OXIDATIVO EN MODELOS NEURONALES	Daniel Mártire, Gabriela Bosio

Presentaciones de tesisistas: 10 min de exposición + 5 min de preguntas. Ingresantes 2026: 5 min en total.

MARTES 8 DE SEPTIEMBRE

Horario	Expositor/a	Título del trabajo	Director/es
8:30–8:45	Angel Luciano Huamani	MEMRISTOR NANOFLUÍDICO BASADO EN NANOCANALES ÚNICOS RECONFIGURABLES POR PH	Omar Azzaroni, Waldemar Marmisollé
8:45–9:00	Ada Isabel Montilla Saavedra	NITRURO DE CARBONO POLIMÉRICO MODIFICADO CON HIERRO PARA LA ELIMINACIÓN DE CONTAMINANTES EMERGENTES EN EL AGUA	Paula Caregnato, Mónica C. Gonzalez
9:00–9:15	Sofia Tsunoda	GRAFITO AERO-EUTÉCTICO DERIVADO DE FUNDICIÓN GRIS COMO ÁNODO AUTOSOPORTADO PARA BATERÍAS DE ION-LITIO	Mariela G. Ortiz, Claudio A. Gervasi, L. Anahí Azpeitia
9:15–9:30	Marjorie E. Montero Jimenez	DETECCIÓN MULTIPARAMÉTRICA CON BIOCENSORES BASADOS EN TRANSISTORES ELECTROQUÍMICOS ORGÁNICOS	Waldemar Marmisollé, Omar Azzaroni
9:30–9:45	Heryerli Fernandez	VAINILLINA Y SU DÍMERO FRENTE A RADIACIÓN UVA: CAPACIDAD ANTIOXIDANTE E IMPLICANCIAS TOXICOLÓGICAS	Carolina Lorente
9:45–10	Ana Paula Martire	ENSAMBLADOS CAPA POR CAPA DE CARBONES DE ZIF-8 DOPADO CON HIERRO COMO NANOZIMAS Y POLÍMEROS CONDUCTORES PARA SENSADO DE AGUA OXIGENADA	Waldemar Marmisollé, Matías Rafti
10–10:15	Organigrama institucional		
10:15-10:20	Candela Mutuberría	DISEÑO DE NANOMATERIALES MAGNÉTICOS OPTIMIZADOS PARA CRIOPRESERVACIÓN DE MUESTRAS BIOLÓGICAS.	Carolina Vericat, Gabriel Lavorato
10:20–10:25	Franco Daniel Paino	DIFUSIÓN IÓNICA EN FERRITAS: DE LAS TRANSFORMACIONES QUÍMICAS A LA OPTIMIZACIÓN DE LAS PROPIEDADES FISCOQUÍMICAS DE NANOPARTÍCULAS	Mariano Fonticelli, Gabriel Lavorato
10:25–11:00	COFFEE BREAK		
11:00–11:30	María Ana Huergo (INV)	CORRELACIÓN ENTRE PROPIEDADES FOTOLUMINISCENTES, ESTRUCTURA Y NATURALEZA QUÍMICA EN LA SÍNTESIS DE CARBON DOTS A PARTIR DE GLUTATIÓN Y FORMAMIDA	
11:30–11:45	Laura Gomez Velazquez (PD)	OPTIMIZACIÓN DEL RECUBRIMIENTO DE NANOPARTÍCULAS DE Fe_3O_4 PARA EL NANOCALENTAMIENTO EN MEDIOS CRIOPROTECTORES	
11:45–12:00	Leandro Lopez	CATALIZADORES EFICIENTES BASADOS EN FECCS DE PT SOBRE PUNTOS CUÁNTICOS DE CARBONO/NITRÓGENO	Francisco Ibáñez, Martín Bellino
12:00–12:15	Karla Paola García Beltrán	2-2' BIFENOL COMO FOTOSENSIBILIZADOR UVA: ESTABILIDAD FOTOQUÍMICA Y DAÑO A BIOMOLÉCULAS	Andrés H. Thomas, Laura Dántola
12:15–12:30	Eugenia Apuzzo	COMPLEJOS DE POLIELECTROLITO ASIMÉTRICOS: DESDE LOS FUNDAMENTOS HASTA SU APLICACIÓN	Omar Azzaroni, Santiago Herrera
12:30–12:45	Mariel Scaramutti	EVALUACIÓN DE TRATAMIENTOS COMBINADOS DE OXIDACIÓN CON BIORREMEDIACIÓN, APLICADOS A RESIDUOS OLEOSOS RESULTANTES DEL ALMACENAMIENTO DE PETRÓLEO	Janina Rosso, Verónica Mora

Presentaciones de tesis: 10 min de exposición + 5 min de preguntas. Ingresantes 2026: 5 min en total.

MIÉRCOLES 9 DE SEPTIEMBRE

Horario	Expositor/a	Título del trabajo	Director/es
8:30–8:45	Maria Alejandra Borzi	FOTOTERMIA PLASMÓNICA COMO PLATAFORMA TERAPÉUTICA FRENTE A DEPÓSITOS AMILOIDEOS	María Ana Huergo, Eduardo Daniel Prieto
8:45–9:00	Amanda Caballero Lawrence	ESTUDIO CINÉTICO TEÓRICO DE LA REACCIÓN DEL ALCOHOL CF ₃ CF ₂ CH ₂ OH CON RADICALES OH	María Paula Badenes
9:00–9:15	Ivon Calibio	MATERIALES BASADOS EN AGREGADOS AMILOIDES DE ALBUMINA CON POTENCIAL ANTIMICROBIANO	Patricia Schilardi, Carolina Díaz
9:15–9:30	Melina Sol Arcidiacono	ENSAMBLADO Y CARACTERIZACIÓN DE PELÍCULAS DELGADAS POROSAS DE ZIF-8 MEDIANTE SPIN-COATING COLOIDAL	Matías Rafti
9:30–9:45	Luis Alberto Montejo	ELECTROSÍNTESIS DE UN SOLO PASO DE PUNTOS CUÁNTICOS DE CARBONO PARA PREVENIR LA OXIDACIÓN Y PRESERVAR LA ACTIVIDAD CATALÍTICA DE NANOPARTÍCULAS DE ORO	Francisco Javier Ibáñez, María Ana Huergo
9:45–10	Angel Gerardo Armijos Capa	DE PELÍCULAS PLANAS A MICROCÁPSULAS: PERMEABILIDAD FOTOMODULADA EN MULTICAPAS DE POLIELECTROLITOS PAH-CAP/PSS	Andrés Thomas, Mariana Serrano
10–10:15	Francisco Leonel Alí	CINÉTICAS DE OXIDACIÓN IN SITU DE MAGNETITA NANOESTRUCTURADA POR DIFRACCIÓN DE RAYOS X CON LUZ SINCROTRÓN	Mariano Fonticelli, Gabriel Lavorato
10:15–10:20	Camila Inchaurredo	DESARROLLO DE MATERIALES COMPUESTOS BIODEGRADABLES PARA REGENERACIÓN OSEA A PARTIR DE POLÍMEROS NATURALES, POLVOS METÁLICOS Y FITOCOMPUESTOS	Natalia Fagali, María Soledad Belluzo
10:20–10:25	Camilo Fabian Alvarez	NANOHIROGELES MUCOADHESIVOS CON NANOPARTÍCULAS DE POLIFENOLES PARA EL TRATAMIENTO DE ENFERMEDADES OCULARES	Daniel Mártire, Gabriela Bosio
10:25–11:00		COFFEE BREAK	
11:00–11:30	Yanina Bava (INV)	OPTIMIZACIÓN DE LA REINYECCIÓN DE SALMUERA EN LA INDUSTRIA DEL LITIO: UN CASO DE ÉXITO EN VINCULACIÓN TECNOLÓGICA Y SOSTENIBILIDAD	
11:30–11:45	Ariel Perez Chavez (PD)	DINÁMICA MOLECULAR DEL ZIF-8 COMO RESERVORIO DE OXÍGENO: PARTICIÓN, SALTOS ENTRE JAULAS Y BARRERA ENTRÓPICA	
11:45–12:00	Ana María Cruz	CARACTERIZACIÓN TEÓRICA DE LA ENCAPSULACIÓN Y LIBERACIÓN DE DOXORRUBICINA EN NANOGELES COPOLIMÉRICOS DE NIPAM-CO-MAA SENSIBLES A PH Y TEMPERATURA	Gabriel Sebastian Longo, Alberto Albesa
12:00–12:15	Ariana Bujan	RECUBRIMIENTOS ANTIMICROBIANOS Y BIOCOMPATIBLES PARA LA PREVENCIÓN DE INFECCIONES RELACIONADAS CON DISPOSITIVOS ORTOPÉDICOS	Patricia Schilardi, Natalia Fagali
12:15–12:30	Juan Martin Tenti	DINÁMICA MULTIESCALA DEL EEG INTRACRANEAL A TRAVÉS DE LOS ESTADOS DE SUEÑO-VIGILIA	Marcelo Arlego, Marisa Bab
12:30–12:45		CIERRE	

Presentaciones de tesis: 10 min de exposición + 5 min de preguntas. Ingresantes 2026: 5 min en total.



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA

I N I F T A



XVIII Jornadas de Tesistas del INIFTA 2026

CONFERENCIAS INVESTIGADORAS

OPTIMIZACIÓN DE LA REINYECCIÓN DE SALMUERA EN LA INDUSTRIA DEL LITIO: UN CASO DE ÉXITO EN VINCULACIÓN TECNOLÓGICA Y SOSTENIBILIDAD

Bava Yanina¹, Nossa Lisseth Diana¹ Fontela Darío¹, Juan Carlos Czerwien¹, Francisco Luis Giambelluca¹ y Giovanetti Lisandro¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. yaninabava@inifta.unlp.edu.ar

Introducción: Cuando hablamos de la transición energética global, el litio se posiciona en el centro de la escena. Sin embargo, el verdadero desafío de nuestra región no es únicamente extraer el recurso, sino hacerlo bajo un paradigma de sustentabilidad ambiental y tecnológica integral. Actualmente, la industria está migrando activamente hacia tecnologías de Extracción Directa de Litio, conocidas como DLE. Si bien el DLE promete ser más rápido, selectivo y reduce el uso de piletas de evaporación, introduce un reto hidrogeológico crítico: la necesidad de reinyectar volúmenes masivos de salmuera agotada de forma eficiente y segura de regreso al reservorio. El objetivo del proyecto (FITBA-155-A 2024, CIC) consistió en el desarrollo de un protocolo de caracterización roca-fluido que permita optimizar la reinyección de salmueras de litio depletadas mediante el análisis de su interacción con la roca del pozo sumidero, integrando con datos hidrológicos físicoquímicos y petrofísicos para reducir el impacto ambiental, económico y social de la producción litífera de salar.

Resultados: Para dar respuesta a este desafío, en colaboración con la empresa Tercer Elemento S.R.L. y con soporte de firmas operadoras litíferas, se ha desarrollado una metodología pionera de caracterización avanzada roca-fluido. El servicio desarrollado incluye la caracterización del conjunto roca sumidero y salmuera depletada mediante un ensayo de monitoreo de permeabilidad que simula las condiciones de reinyección a escala de laboratorio. El desarrollo de este ensayo implicó el diseño, fabricación y puesta a punto del equipo de Monitoreo de Permeabilidad (MP) incluyendo el desarrollo del hardware, software y control analógico para la toma de datos en tiempo real. Toda esta labor fue íntegramente realizada en los laboratorios y talleres del INIFTA.

Conclusiones: Se logró el desarrollo, calibración y validación del equipo MP para simular condiciones de reservorio en los laboratorios y talleres del INIFTA. Se caracterizaron las salmueras y se completó con éxito la puesta a punto y optimización de los protocolos de caracterización físicoquímica y petrofísica siguiendo normativas internacionales.

Referencias

- 1) Vera, M. L., Torres, W. R., Galli, C. I., Chagas, C. A., & Flexer, V. *Nature Reviews Earth & Environment*, **2023**, 4(3), 149–165.

Correlación entre propiedades fotoluminiscentes, estructura y naturaleza química en la síntesis de *carbon dots* a partir de glutatión y formamida

Huergo, María Ana

Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
mahuergo@inifta.unlp.edu.ar

Introducción. Los *carbon dots* (CDs) son nanopartículas de carbono de menos de 10 nm de diámetro que se destacan por sus propiedades de fotoluminiscencia. Determinar el origen de su emisión puede ser un desafío debido a la complejidad de estos materiales, particularmente cuando son sintetizados mediante métodos *bottom-up*. En este trabajo se analiza la síntesis de CDs a partir de la pirólisis asistida por microondas de α -glutatión (GSH) y formamida. Estos nanomateriales presentan propiedades ópticas singulares que los hacen de gran interés para diversas aplicaciones. Sin embargo, sus características fisicoquímicas y, en particular, el origen de su emisión, continúan siendo motivo de debate.

Resultados. Luego de su síntesis, los CDs fueron purificados y fraccionados mediante diálisis en dos poblaciones: pequeñas (pCDs) y grandes (gCDs), menores y mayores a 10 kDa, respectivamente. El estudio de sus propiedades ópticas mostró la presencia de una banda de emisión azul, con comportamiento dependiente de la excitación, característica de los CDs, junto con señales asociadas a porfirinas: una banda de absorción de Soret acompañada de varias bandas Q y una emisión roja independiente de la longitud de onda de excitación. Aunque ambas emisiones están presentes en las dos poblaciones, la emisión azul predomina en los pCDs.

Los espectros Raman muestran señales correspondientes a estructuras gráficas y pirrónicas, marcadamente más intensas en la población de gCDs. Las imágenes de HR-TEM revelan estructuras compatibles con agregados porfirínicos asociados a nanopartículas de carbono amorfo en la población de pCDs, mientras que en la fracción de gCDs se observan asociados a estructuras cristalinas de tipo gráfico.

En conjunto, estos resultados indican que esta síntesis produce agregados porfirínicos, responsables de la emisión roja, asociados a nanopartículas de carbono con diferente grado de cristalización. Los resultados sugieren, además, que las estructuras carbonosas amorfas son responsables de la emisión azul.

Conclusiones. La coexistencia de esqueletos carbonosos con diferente grado de grafitización, asociados a agregados porfirínicos, permite explicar la doble emisión observada en estos materiales. Nuestro análisis sugiere que la emisión azul está asociada al estado amorfo de la nanopartícula y disminuye a medida que el material adquiere mayor grado de grafitización.

Las propiedades de estos CDs han sido aprovechadas en diversas aplicaciones, como sondas radiométricas y catalizadores para la conversión de energía, y actualmente se explora su potencial como agentes en terapias fotodinámicas y como antioxidantes, debido a su capacidad de participar tanto en la generación como en la reducción de especies reactivas de oxígeno.

Referencias

1. Zdražil, L., *Nat Comm* **2025** **1977**, 16:10949.



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA

I N I F T A



XVIII Jornadas de Tesistas del INIFTA 2026

EXPOSICIONES ORALES DE INVESTIGADORES POSTDOCTORALES

OPTIMIZACIÓN DEL RECUBRIMIENTO DE NANOPARTÍCULAS DE Fe_3O_4 PARA EL NANOCALENTAMIENTO EN MEDIOS CRIOPROTECTORES

Gomez Velazquez Laura¹, Gabriel Lavorato¹, Carolina Vericat¹.

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
lauragomez@inifta.unlp.edu.ar

Introducción. La criopreservación es un conjunto de técnicas que permite el almacenamiento seguro de materiales biológicos a muy bajas temperaturas.¹ La vitrificación es el enfriamiento ultrarrápido hasta temperaturas de N_2 líquido, lo cual requiere el uso de agentes crioprotectores complejos. A pesar de esto, el posterior calentamiento de las muestras puede generar gradientes térmicos que promuevan la desvitrificación y recristalización. Por este motivo se ha propuesto el nanocalentamiento, el cual se basa en el uso de nanopartículas de óxido de hierro (IONPs) sometidas a campos de radiofrecuencia, para lograr un calentamiento rápido y homogéneo. Con este fin, las IONPs a emplear deben presentar elevadas tasas de calentamiento y estabilidad coloidal en medios crioprotectores de elevada fuerza iónica y composición compleja, tal como VS55. En este trabajo se evaluó el efecto de diferentes recubrimientos hidrofílicos sobre IONPs monodispersas en agua y VS55.

Resultados. Se obtuvieron IONPs de morfología cuboctaédrica de 11.5(1.7) y 17(2.0) nm mediante descomposición térmica de $\text{Fe}(\text{acac})_3$. Posteriormente, las IONPs se transfirieron a medio acuoso mediante tres estrategias de funcionalización superficial: i) intercambio de ligandos con grupos hidroxilo (OH), ii) intercambio con PEG funcionalizado con catecol (CP) y iii) encapsulación con PMAO² (PM). Los patrones de difracción de electrones de área seleccionada (SAED) fueron compatibles con la estructura de espinela de Fe_3O_4 , mientras que las imágenes de TEM mostraron que la morfología del núcleo se conservó después de la transferencia a medio acuoso. La presencia de los distintos recubrimientos en las IONPs fue corroborada mediante FTIR. Los estudios de DLS y SAXS permitieron evaluar la estabilidad coloidal de los sistemas en diferentes medios. Las IONPs funcionalizadas con OH o PMAO no presentaron estabilidad suficiente en VS55, mientras que aquellas recubiertas con CP permanecieron coloidalmente estables en este medio crioprotector. La eficiencia de calentamiento se evaluó mediante la tasa de absorción específica (SAR) a las de 11 nm para todos los recubrimientos evaluados en agua. En particular, las IONPs de 17 nm recubiertas con CP presentaron valores de aproximadamente 590(70) W/g en agua y 530(120) W/g en VS55, comparables dentro de la dispersión experimental, indicando que su eficiencia magnetotérmica se mantiene en el medio crioprotector. Para las IONPs de 11 nm recubiertas con CP, en cambio, se observó un aumento del SAR de aproximadamente 170(60) W/g en agua a 380(100) W/g en VS55.

Conclusiones. Entre las estrategias evaluadas, el recubrimiento con CP permitió mantener las nanopartículas estables en VS55, a diferencia de los sistemas recubiertos con OH o PMAO. Asimismo, la tasa de calentamiento estuvo influenciada por el tamaño de las nanopartículas, observándose mayores valores de SAR para las de mayor tamaño. Las IONPs recubiertas con CP conservaron en VS55 valores de SAR comparables a los obtenidos en agua, lo que destaca el potencial de este recubrimiento para el desarrollo de sistemas magnéticos destinados a aplicaciones de nanocalentamiento en criopreservación.

Referencias

1. Han Z, Rao JS, Gangwar L, et al. *Nat Commun.* 2023;14(1):3407.
2. Lavorato GC, Azcárate JC, Rivas Aiello MB, et al.. *Appl Surf Sci.* 2021;570(September):151171.

DINÁMICA MOLECULAR DEL ZIF-8 COMO RESERVORIO DE OXÍGENO: PARTICIÓN, SALTOS ENTRE JAULAS Y BARRERA ENTRÓPICA

Pérez-Chávez, Néstor Ariel¹, Rafti Matías² y Albesa Alberto³

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
arielperez@inifta.unlp.edu.ar

Introducción

La reacción de reducción de oxígeno (ORR) es la semirreacción catódica en muchos dispositivos electroquímicos de conversión de energía. En condiciones biocompatibles —pH neutro, solución acuosa— el limitante no es el catalizador sino la baja solubilidad del O_2 , que empobrece la región vecina al electrodo y restringe la corriente. Una estrategia poco explorada es incorporar al electrodo un material poroso que almacene O_2 cerca de los sitios activos y lo libere al agotarse la solución local. El ZIF-8 cumple ese papel de manera pasiva: incrementa la corriente de ORR en soluciones neutras sin alterar el mecanismo de reacción ni desplazar el potencial de pico, y extiende la región bajo control cinético [1-3]. El beneficio, sin embargo, no crece con la cantidad depositada: al aumentar los ciclos de crecimiento la corriente de pico disminuye, atribuido tentativamente a un transporte menos eficiente de O_2 , iones o solvente en el film [2]. En este trabajo, presentamos estudios mediante dinámica molecular para dilucidar y determinar parámetros como la partición de O_2 entre el MOF y el agua y su dependencia con la carga, la hidratación del cristal, y el mecanismo, la frecuencia y la barrera del transporte interno.

Resultados y Conclusiones

El ZIF-8 concentra O_2 por un factor 183 respecto del agua en el límite diluido —el régimen relevante en solución acuosa—. Este factor cae a ~ 90 cuando hay varias moléculas por jaula: la capacidad se autolimita al llenarse. Además, sobrevive a la hidratación porque las jaulas alejadas de las caras permanecen secas. El transporte interno no es difusión ordinaria sino una secuencia de saltos entre jaulas, con una frecuencia de $\sim 0.8 \text{ ns}^{-1}$ por molécula y una difusividad más de un orden de magnitud menor que en agua. La barrera de ese salto resulta casi enteramente entrópica: su componente entálpica es de unos 3 kJ/mol, indicando que al O_2 no le cuesta energía atravesar la ventana sino encontrarla. El ZIF-8 es entonces, a la vez, buen reservorio y mal conductor: no mejora el transporte de O_2 sino que acumula una reserva y la entrega en los transitorios, régimen en el que un modelo continuo de doble porosidad lo describe como un capacitor de O_2 y no como un camino de conducción.

Referencias

- [1] Rafti, M., Marmisollé, W. A., Azzaroni, O., *Adv. Mater. Interfaces*, **2016**, 3, 1600047.
- [2] Fenoy, G. E., Scotto, J., Azcárate, J., Rafti, M., Marmisollé, W. A., Azzaroni, O., *ACS Appl. Energy Mater.*, **2018**, 1, 5428-5436.
- [3] López, F. C. D., Bertoni, A. I., Allegretto, J. A., Marmisollé, W. A., Azzaroni, O., Rafti, M., Grumelli, D., *ChemCatChem*, **2022**, 14, e202201015.



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA

I N I F T A



XVIII Jornadas de Tesistas del INIFTA 2026

EXPOSICIONES ORALES DE ESTUDIANTES DE POSGRADO

CINÉTICAS DE OXIDACIÓN *IN SITU* DE MAGNETITA NANOESTRUCTURADA POR DIFRACCIÓN DE RAYOS X CON LUZ SINCROTRÓN

Alí, Francisco L.¹, Paino, Franco D.¹, Orozco-Henao, Juan M.¹, Muraca, Diego²,
Lavorato, Gabriel C.¹ y Fonticelli, Mariano H.¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
 2. Instituto de Física "Gleb Wataghin", Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Campinas, São Paulo, Brazil
- franciscoali@inifta.unlp.edu.ar

Introducción: La oxidación de magnetita (Fe_3O_4) a maghemita ($\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$) es una transformación relevante en nanopartículas (NPs) de óxidos de hierro, con implicancias sobre sus propiedades magnéticas y químicas. Comprender este proceso resulta esencial para controlar el desempeño de estas NPs en aplicaciones como catálisis, remediación ambiental y tecnologías biomédicas¹. En la literatura se describe mediante un modelo basado en resolver la segunda ley de Fick por ser una reacción limitada por difusión. A partir del trabajo realizado en años previos², tanto en experimentos cinéticos en dispersiones de NPs como en simulaciones, determinamos las limitaciones del modelo obtenido a partir de las condiciones de contorno convencionales cuando se aplica a sistemas reales de NPs. Posteriormente se plantearon modelos extendidos que tienen en cuenta factores como la morfología, la polidispersidad, los gradientes de concentración y los agentes de recubrimiento para corregir las desviaciones respecto al modelo convencional que se presentan al momento de interpretar resultados experimentales.

Resultados: Con el objetivo de poner a prueba los modelos estudiados, llevamos a cabo medidas experimentales de difracción de rayos X en la línea PAINEIRA de la fuente de luz sincrotrón SIRIUS (LNLS-CNPEM). Se realizaron tanto rampas de temperatura como isoterms bajo flujo de aire seco en muestras de NPs de magnetita no estequiométrica con distintos tamaños y morfologías. Los difractogramas se procesaron mediante un script de elaboración propia para procesar múltiples patrones en simultáneo. Se obtuvieron curvas de avance de la reacción de oxidación a partir de dos vías: la variación del parámetro de red aplicando la regla de Vegard, y la variación del área de los picos. A través de los coeficientes de difusión obtenidos de los ajustes con los modelos extendidos, podemos comparar distintas muestras a una misma temperatura y analizar los gráficos de Arrhenius de las distintas muestras.

Conclusiones: Los resultados revalidan el uso de los modelos extendidos y evidencian una dependencia del coeficiente de difusión con el tamaño de las NPs. Además, se discuten las ventajas del uso del parámetro de red respecto del área de pico para calcular los avances de reacción. Se agradece al LNLS del CNPEM y al equipo de la línea PAINEIRA por el uso del equipamiento (propuesta 20261482).

Referencias

- 1) Lavorato, G., *Nanotechnology*, **2023**, 34, 192001.
- 2) Orozco-Henao, J.M., *Chemistry of Materials*, **2024**, 36, 11095.

NANOHIDROGELES MUCOADHESIVOS CON NANOPARTÍCULAS DE POLIFENOLES PARA EL TRATAMIENTO DE ENFERMEDADES OCULARES

Alvarez Camilo Fabian¹, Mártire Daniel Osvaldo¹ y Bosio Gabriela Natalia¹

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
alvarezcamilof@inifta.unlp.edu.ar

Introducción

El resveratrol (RV) y la naringenina (NAR) han sido estudiados por sus propiedades antioxidantes, antiinflamatorias e inmunomoduladoras en distintas patologías oculares¹. Sin embargo, la baja solubilidad y biodisponibilidad del RV limitan su aplicación. Estudios previos demostraron que su encapsulación en nanopartículas puede mejorar su estabilidad y liberación, mientras que sistemas basados en quitosano, alginato y otros polímeros permiten aumentar la permanencia ocular y controlar la liberación de compuestos activos².

En este contexto, se han desarrollado nanogeles e hidrogeles termosensibles y mucoadhesivos capaces de gelificar *in situ*, prolongando el tiempo de residencia sobre la superficie ocular. Además, trabajos previos con formulaciones de polifenoles demostraron buena biocompatibilidad, liberación sostenida y protección frente al estrés oxidativo. Estos antecedentes respaldan el desarrollo de nanohidrogeles de alginato-quitosano cargados con nanopartículas híbridas de RV y NAR como una estrategia para mejorar la administración ocular de estos compuestos³.

Resultados

Se realizaron ensayos de liberación en células HeLa a diferentes concentraciones, en condiciones con y sin irradiación con luz visible. Las nanopartículas mostraron buena actividad frente al estrés oxidativo. Además, se sintetizaron diferentes formulaciones de geles mediante la combinación de alginato y quitosano con distintos polímeros termosensibles, obteniéndose diversos tipos de hidrogeles con características diferenciadas.

Conclusiones

Los resultados obtenidos permiten avanzar en el desarrollo de nanohidrogeles de alginato-quitosano como sistemas de administración ocular, con potencial para lograr una liberación controlada de resveratrol y naringenina y potenciar sus efectos antioxidantes y protectores celulares.

Referencias

- 1) De Luca I., *Antioxidants*, **2023**, 12, 993.
- 2) Bhatt P., *Sci. Pharm.*, **2024**, 92, 59.
- 3) Zucca G., *Int. J. Nanomed*, **2025**, 20, 907–932.

COMPLEJOS DE POLIELECTROLITO ASIMÉTRICOS: DESDE LOS FUNDAMENTOS HASTA SU APLICACIÓN

Apuzzo Eugenia¹, Azzaroni Omar¹, Maximiliano Agazzi² y Santiago. E. Herrera³

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. tesista@inifta.unlp.edu.ar
2. Instituto para el Desarrollo Agroindustrial y de la Salud, CONICET, Universidad Nacional de Río Cuarto, Ruta Nacional 36 KM 601, Río Cuarto (Córdoba), Argentina.
3. Instituto de Química de los Materiales, Ambiente y Energía, CONICET, Universidad de Buenos Aires, Intendente Güiraldes 2160, CABA (Buenos Aires), Argentina.

Introducción: Los complejos de polielectrolito (PECs) son materiales blandos que se forman por interacciones débiles entre polielectrolitos de carga opuesta en medio acuoso y pueden ser utilizados para diversas aplicaciones. Este trabajo se focaliza en el estudio de PECs asimétricos, en los que se reemplaza un polielectrolito por una molécula pequeña con 2 o más cargas.

Resultados:

Comportamiento de fases de PECs asimétricos: Mediante la construcción de los diagramas de fases de un sistema formado por polietilenimina-ion ferricianuro demostramos que los PECs asimétricos comparten características fundamentales con los PECs simétricos. La marcada asimetría de cargas modula la estabilidad y el comportamiento de fases, sin alterar los principios fisicoquímicos fundamentales que gobiernan estos sistemas.¹

Incorporación de proteínas mediante PECs asimétricos: A través del estudio de sistemas asimétricos de tres componentes (un bloque largo y dos cortos), se demostró que los PECs asimétricos constituyen plataformas versátiles para la encapsulación selectiva de proteínas. Mientras que la asimetría de las cadenas determina la selectividad, la composición del sistema regula la eficiencia de incorporación. Se postuló un mecanismo de captación de proteínas y se validó el mismo al evidenciar su potencial para la separación y purificación de mezclas de proteínas.²

Aplicaciones: Cuando se coloca uno de los componentes en exceso, es posible sintetizar gotas líquidas de PECs asimétricos de tamaño nanométrico con gran estabilidad coloidal. Mediante estudios *in vitro* e *in vivo* se demostró que los nano-PECs asimétricos constituyen una plataforma vacunal versátil, capaz de encapsular y proteger proteínas y activar la inmunidad innata. Su capacidad para inducir respuestas humorales y celulares específicas, memoria inmunológica y una respuesta Th1 controlada las posiciona como una estrategia promisoría para vacunas preventivas y terapéuticas.³

Conclusiones: Este trabajo permitió establecer un marco fisicoquímico para comprender los PECs asimétricos y demostrar que su marcada asimetría permite modular sus propiedades y funciones. Los resultados evidencian su versatilidad y potencial en diversas aplicaciones, sentando las bases para el diseño de nuevos complejos con propiedades y funcionalidades aún por explorar.

Referencias

- 1) Coria-Oriundo, L. L. et al., *J. Phys. Chem. B*, **2023**, 127, 7636–7647.
- 2) Apuzzo, E. et al., *Biomacromolecules*, **2025**, 26, 1171–1183.
- 3) Apuzzo, E. et al., *ACS Appl. Bio Mater.*, **2023**, 6, 4714–4727.

Ensamblado y caracterización de películas delgadas de Redes Metal Orgánicas

Arcidiácono Melina¹, Rafti Matías¹ y Azzaroni Omar¹

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. arcidiaconomelina@inifta.unlp.edu.ar

Introducción

La integración de redes metal orgánicas (MOFs) como el ZIF-8 en dispositivos funcionales requiere su procesamiento como películas delgadas continuas y homogéneas sobre sustratos específicos. Los métodos de crecimiento directo *in situ* pueden presentar limitaciones tales como agrietamiento, tiempos prolongados de síntesis y bajo control sobre el espesor final. Para superar esto, en este trabajo se estandarizó un protocolo de ensamblado físico mediante *spin-coating* a partir de suspensiones coloidales de nanopartículas de ZIF-8 (~40 nm). Se evaluó el depósito sobre sustratos de silicio monocristalino (Si/SiO₂ modificado con APTES) y oro (modificado con MPSA), caracterizando las propiedades geométricas, estructurales y ópticas mediante un enfoque multitécnica.

Resultados

La funcionalización previa de los sustratos con organosilanos (APTES) o tioles (MPSA) proporcionó grupos terminales -NH₂ y -SO₃ que promovieron la adhesión y uniformidad del depósito coloidal. Mediante elipsometría espectroscópica sobre silicio, se confirmó un crecimiento lineal y predecible del espesor según el número de ciclos de *spin-coating* (desde ~35 nm en la primera capa hasta >200 nm a los 10 ciclos). El bajo índice de refracción determinado ($n \approx 1,18$ -1,2 frente a 1,35 del ZIF-8 masivo) demostró una elevada porosidad construccional interparticular (73–79% de vacíos). La difracción de rayos X ratificó la conservación de la fase cristalina sodalita del ZIF-8 tras el procesamiento. Por su parte, la microscopía AFM confirmó la obtención de recubrimientos continuos con rugosidad moderada ($S_q = 17,45$ nm) y una capa base de ~35 nm. En sustratos de oro, las mediciones por SPR mostraron la aparición de modos guiados, revelando coincidencia entre la masa estimada ópticamente y la densidad de masa gravimétrica medida por microbalanza de cristal de cuarzo (QCM: $77,6 \pm 3,0$ g/cm² a los 10 ciclos).

Conclusiones

El ensamblado coloidal por *spin-coating* sobre sustratos funcionalizados constituye una metodología rápida, reproducible y con control nanométrico para la obtención de películas delgadas de ZIF-8. Los films resultantes preservan la estructura cristalina y una porosidad construccional superior al 70%, combinando continuidad mecánica con respuesta óptica integrada para aplicaciones en sensado.

Referencias

- 1) Eslava, S. et al. *Chem. Soc. Rev.* **2012**, 41, 7847–7870.
- 2) Lu, G.; Hupp, J. T. *J. Am. Chem. Soc.* **2010**, 132, 7832–7833.
- 3) Huang, A. et al. *Nanomaterials* **2018**, 8, 676.

EVALUACIÓN DEL DAÑO FOTOINDUCIDO POR SENSIBILIZADORES LIPOFÍLICOS E HIDROSOLUBLES EN PROTEOLIPOSOMAS DE DOPC Y DOPC:COLESTEROL

Carlos Alberto Ardila Padilla¹, María Antonieta Daza Millon¹, María Noel Urrutia¹, Vanesa Herlax², Andrés H. Thomas¹, Gonzalo Cosa³, Marcia Franco³, María Laura Dántola¹, Mariana Vignoni¹

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. cardila@inifta.unlp.edu.ar
2. Instituto de Investigaciones Bioquímicas de La Plata (INIBIOLP), Facultad de Ciencias Médicas (UNLP)-CONICET. Calle 60 y 120, (1900) La Plata, Argentina.
3. Department of Chemistry, McGill University, Otto Maass Chemistry Building 801 Sherbrooke Street West Montreal, Canada.

Introducción. Muchos compuestos heterocíclicos naturales, como pterinas y flavinas son fotoquímicamente activos y pueden actuar como fotosensibilizadores (Sens), es decir, moléculas que son capaces de absorber radiación en un rango del espectro electromagnético en el cual las biomoléculas no absorben y generar especies excitadas capaces de dañarlas¹. El descubrimiento de estos procesos ha generado la necesidad de buscar y estudiar aquellos compuestos que pueden actuar como Sens, con el fin de evitar la exposición a los mismos y entender los mecanismos por los cuales actúan. En los últimos años, se ha demostrado que los Sens lipofílicos son mucho más eficientes para generar daño en membrana que los hidrosolubles debido al contacto directo con la bicapa lipídica². Por otro lado, el estudio de los procesos fotosensibilizados se ha llevado a cabo principalmente en sistemas homogéneos, los cuales, no necesariamente representan lo que puede estar ocurriendo a nivel celular. En este trabajo se utilizaron como modelo de estudio proteoliposomas (PLs), sistemas constituidos por vesículas unilamelares grandes (LUVs) en cuya membrana se incorporan proteínas que interaccionan con la misma. La proteína empleada fue α -hemolisina (HlyA), exotoxina formadora de poros, secretada por cepas uropatogénicas de *E.coli* cuya actividad lítica involucra la unión, inserción y oligomerización de la toxina en la membrana de la célula blanco (glóbulos rojos, linfocitos, macrófagos, etc). Como modelo de membrana se emplearon LUVs constituidos por DOPC y DOPC:Chol (2:1) y como Sens, Riboflavina (Rf) y su análogo lipofílico *N*-decil-Riboflavina (decil-Rf). Con el objetivo de evaluar la capacidad de estos Sens de generar alteraciones fotoinducidas, mezclas de PLs y Sens fueron expuestos a luz azul (445 nm) por diferentes tiempos. Se empleó H₄BPMHC, una sonda sensible a especies reactivas de oxígeno (ROS)³ para evaluar el efecto de la composición lipídica y la presencia de la toxina en el proceso fotoinducido adicional a esto se empleó Laurdan como indicador de la fluidez de membrana. Se midió la intensidad de fluorescencia de la sonda en función del tiempo de irradiación y se empleó microscopía de campo amplio.

Resultados y Conclusiones. Se observó un rápido consumo de H₄BPMHC en comparación al tiempo de desactivación de la proteína al exponer los PLs a la luz en presencia de decil-Rf. Por otra parte, los resultados obtenidos con Laurdan sugieren que la fluidez de la membrana no se ve afectada por la presencia de HlyA, ni por irradiación cuando no está presente el Sens. Por otra parte, no se observaron cambios significativos al usar Rf como Sens. Estos resultados demuestran que la eficiencia de decil-Rf se debe a que se encuentra unida a la membrana lipídica.

Referencias

- 1) Baptista, M., et. al. *Photochem Photobiol*, **2017**, 93, 912-919.
- 2) Sosa, M. J., et. al. *BBA-Biomembranes*, **2023**, 1865(5).
- 3) Greene, L. E., et.al. *J. Am. Chem. Soc.* **2017** 139 (44), 15801–15811.

DE PELÍCULAS PLANAS A MICROCÁPSULAS: PERMEABILIDAD FOTOMODULADA EN MULTICAPAS DE POLIELECTROLITOS PAH-Cap/PSS

Gerardo Armijos-Cap¹, Marcin Strawski² M. Ana Huergo¹, Fiorela Ghilini¹, Andrés H. Thomas¹, Mariana P. Serrano¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. agarmijoscapa@inifta.unlp.edu.ar
2. University of Warsaw, Faculty of Chemistry, 02-093 Warsaw, Poland.

Introducción: Los sistemas de liberación de fármacos activados por luz representan una estrategia innovadora en la medicina terapéutica, brindando una precisión espacio y temporal sobresaliente para la liberación controlada de compuestos bioactivos. En este estudio se reporta la fabricación y caracterización de multicapas de polielectrolitos (PEMs) autoensambladas y fotorrespondientes, basadas en poli(clorhidrato de alilamina) funcionalizada con 6-carboxipterina (PAH-Cap) combinada con poli(4-estirensulfonato de sodio) (PSS), ensambladas mediante la técnica Layer-by-Layer.

Resultados: Las multicapas se construyeron tanto sobre sustratos planos de mica como sobre micropartículas de CaCO_3 . El PAH-Cap fue funcionalizado con un grado de sustitución de Cap de $\sim 1\%$, conservando suficientes grupos amino libres para permitir una formación estable de las multicapas, al tiempo que incorporó unidades fotoactivas capaces de responder a la exposición a luz UVA. La caracterización mediante microscopía de fuerza atómica (AFM) reveló que las multicapas PAH-Cap/PSS sobre mica exhiben un crecimiento lineal del espesor y un aumento exponencial de la rugosidad, lo que indica una disposición regular capa por capa seguida de una transición de capas uniformes a grandes agregados poliméricos por encima de las 5 bicapas. Tras la exposición a luz UVA, los resultados de AFM mostraron que la degradación fotoquímica conduce a una reducción del espesor de la película y a un aumento de la rugosidad. Estos cambios se correlacionaron con mediciones de voltamperometría cíclica (CV), demostrando que inducen modificaciones en la estructura de multicapas PAH-Cap/PSS y generando una arquitectura más permeable. Se fabricaron además microcápsulas huecas (HM) de hasta cuatro bicapas de PAH-Cap/PSS sobre moldes de CaCO_3 , seguido de la disolución del molde mediante EDTA. La espectroscopía de fluorescencia confirmó que las propiedades fotofísicas de Cap se conservan en las HM-(PAH-Cap/PSS)₄. La liberación controlada desde estas estructuras se demostró cargando el molde de CaCO_3 con FITC-Dextran (500 kDa) mediante coprecipitación. La liberación fotoinducida de FITC-Dextran se confirmó mediante microscopía de fluorescencia confocal, monitoreando los cambios en la intensidad de emisión del FITC-Dextran tras 5 min de irradiación UVA. Las cápsulas mantuvieron su integridad estructural durante todo el proceso, lo que indica que la liberación ocurre a través de la modulación de la permeabilidad y no de la ruptura de la cápsula.

Conclusiones: Estos hallazgos respaldan el potencial de las microcápsulas basadas en PAH-Cap como vehículos de liberación activados por luz para aplicaciones terapéuticas.

Referencias

- 1) Armijos-Capa, Gerardo, et al., *ACS Applied Materials & Interfaces*, **2023**, 16 3922-3934.
- 2) Strawski, Marcin, et al., *Electrochimica Acta*, **2017**, 226, 121-131.
- 3) Balabushevich, Nadezhda G., et al. *Macromolecular bioscience*, **2016**, 16, 95-105.

FOTOTERMIA PLASMÓNICA COMO PLATAFORMA TERAPÉUTICA FRENTE A DEPÓSITOS AMILOIDEOS

María Alejandra Borzi, Eduardo Daniel Prieto y María Ana Huergo

Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
alejandraborzi@inifta.unlp.edu.ar

Introducción. La amiloidosis constituye un desafío terapéutico de alta complejidad, caracterizada por la agregación de proteínas en conformaciones de lámina β que evolucionan hacia fibrillas altamente resistentes a la degradación enzimática. Dicha acumulación progresiva compromete la funcionalidad de múltiples órganos y tejidos. A la fecha, no se dispone de terapias curativas, lo que conduce frecuentemente a la falla orgánica.

En este contexto, la fototermia plasmónica emerge como una modalidad terapéutica de ablación selectiva, capaz de inducir calentamiento localizado mediante la excitación de nanomateriales plasmónicos. Específicamente, nanopartículas excitables en la ventana del infrarrojo cercano (NIR) permiten actuar sobre los depósitos amiloides minimizando el daño colateral sobre los tejidos sanos circundantes quienes presentan un mínimo de absorción [1].

El presente trabajo explora el potencial de nanotriángulos de oro (AuNTs) con respuesta en el NIR como agentes fototérmicos dirigidos a la desestabilización de agregados amiloides. Como sistema modelo se empleó la Apolipoproteína A-I (Apo A-I), tanto en su forma nativa como en variantes mutantes, un paradigma ampliamente validado en la literatura para el estudio de fibrilación amiloidogénica [2].

Resultados. La morfología de las fibrillas amiloides se realizó mediante microscopía electrónica de transmisión (TEM) y con tinción negativa de acetato de uranilo, microscopía de fuerzas atómicas (AFM) en modo tapping® sobre mica, y Cryo-TEM. Estas técnicas permitieron evaluar la estructura, longitud, altura y estado de agregación de las fibras antes y después del tratamiento con cantidades crecientes de AuNTs (50–250 μ M). Los resultados revelaron alteraciones morfológicas de las fibras junto con una reducción significativa de su tamaño, consistentes con su disgregación inducida por el calor local plasmónico. Aún a temperaturas superiores que las generadas por la irradiación no mostraron cambios, confirmando el efecto de hipertermia localizada. Finalmente, los AuNTs mantuvieron su estabilidad estructural tras la irradiación.

Conclusiones: Los datos obtenidos posicionan a la fototermia plasmónica mediada por AuNTs como una herramienta promisorio para la disgregación de depósitos amiloides, demostrando eficacia tanto sobre fibrillas nativas como mutantes de Apo A-I. La robustez estructural de los nanotriángulos frente a la irradiación constituye una ventaja operativa clave, ya que habilita esquemas de tratamiento iterativos sin necesidad de readministración. Estos resultados sientan las bases para el diseño de nanoplataformas fototérmicas aplicables a terapias dirigidas contra patologías amiloidogénicas.

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.

RECUBRIMIENTOS ANTIMICROBIANOS Y BIOCOMPATIBLES PARA LA PREVENCIÓN DE INFECCIONES RELACIONADAS CON DISPOSITIVOS ORTOPÉDICOS

Bujan Ariana¹, Prieto Eduardo¹, Franco Vanina G.^{2,3}, Benitez Guillermo¹, Fagali Natalia S.¹ y Schilardi Patricia L.¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. arianabujan@inifta.unlp.edu.ar
2. Instituto de Nanociencias y Materiales de Aragón (INMA), Universidad de Zaragoza (UNIZAR), Zaragoza, España.
3. Facultad de Bioquímica y Ciencias Biológicas (FBCB), Universidad Nacional del Litoral (UNL), Santa Fe, Argentina.

Introducción: Las infecciones relacionadas con dispositivos ortopédicos (ODRI) representan un importante problema para la salud pública [1]. Su tratamiento es un gran desafío ya que suelen ser causadas por microorganismos resistentes [2] que, además, se adhieren a la superficie de la prótesis formando estructuras tridimensionales (*biofilms*) que otorgan tolerancia a los antibióticos. Por lo tanto, con el objetivo de prevenir o tratar ODRI, desarrollamos recubrimientos capa por capa (LbL) sobre titanio, compuestos por alginato e incorporando Ag(I) como agente antimicrobiano. Dichos recubrimientos se obtuvieron mediante incubaciones secuenciales de discos de titanio en soluciones de alginato de sodio, CaCl_2 y AgNO_3 , obteniendo películas de una y cinco capas (Ti/Alg/Ag 1c y Ti/Alg/Ag 5c respectivamente).

Resultados: Mediante ATR-FTIR y XPS se confirmó la presencia de alginato y Ag sobre las superficies recubiertas. Medidas de ángulo de contacto indican que las superficies funcionalizadas son más hidrofílicas que el Ti y, mediante microscopía óptica, se determinó que las películas son estables en medio acuoso durante 24 h. La liberación de Ag a 24 h, cuantificada por ICP-OES, fue de $4 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ y $25 \mu\text{g}/\text{cm}^2$ para Ti/Alg/Ag 1c y Ti/Alg/Ag 5c, respectivamente. Imágenes de AFM revelaron una distribución heterogénea de la película, con espesores de hasta 210 nm. Se evaluó la actividad antimicrobiana frente a *Staphylococcus aureus* ATCC 25923. La superficie Ti/Alg/Ag 5c presentó una adhesión bacteriana dos órdenes de magnitud menor que el Ti luego de 2 h, mientras que Ti/Alg/Ag 1c no presentó diferencias significativas con el control; sin embargo, ambos recubrimientos erradicaron la carga microbiana a las 24 h. Ensayos de biocompatibilidad en preosteoblastos MC3T3-E1 y fibroblastos L929 mostraron una disminución de la adhesión y viabilidad celular en contacto directo con las superficies recubiertas. En cambio, la exposición a extractos obtenidos por incubación de las muestras en medio de cultivo no afectó la viabilidad, indicando que los iones Ag(I) liberados no ejercieron efectos citotóxicos.

Conclusiones: Se obtuvieron películas nanométricas de espesor variable sobre Ti que mostraron actividad antimicrobiana y baja citotoxicidad asociada a los componentes liberados. Estas características les confieren un potencial prometedor para la prevención de ODRI en aplicaciones biomédicas en las que la osteointegración no constituye el objetivo principal de la intervención.

Referencias

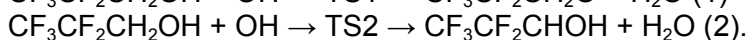
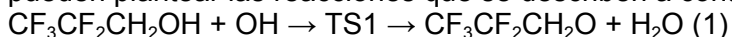
- 1) Moriarty, F.T., et al. *EFORT Open Rev.* **2016**, 20, 89-99.
- 2) Villa, J. M., et al. *J. Arthroplasty*, **2021**, 36, 274-278.

ESTUDIO CINÉTICO TEÓRICO DE LA REACCIÓN DEL ALCOHOL $\text{CF}_3\text{CF}_2\text{CH}_2\text{OH}$ CON RADICALES OH

Caballero Lawrence, Amanda¹ y Badenes, María Paula¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
aclawrence@inifta.unlp.edu.ar

Introducción: Los clorofluorocarbonos (CFC) son sustancias que se han utilizado en la industria como agentes refrigerantes y disolventes. Sin embargo, contribuyen ampliamente al agotamiento del ozono atmosférico. Por tal motivo, se han desarrollado sustituyentes como los alcoholes parcialmente fluorados (HFA), que no contienen átomos de cloro en su composición y disminuyen su impacto ambiental. No obstante, es de suma importancia estudiar su cinética debido a que estos compuestos reaccionan fácilmente con agentes oxidantes como los radicales hidroxilo (OH) presentes en la atmósfera y el gran número de enlaces C-F pueden dar origen a otras sustancias con mayor permanencia atmosférica.¹ El alcohol $\text{CF}_3\text{CF}_2\text{CH}_2\text{OH}$ presenta varias vías de abstracción de sus átomos de hidrógeno pero, de acuerdo a su estructura, aquellos enlazados al C3 resultan equivalentes entre sí. Por lo tanto, se pueden plantear las reacciones que se describen a continuación:



Resultados: Se obtuvieron los estados de transición correspondientes a cada canal de abstracción de átomos de hidrógeno propuesto (ver Figura 1) y se construyeron las correspondientes superficies de energía potencial. Posteriormente, se determinaron las constantes de velocidad de ambos canales de reacción en un rango de temperatura de 200 a 1000 K mediante la Teoría del Estado de Transición, incorporando correcciones por efecto túnel mediante el método de Wigner. La información estructural y termoquímica necesaria se derivó de cálculos previos al nivel M06-2X empleando la base extendida 6-311++G(3df,3pd). Se espera, además, a partir de la energética obtenida, que el canal de reacción más relevante sea el canal 2, en buena concordancia con resultados previos.¹

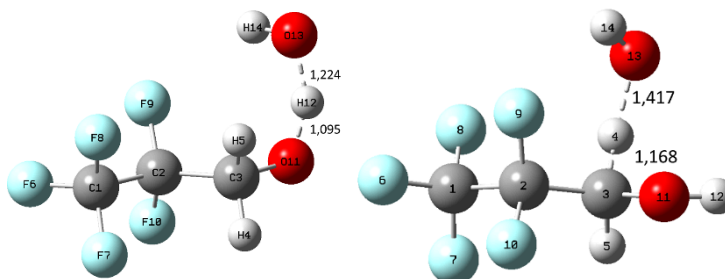


Figura 1: Estructuras de los estados de transición de TS1 (izquierda) y TS2 (derecha). Dist. en Å.

Conclusiones: Los resultados preliminares muestran que la cinética de reacción presenta un comportamiento no-Arrhenius en el intervalo de temperaturas estudiado.

Referencias

- 1) Wang, Y et al. *J. Phys. Chem. A*, **2006**, 110.

MATERIALES BASADOS EN AGREGADOS AMILOIDES DE ALBÚMINA CON POTENCIAL ANTIMICROBIANO

Calibio Giraldo Ivon¹, Díaz Carolina² Schilardi Patricia¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
2. Max Planck Institute for Medical Research, Heidelberg, Germany.

Las infecciones asociadas a dispositivos médicos representan una crisis sanitaria global, agravada por la formación de biofilms microbianos. Esta problemática es particularmente relevante en biomateriales de policloruro de vinilo (PVC), un material ampliamente utilizado en cánulas, catéteres y tubos endotraqueales. Previamente demostramos que los recubrimientos de agregados amiloides de albúmina (BSA) sobre PVC reducen la adhesión bacteriana y potencian el efecto de la vancomicina [1]. Como extensión de este trabajo, desarrollamos también hidrogeles amiloides de BSA al 5%, con y sin ácido hialurónico (HA), para su posible aplicación como apósitos activos. Sobre estos estudios se presentarán resultados preliminares. La BSA es biocompatible, de bajo costo y versátil para formar agregados con propiedades interfaciales y antimicrobianas en ambos formatos, lo que la convierte en un material ideal para este fin.

Films sobre PVC y vidrio se obtuvieron a partir de una dispersión de agregados amiloides obtenidos por reacción de la BSA con ditiotreitól (DTT). Se recubrieron superficies de vidrio (como modelo) y de PVC por inmersión en la dispersión durante 6 h a 37 °C. La caracterización superficial y físicoquímica se realizó mediante AFM, ATR-FTIR, microscopía confocal, UV-Vis, utilizando también tinciones con tioflavina T (ThT) y rojo Congo. La actividad antibacteriana frente a *S. aureus* se determinó por recuento en placa, y la biocompatibilidad se evaluó en células HeLa. Los *hidrogeles de BSA al 5% (p/v)*, con y sin HA, se obtuvieron a partir de dispersiones de BSA en agua destilada con NaOH 1 N, promoviendo la reducción mediante el agregado de tris(2-carboxietil)fosfina (TCEP) 1 M. En los hidrogeles con HA, el ácido hialurónico se añadió antes de la adición del TCEP. La polimerización se realizó durante 1 h a temperatura ambiente, seguida de un ciclo de frío de 24 h a 4 °C y otro ciclo de 24 h a temperatura ambiente, tras lo cual los hidrogeles se almacenaron a 4 °C. La caracterización preliminar se realizó mediante microscopía confocal con tinción ThT y rojo Congo, y halos de inhibición frente a *S. aureus*.

Los *films* modificaron la mojabilidad y las propiedades interfaciales de las superficies, reduciendo la adhesión bacteriana y celular sin generar toxicidad en PVC. La combinación con vancomicina (0,078 µg/mL; 8 veces menor que la CIM de 0,625 µg/mL) erradicó bacterias sésiles y planctónicas, logrando evitar la formación de biofilms de *S. aureus*.

Los *hidrogeles* mostraron fluorescencia con ThT y tinción positiva con rojo Congo, confirmando la formación de agregados amiloides. Asimismo, se evidenciaron halos de inhibición frente a *S. aureus*, indicando actividad antimicrobiana. La obtención de amiloides de BSA a partir de distintos tipos de reductor permitió desarrollar tanto films superficiales, que favorecen la sinergia antimicrobiana e inhiben la formación de biofilms, como hidrogeles amiloides con capacidad de incorporar HA, cuyos resultados antimicrobianos preliminares resultan prometedores para su aplicación en apósitos. En conjunto, estos hallazgos refuerzan la versatilidad de la albúmina como material de partida escalable para combatir infecciones en distintos entornos clínicos.

Referencias

- 1) Calibio Giraldo, I.Y., Ghilini, F., Prieto, E., Díaz, C., Schilardi, P.L., *JCIS Open*, **2026**, 21, 100166.

EFFECTOS DE CURVATURA Y REGULACIÓN DE CARGA EN LA ADSORCIÓN COMPETITIVA DE PROTEÍNAS

Cathcarth Marilina¹, Ceolín Marcelo R.¹, Picco Agustin S.¹ y Longo Gabriel S.¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
mcathcarth@inifta.unlp.edu.ar

Introducción:

Comprender cómo el tamaño de las nanopartículas y las condiciones del medio modulan la adsorción de proteínas, y cómo distintas especies compiten por la interfaz, es relevante para interpretar biointerfaces complejas. En este trabajo aplicamos Teoría Molecular para estudiar la adsorción de lisozima y β -lactoglobulina sobre nanopartículas de sílica, analizando el efecto del pH, la concentración de sal y la curvatura, tanto en soluciones de las proteínas individuales como en mezclas binarias.

Resultados:

Los resultados muestran que la curvatura modula la adsorción principalmente a través de contribuciones electrostáticas de largo alcance. Al disminuir el radio de la nanopartícula aumenta la adsorción por unidad de área de ambas proteínas, mientras que la contribución atractiva de contacto permanece prácticamente invariante. El análisis del potencial de fuerza media muestra que este efecto está asociado principalmente con la reducción de la barrera repulsiva originada por interacciones proteína-proteína. En el caso de la lisozima, la curvatura también modifica una población secundaria localizada más allá de la capa de contacto, cuya formación depende de la persistencia de la atracción electrostática proteína-superficie. Además, estudiamos la adsorción competitiva desde una mezcla binaria equimolar de lisozima y β -lactoglobulina. La composición de la capa adsorbida presenta un cambio abrupto con el pH: en condiciones ácidas domina la β -lactoglobulina, mientras que a pH más alto la interfaz pasa a estar dominada por lisozima. Al aumentar la concentración de NaCl de 10 a 150 mM, el *crossover* de selectividad se desplaza de pH $\approx$ 5.4 a pH $\approx$ 6.2. Cerca del *crossover*, ambas proteínas ocupan regiones interfaciales fuertemente solapadas, sin una segregación radial pronunciada.

Conclusiones:

La curvatura de la nanopartícula modifica principalmente las contribuciones electrostáticas de la adsorción, mientras que las interacciones de corto alcance responsables del contacto proteína-superficie son poco sensibles al radio. En mezclas binarias, la selectividad interfacial cambia abruptamente con el pH y, cerca del *crossover*, ambas proteínas ocupan regiones interfaciales fuertemente solapadas. Estos resultados muestran que la cantidad adsorbida es sensible al pH, la concentración salina y la curvatura de la nanopartícula, mientras que en mezclas binarias el pH y la concentración salina controlan además la composición de la capa interfacial.

Referencias

- 1) Cathcarth, M., et al., *J. Phys.: Condens. Matter*, **2022**, 34, 364001.
- 2) Tárraga, W. A., et al., *J. Colloid Interface Sci.*, **2026**, 702, 138819.
- 3) Cathcarth, M., et al., *Colloids Surf. B: Biointerfaces*, enviado, **2026**.

CARACTERIZACIÓN TEÓRICA DE LA ENCAPSULACIÓN Y LIBERACIÓN DE DOXORRUBICINA EN NANOGELES COPOLIMÉRICOS DE NIPAM-CO-MAA SENSIBLES A pH Y TEMPERATURA

Cruz-González Ana María¹, Albesa Alberto G.¹ y Longo Gabriel S.¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
tesista@inifta.unlp.edu.ar

Introducción: Las redes poliméricas entrecruzadas a escala nanométrica (nanogeles) son plataformas prometedoras para aplicaciones biomédicas debido a su elevada área superficial y capacidad para responder de forma reversible a estímulos externos.¹ En este trabajo se investiga, mediante una teoría molecular desarrollada en nuestro grupo que opera en condiciones de equilibrio termodinámico, la respuesta de nanogeles copoliméricos compuestos por N-isopropilacrilamida (NIPAm, termosensible) y ácido metacrílico (MAA, pH-sensible).² Se evalúa el efecto del pH y la temperatura (por debajo y por encima de la temperatura de transición de fase volumétrica, VPTT) sobre el estado conformacional del gel y su capacidad para encapsular y liberar el fármaco antitumoral doxorubicina (Dox).

Resultados: Los resultados preliminares muestran que la VPTT se desplaza hacia mayor temperatura al aumentar la proporción de MAA en la red.³ En solución con concentración salina fisiológica ($[NaCl] = 0.1\text{ M}$) y 2% de entrecruzante, se observó que la composición del copolímero dicta la respuesta del nanogel: a contenidos de MAA superiores al 20%, el elevado apantallamiento electrostático suprime las respuestas a pH y temperatura. Con 5% de MAA, domina la respuesta hidrofóbica de NIPAm, manteniéndose el nanogel hinchado a baja temperatura y colapsado a alta temperatura, independientemente del pH. En cambio, con 10% de MAA se manifiesta un acoplamiento dual donde el gel permanece hinchado a bajas temperaturas, mientras que a altas temperaturas ($T > VPTT$) el comportamiento cambia según el pH: a $pH < pK_a$ (MAA protonado) prevalece el colapso hidrofóbico, y a $pH > pK_a$ (MAA desprotonado) la repulsión electrostática promueve el hinchamiento. En este último régimen, el nanogel absorbe cationes para compensar la carga interna; debido a la competencia electrostática entre los iones Na^+ y la Dox, el menor costo energético de transferencia favorece la incorporación de sodio sobre el fármaco. Por este motivo, la encapsulación eficaz de doxorubicina exige trabajar a bajas concentraciones de sal, mientras que la liberación del fármaco se desencadena al aumentar la fuerza iónica del medio mediante intercambio catiónico.

Conclusiones: La teoría molecular constituye una herramienta predictiva clave para comprender la termodinámica de nanogeles con respuesta a estímulos. Se determinó que una composición del 10% de MAA y la fina modulación de la fuerza iónica del medio permiten optimizar el balance entre interacciones electrostáticas e hidrofóbicas, estableciendo las condiciones operativas para la carga y liberación controlada de Dox.

Referencias

- 1) Belman-Flores C. E., et al., *J. Mater. Sci. Mater. Med.* **2020**, 31, 61.
- 2) Daly, A. C., et al., *Nat. Rev. Mater.* **2020**, 5, 20–32.
- 3) Cruz-González, A. M., et al., *Macromolecules* **2025**, 58, 8511-8523.

VAINILLINA Y SU DÍMERO FRENTE A RADIACIÓN UVA: CAPACIDAD ANTIOXIDANTE E IMPLICANCIAS TOXICOLÓGICAS

Fernandez Heryerli¹, Parisi Julieta M.², Nagai Nadia F.³, Bosio Gabriela N.¹, y Lorente Carolina¹

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. heryerli@inifta.unlp.edu.ar
2. Instituto Multidisciplinario de Biología Celular (IMBICE), CICPBA – CONICET, UNLP, La Plata, 1900 Argentina.
3. Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencia y Tecnología de Alimentos (CIDCA), CONICET, CICPBA, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata (UNLP), CCT La Plata-CONICET, La Plata 1900, Argentina.

Introducción

Los antioxidantes son ampliamente utilizados en las industrias farmacéutica, cosmética y alimentaria debido a su capacidad antioxidante. Sin embargo, su evaluación se realiza principalmente mediante ensayos químicos y biológicos en condiciones de oscuridad, sin considerar las posibles modificaciones de su actividad y comportamiento frente a la radiación UVA.¹ Esta consideración resulta particularmente relevante en productos de uso tópico, donde los antioxidantes pueden estar expuestos a la radiación solar y sufrir procesos fotoquímicos que conduzcan a la formación de nuevos productos con propiedades diferentes a las del compuesto original.² En este trabajo se compararon las propiedades antioxidantes y el comportamiento fotoquímico de la vainillina (Van) y su principal producto de oxidación, el dímero de vainillina (Van₂), evaluando su capacidad para prevenir el daño fotosensibilizado de biomoléculas, la generación de especies reactivas de oxígeno (ROS),³ así como su citotoxicidad y fototoxicidad en células HeLa.

Resultados y Conclusiones

Se evaluó comparativamente la actividad antioxidante, citotoxicidad y fototoxicidad de Van y Van₂ en oscuridad y bajo radiación UVA ($\lambda_{exc} = 365 \text{ nm}$). En solución, ambos compuestos disminuyeron el daño fotosensibilizado de biomoléculas por pterina, aunque Van mostró una mayor capacidad antioxidante. El análisis cinético demostró que la acción antioxidante ocurre principalmente mediante la recuperación del radical de Trp.⁴ En contraste, los ensayos colorimétricos realizados en oscuridad mostraron una mayor eficiencia de Van₂ para eliminar los radicales DPPH y ABTS. En células HeLa, ambos compuestos presentaron citotoxicidad para concentraciones de 0.8 mM y 0.4 mM, para Van y Van₂, respectivamente, sin observarse diferencias significativas entre las condiciones de oscuridad y exposición a UVA. Sin embargo, la irradiación UVA incrementó significativamente la generación de ROS intracelular en presencia de Van. Estos resultados evidencian que el comportamiento antioxidante de estos compuestos depende del sistema de evaluación y resaltan la importancia de considerar los productos de oxidación y su comportamiento bajo radiación UVA en el desarrollo de aplicaciones cosméticas.

Referencias

- 1) Godic, A., et al., *Oxid. Med. Cell. Longev.*, **2014**, 6, 860479.
- 2) A. Tai, et al. *Acta Biochim. Biophys. Sin.*, **2011**, 1810 (2), 170–177.
- 3) Aguiar, B., et al., *Molecules*. **2022**, 27 (1), 189.
- 4) Fernandez, H., et al. *Photochem. Photobiol.*, **2024**, 101 (4), 1049 -1060.

2-2'-BIFENOL COMO FOTOSENSIBILIZADOR UVA: ESTABILIDAD FOTOQUÍMICA Y DAÑO A BIOMOLÉCULAS

García Beltrán Karla Paola¹, Rodríguez-Muñiz Gemma M.², Lhiaubet-Vallet Virginie², Thomas Andrés H.¹ y Dántola M. Laura¹

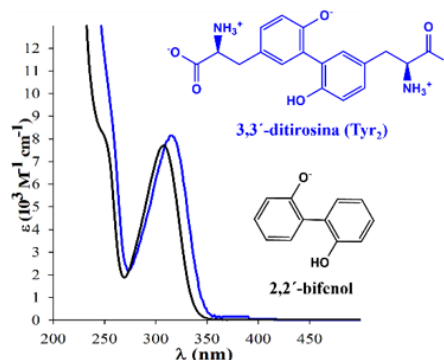
1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. beltrankarlap@inifta.unlp.edu.ar
2. Instituto Universitario Mixto de Tecnología Química (ITQ), Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Universidad Politécnica de Valencia, Valencia, España.

Introducción

Una de las modificaciones más relevantes asociadas a la oxidación de proteínas es la generación de 3,3'-ditirosina (Tyr_2), resultado del entrecruzamiento de dos residuos de tirosina (Tyr) mediante un enlace covalente carbono-carbono. La generación de Tyr_2 no solo induce cambios estructurales en las proteínas, lo que podría llevar a la pérdida de su función biológica, sino que también actúa como un fotosensibilizador (Sens) intrínseco capaz de absorber radiación en un rango del espectro electromagnético donde normalmente las proteínas no absorben.^[1,2] A pesar de la importancia biomédica de Tyr_2 , la información disponible sobre sus propiedades fotoquímicas sigue siendo limitada debido a las dificultades asociadas con su síntesis y aislamiento. En este contexto, resulta de particular interés el estudio del 2-2' bifenol, que contiene el mismo cromóforo que Tyr_2 (Figura 1). Esta analogía estructural nos permite utilizar a 2-2'bifenol como una molécula modelo para estudiar sus propiedades fotoquímicas y su capacidad fotosensibilizadora.

Resultados y Conclusiones

Se estudió la fotodegradación del 2,2'-bifenol bajo irradiación UVA y diferentes concentraciones de O_2 , donde se observó que 2-2'bifenol es fotoestable en condiciones anaeróbicas. Asimismo, durante la fotooxidación de soluciones alcalinas aireadas de 2,2'-bifenol (pH 10,1; $\lambda_{\text{exc}} = 320 \text{ nm}$), se detectó la generación de H_2O_2 , cuya concentración aumentó con el tiempo de irradiación.



Por otra parte, se analizó su capacidad fotosensibilizadora empleando tirosina (Tyr) y triptófano (Trp) como moléculas blanco. El análisis mediante HPLC-PDA mostró un descenso en la concentración de ambos aminoácidos tras la irradiación, lo que indica que 2-2'bifenol es capaz de generar daño químico fotoinducido en biomoléculas oxidables.

Referencias

- 1) Kanwar, R., Balasubramanian, D. *Experimental eye research*, **1999**, 68, 773-784.
- 2) Reid, Lara O., et al. *Photochemical & Photobiological Sciences*, **2019**, 18, 1732-1741.

FOTOOXIDACIÓN DE COMPONENTES DEL ADN SENSIBILIZADA POR PTERINA: UN ESTUDIO MECANÍSTICO SOBRE LA INFLUENCIA DEL pH Y LA ESTRUCTURA DEL SUSTRATO

Godoy Ortega, Gricelda¹, Niederst, Léo², Allonas, Xavier², Lorente, Carolina¹, Thomas, Andrés H.¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. ggodoy@inifta.unlp.edu.ar
2. Laboratoire de Photochimie et d'ingénierie Macromoléculaires, Université de Haute Alsace, 3b rue Alfred Werner, 68093, Mulhouse, Francia.

Introducción

Las reacciones fotosensibilizadas de tipo I desempeñan un papel relevante en el daño fotooxidativo de biomoléculas.⁽¹⁾ Entre los fotosensibilizadores endógenos, las pterinas pueden promover la oxidación mediante este mecanismo, el cual involucra la transferencia electrónica desde el sustrato hacia el estado triplete excitado del fotosensibilizador.⁽²⁾

En este trabajo se investigó la oxidación fotosensibilizada de 2'-desoxinucleósidos (dN) y 2'-desoxinucleótidos monofosfato (dNMP) que contienen las nucleobases guanina (G), adenina (A) y timina (T), utilizando pterina (Ptr) como fotosensibilizador modelo. El objetivo fue evaluar la influencia de la naturaleza de la nucleobase, la presencia del grupo fosfato y el pH del medio sobre la eficiencia de la fotosensibilización de tipo I.

Resultados

Mediante fotólisis estacionaria y fotólisis de destello láser (LFP) se caracterizó la interacción entre el estado triplete de Ptr ($^3\text{Ptr}^*$) y los distintos sustratos. La reactividad de $^3\text{Ptr}^*$ mostró una marcada dependencia con el pH y con la estructura del sustrato, con mayores constantes de desactivación en medio ácido y, en general, mayor para los nucleótidos respecto de los nucleósidos correspondientes. En concordancia con estos resultados, la eficiencia de fotooxidación siguió el orden $G > A > T$, consistente con la facilidad de transferencia electrónica de las distintas nucleobases.

La fotooxidación fue más eficiente en medio ácido que en medio alcalino. En los derivados de G, la menor contribución de la transferencia electrónica en medio alcalino fue compensada por la participación de un mecanismo de tipo II, dando lugar a velocidades globales de consumo similares en ambos medios.

Conclusiones

En conjunto, estos resultados demuestran que el pH y la estructura del sustrato modulan de manera significativa la eficiencia de la fotosensibilización de tipo I en un sistema modelo de relevancia biológica.

Referencias

- 1) Baptista, M.S. et al., *Photochem Photobiol.*, **2021**, 97, 1456–1483.
- 2) Lorente, C. et al.; *Acc. Chem. Res.*, **2006**, 39, 395–402.

CARACTERIZACIÓN DE MAGNETITA FUNCIONALIZADA CON PORFIRINAS DE COBALTO PARA SU USO EN ELECTROCÁTÁLISIS

Heredia Romina M. A¹, Benitez Guillermo¹, Giussi Juan² y Grumelli Doris¹

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. aheredia@inifta.unlp.edu.ar
2. YTEC. YPF TECNOLOGÍA. La Plata, Argentina

Introducción

Mejorar las velocidades y eficiencias de las reacciones electrocatalíticas es fundamental para impulsar las tecnologías de conversión de energía y producción de combustibles alternativos.^[1] En este contexto, la reacción de reducción de oxígeno (ORR), clave en las pilas de combustible, utiliza tradicionalmente platino como catalizador, un material de elevado costo. Como alternativas se estudian metales de transición como Fe, Co y Ni, así como porfirinas metálicas con tales elementos como centro activo. Estas últimas actúan como catalizadores de un solo átomo (SACs), ofreciendo un gran potencial de alta actividad catalítica por átomo metálico.

Este trabajo describe el uso de porfirinas de cobalto (CoTPP y CoTPP4N₂⁺) en superficies de magnetita (Fe₃O₄) monocristalinas y policristalinas como materiales de electrodo para mejorar la catálisis de la ORR, aprovechando, además, la alta abundancia natural de la Fe₃O₄. Se emplearon dos técnicas de funcionalización: *evaporación en fase vapor* en condiciones de ultra alto vacío (UHV) y *electrografting* en solución. Las muestras se caracterizaron mediante espectroscopía fotoelectrónica de rayos X (XPS), microscopía de efecto túnel (STM) y desorción programada por temperatura (TPD). Luego, se evaluó su rendimiento electrocatalítico para la ORR en medio alcalino (NaOH 0,1 M).

Resultados y Conclusiones

Las imágenes de STM obtenidas para el sistema CoTPP/Fe₃O₄(001) revelan con claridad la presencia de moléculas en la superficie y muestran que la reconstrucción característica de Fe₃O₄(001) se mantiene estable luego de la evaporación de porfirinas. Este resultado concuerda con el análisis mediante XPS, en el cual se observa una señal distintiva de N1s, aunque no se detectan señales correspondientes a Co2p. Asimismo, los sistemas CoTPP/Fe₃O₄(001) fueron analizados mediante TPD, cuyos resultados confirman que las especies moleculares presentes en la superficie corresponden mayoritariamente a CoTPP.^[2] A pesar de ello, la actividad electrocatalítica hacia la ORR es comparable a la de Fe₃O₄(001) sin funcionalizar. Por el contrario, los sistemas preparados mediante electrografting sobre superficies de Fe₃O₄ monocristalinas y policristalinas muestran señales claras de N1s y Co2p en XPS, acompañadas de mejoras en el rendimiento electrocatalítico.

Referencias

- 1) Hötger, D., *Physical Chemistry Chemical Physics*, **2019**, 21, 2587-2594.
- 2) Gottfried, J. M., "Molecular On-Surface Synthesis: Metal Complexes, Organic Molecules, and Organometallic Compounds", in *On-Surface Synthesis*, Springer International Publishing, Cham, **2016**, 131-165.

MEMRISTOR NANOFLUÍDICO BASADO EN NANOCANALES ÚNICOS RECONFIGURABLES POR pH

Huamani Angel Luciano,¹ Marmisollé Waldemar¹ y Azzaroni Omar.¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. huamaniluciano@inifta.unlp.edu.ar

Introducción. La sinapsis biológica co-localiza la señal, memoria y regla de aprendizaje en los propios canales biológicos que controlan el flujo de iones en las neuronas. Los memristores nanofluídicos mimetizan esta característica pero suelen ser volátiles y con reglas de conmutación fijas [1].

Resultados. Se funcionalizaron nanocanales únicos de polietileno tereftalato (PET) con la red metal-orgánica (MOF) UiO-66-NH₂ [2]. Las medidas de transporte iónico a través de ellos, en presencia de KClO₄, mostraron que el campo eléctrico en una determinada polaridad acumula contraiones hasta superar su solubilidad: el precipitado ocluye físicamente el canal y conmuta el estado del dispositivo entre dos estados de conductancia. El precipitado resultó estable hasta que se aplicó suficiente voltaje en la polaridad opuesta. Al ser el MOF anfótero, el pH invierte su carga superficial: en pH ácido domina la acumulación de aniones y en pH básico domina la acumulación de cationes, por lo que el voltaje de precipitación y de disolución se invierten. (**Figura 1**).

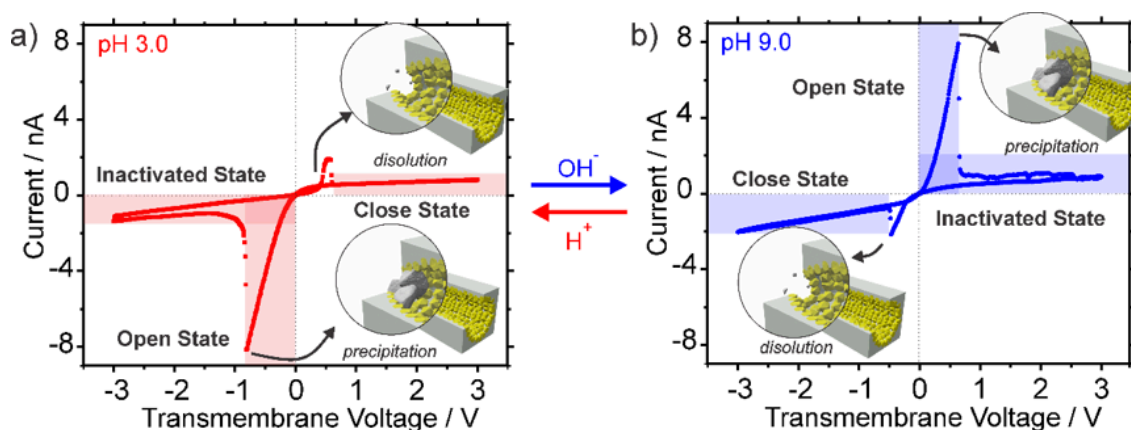


Figura 1. Curvas de corriente-voltaje en KClO₄ 100 mM (la dirección de barrido en ambos casos es en sentido horario) en a) pH ácido y b) pH básico.

Conclusiones. Se pudo integrar la lógica funcional de una sinapsis en un único canal gobernado por equilibrio ácido-base y voltaje transmembrana aplicado, constituyendo un memristor nanofluídico robusto y reconfigurable con perspectivas en aplicaciones en el campo de la computación neuromórfica.

Referencias

1. Magee, J.C.; Grienberger, C., *Annu. Rev. Neurosci.*, **2020**, 43, 95-117.
2. Huamani, A.L.; Laucirica, G.; Toimil-Molares, M.E.; Wagner, M.F.; Rafti, M.; Marmisollé, W.; Azzaroni, O., *Nanoscale*, **2025**, 17, 27538-27549.

DESARROLLO DE MATERIALES COMPUESTOS BIODEGRADABLES PARA REGENERACIÓN ÓSEA A PARTIR DE POLÍMEROS NATURALES, POLVOS METÁLICOS Y FITOCOMPUESTOS

Inchaurrondo Camila¹, Belluzo María Soledad¹ y Fagali Natalia Soledad¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. cami.inchaurrondo@inifta.unlp.edu.ar

Introducción

Los materiales biodegradables con actividad antimicrobiana se han vuelto una herramienta fundamental en la ingeniería de tejidos, ya que permiten la regeneración del tejido dañado mientras se degradan de forma segura en el organismo, combatiendo posibles infecciones asociadas a implantes.¹

En este plan de tesis planteamos el objetivo de desarrollar nuevos materiales que cumplan con estas propiedades, a partir de dos polímeros naturales: carboximetilcelulosa (CMC) y quitosano (Q). Estos polímeros, al formar hidrogeles, pueden emular la matriz extracelular y favorecer la proliferación celular. No obstante, sus limitaciones mecánicas requieren estrategias de refuerzo para su aplicación en tejido óseo, como la incorporación de partículas metálicas basadas en Fe, Mg y Zn para mejorar las propiedades mecánicas de las matrices. Por otro lado, para conferirle propiedades osteogénicas y antimicrobianas, se propone recubrir estos materiales con redes metal-fenólicas (MPNs) formadas por fitocompuestos, como el ácido tánico (TA), con iones metálicos como Fe(III) y Cu(II).

Se obtendrán biomateriales de CMC (aniónico) y Q (catiónico) empleando ultrasonido para fomentar la unión covalente entre los polímeros, una técnica eco-compatible llevada a cabo en medio acuoso. Durante el proceso de síntesis de las matrices se agregarán distintas cantidades de polvo de Fe, Fe-Mg y Fe-Mg-Zn (0-7%), tratados o no con agentes quelantes como citrato (Cit) y TA, con el objetivo de mejorar la dispersión y la eficiencia de incorporación de los polvos. Una vez liofilizados, los materiales serán caracterizados desde el punto de vista físicoquímico y mecánico, y se estudiará su cinética de degradación. Finalmente, se evaluará la citotoxicidad y actividad osteogénica de los biomateriales empleando líneas celulares en cultivo, así como su actividad antimicrobiana frente a bacterias modelo formadoras de biofilms.

Resultados

Se ensayaron materiales de CMC y Q con la incorporación de Fe-Mg previamente tratado con Cit a distintas concentraciones (0, 5, 10mM). El porcentaje de polvo metálico incorporado a la matriz se evaluó tras digestión ácida y cuantificación colorimétrica del hierro. Asimismo, se estudiaron las interacciones moleculares mediante espectroscopía infrarroja (ATR-FTIR).

Conclusiones

El tratamiento previo de los polvos de Fe5Mg con citrato favoreció su incorporación y dispersión en las matrices de CMC y Q, evidenciando el potencial de esta estrategia para la obtención de biomateriales híbridos con propiedades mejoradas.

Referencias

- 1) El-Husseiny, H.M., Mady, E.A., Hamabe, L., Abugomaa, A., Shimada, K., Yoshida, T., Tanaka, T., Yokoi, A., Elbadawy, M., Tanaka, R., *Mater. Today Bio*, **2022**, 13, 100186.

EFICIENCIA ELECTROCATALÍTICA DE NÍQUEL SOBRE MAGNETITA: ÁTOMOS INDIVIDUALES COMO CENTROS ACTIVOS

Laviani Magalí¹, Heredia Romina¹, Benítez Guillermo¹, Cometto Fernando² y Grumelli Doris¹

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. mlaviani@inifta.unlp.edu.ar
2. Instituto de Investigaciones en Fisicoquímicas de Córdoba, Universidad Nacional de Córdoba (UNC), Ciudad Universitaria, Córdoba, Argentina.

Introducción

Las reacciones electroquímicas basadas en moléculas de la atmósfera, como la reacción de reducción de oxígeno (ORR, del inglés: *Oxygen Reduction Reaction*), representan alternativas prometedoras frente a la creciente demanda energética y el deterioro ambiental [1]. No obstante, requieren catalizadores costosos para acelerar el proceso. Los catalizadores de átomos individuales (SACs, del inglés: *Single Atom Catalysts*) surgieron por ser más eficientes y económicos, al inmovilizar átomos metálicos individuales sobre soportes de baja o nula actividad catalítica, como los óxidos metálicos. Sin embargo, reducir el tamaño del catalizador puede afectar su estabilidad termodinámica, favoreciendo la formación de clústeres menos activos. Para mitigar este problema, se han empleado sustratos que estabilizan los SACs, como las superficies monocristalinas de magnetita (Fe_3O_4), que, preparadas en condiciones de ultra alto vacío (UHV, del inglés: *Ultra-High Vacuum*), mantienen una reconstrucción superficial estable para los SACs [2] aún bajo condiciones electroquímicas [3].

Resultados y conclusiones

El objetivo de este trabajo es estudiar y comparar la respuesta electrocatalítica de diferentes configuraciones de níquel soportadas sobre una superficie monocristalina de magnetita con orientación preferencial en la dirección 001 para la ORR en medio alcalino saturado con oxígeno. En particular, se presentarán los resultados correspondientes a sistemas obtenidos mediante el depósito de níquel por evaporación en fase vapor bajo condiciones de UHV. La cantidad de metal depositada se ajustó para obtener una cobertura equivalente a una monocapa, calibrada mediante resultados de microbalanza de cristal de cuarzo (QCM, del inglés: *Quartz Crystal Microbalance*), también en ambiente de UHV.

La presencia, cobertura y naturaleza química del Ni y de la TPP se verificaron mediante 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*).

Referencias

- 1) Seh, Z.W., *Science*, **2017**, 355, eaad4998.
- 2) Bliem, R., *Science*, **2014**, 346 (6214), 1215-1218.
- 3) Grumelli, D., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, 59, 21904.

ENSAMBLADOS CAPA POR CAPA DE CARBONES DE ZIF-8 DOPADO CON HIERRO COMO NANOZIMAS Y POLÍMEROS CONDUCTORES PARA SENSADO DE AGUA OXIGENADA

Mártire Ana Paula¹, Rafti Matías¹, y Marmisollé Waldemar¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
anapmartire@inifta.unlp.edu.ar

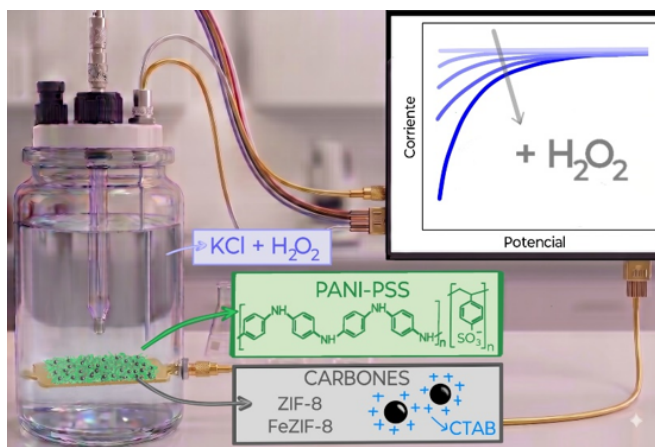
Introducción. Sensar agua oxigenada es crucial en diversos campos de la ciencia. Entre sus aplicaciones se destacan: controlar productos en la industria alimentaria, monitorear el estrés oxidativo en biomedicina, y cuantificar indirectamente analitos en biocatálisis enzimática.¹ Existen enzimas específicas capaces de catalizar la reducción del peróxido de hidrógeno, pero su actividad catalítica es muy sensible al pH y a la temperatura. Por ello, el desarrollo de nanozimas (compuestos inorgánicos capaces de emular la actividad enzimática), con menor costo asociado y mayor robustez a expensas de menor especificidad y actividad catalítica, resulta de gran interés tecnológico. En este contexto, las redes metal-orgánicas y los carbones derivados de su pirólisis, que contienen átomos metálicos de Fe dispersos en la estructura, son materiales muy prometedores para emular la actividad de la enzima catalasa en la reducción del agua oxigenada.²

Resultados. En este trabajo se prepararon carbones de la pirólisis del ZIF-8, una red metal-orgánica formada por Zn^{+2} combinado con 2-metilimidazol. Para incluir átomos de hierro y conferir electroactividad, se preparó Fe-ZIF-8 reemplazando parcialmente el Zn^{+2} por Fe^{+2} , los carbones se obtuvieron por pirólisis en atmósfera inerte. Se estudió la modificación en ensamblado capa por capa (LbL) de electrodos de oro para sensado de agua oxigenada. El bloque de construcción negativo fue la polianilina dopada de un polielectrolito negativo, el poliestirensulfonato de sodio (PANI-PSS). Como bloque de construcción positivo se trabajó con los carbones dispersos en agua con bromuro de hexadeciltrimetilamonio (CTAB) que es un surfactante catiónico. Se evaluó la respuesta electroquímica mediante voltamperometría cíclica del electrodo modificado frente a distintas concentraciones de agua oxigenada (Figura). Se comparó la respuesta entre el ensamblado preparado con los carbones con y sin hierro.

Conclusiones. Ambos ensamblados fueron responsivos a las diferentes concentraciones de agua oxigenada. Sin embargo, en el sistema que contenía hierro se observó una disminución del potencial de onset, lo que indica un efecto catalítico por la presencia de hierro.

Referencias

- 1) Ji, J., et al. *Applied Surface Science*, 2021, 554
- 2) Niu, X., et al. *Biosensors and Bioelectronics*, 2019, 142.



NANOCANALES Y MESOCANALES DE ESTADO SÓLIDO FUNCIONALIZADOS CON POLI(4-VINILPIRIDINA) PARA GENERACIÓN DE ENERGÍA OSMÓTICA

Matelo Ignacio Tomás^{1,2}, Huamani Ángel Luciano^{1,2}, Laucirica Gregorio³, Marmisollé Waldemar¹ y Azzaroni Omar¹

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. ignaciomatelo@inifta.unlp.edu.ar
2. 3IA-UNSAM-CONICET, Instituto de Investigación e Ingeniería Ambiental, Escuela de Hábitat y Sostenibilidad, San Martín, Argentina.
3. GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung, 64291 Darmstadt, Germany.

Introducción

La generación de energía osmótica mediante electrodiálisis inversa en dispositivos nanofluídicos (nRED) es una tecnología prometedora para la obtención de energía sostenible a partir de gradientes de salinidad. En este contexto, los nanocanales de estado sólido representan una plataforma clave. Sin embargo, este tipo de sistemas presenta una limitación intrínseca, dada por el compromiso entre selectividad y conductancia. Para optimizar su potencia, se necesita minimizar la resistencia al transporte iónico sin perder la selectividad propia del canal. La integración de una matriz polimérica altamente cargada resulta ser una estrategia muy útil para superar esta restricción, desacoplando la selectividad a través de un régimen de transporte dominado por una densidad de carga volumétrica.

Resultados

Se fabricaron canales en forma de bala de PET mediante la técnica de *ion-track etching* en dos escalas: nanocanales y mesocanales. Ambos sistemas fueron funcionalizados con un hidrogel policationico de poli(4-vinilpiridina) (PVP) entrecruzado con 1,6-dibromohexano (DBH). El film polimérico sobre el canal presenta grupos piridinio permanentes, que establecen un entorno electrostático volumétrico fuertemente positivo e independiente de las condiciones de pH. Esta modificación hace posible aumentar el tamaño del canal, pasando de la nanoescala a la mesoescala, manteniendo una alta selectividad iónica, incluso en condiciones donde las dimensiones del poro superan ampliamente el grosor de la doble capa eléctrica (EDL). Este fenómeno, atribuido a la densidad de carga espacial del hidrogel, logra un aumento sustancial del flujo iónico sin comprometer la capacidad de selectividad del dispositivo. De esta forma, se supera el compromiso clásico entre selectividad y conductancia para alcanzar una potencia de 1129 pW, un valor inédito en sistemas *single-pore*.

Conclusiones

Este trabajo demuestra que el compromiso entre selectividad y conductancia en la conversión de energía osmótica no es una barrera insuperable, sino una restricción geométrica inherente al mecanismo selectivo basado en carga superficial. Al incorporar una matriz tridimensional de hidrogel policationico, el transporte pasa a estar gobernado por carga espacial volumétrica, desacoplando la selectividad iónica de las dimensiones físicas del poro.

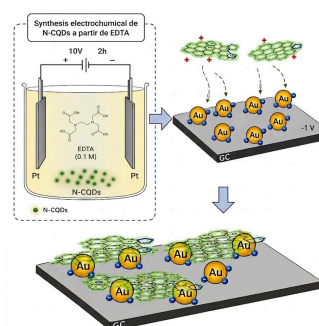
ELECTROSÍNTESIS DE UN SOLO PASO DE PUNTOS CUÁNTICOS DE CARBONO PARA PREVENIR LA OXIDACIÓN Y PRESERVAR LA ACTIVIDAD CATALÍTICA DE NANOPARTÍCULAS DE ORO

Montejo Luis Alberto¹, Huergo María Ana¹ y Ibañez Francisco Javier¹

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
lamontejo@inifta.unlp.edu.ar

Introducción

Los puntos cuánticos de carbono dopados con nitrógeno (N-CQDs) han emergido como nanomateriales versátiles debido a su elevada estabilidad química, abundancia de grupos funcionales superficiales y propiedades electrónicas ajustables. Estas características los convierten en candidatos prometedores tanto para su uso como recubrimientos protectores frente a procesos de corrosión como para su integración en sistemas catalíticos. En este trabajo se aborda el papel de los N-CQDs como material multifuncional, destacando su síntesis electroquímica, su deposición controlada sobre superficies nanoestructuradas y su aplicación en la protección anticorrosiva y actividad catalítica.



Resultados

Los N-CQDs fueron sintetizados electroquímicamente a partir de EDTA (0,1 M), en una celda de dos electrodos de Pt a 10 V durante 2 horas. Técnicas de FTIR y XPS confirmaron la presencia de grupos funcionales oxigenados y nitrogenados en su superficie, los cuales proporcionan una elevada densidad de sitios activos capaces de interactuar con sustratos metálicos. El depósito electroforético de N-CQDs sobre superficies nanoestructuradas produjo recubrimientos preferentemente localizados en nanopartículas de oro (AuNPs) y bordes del sustrato, aumentando la cantidad de material depositado, lo cual es clave para su función protectora. En medios agresivos con bromuro y nitrato, los N-CQDs reducen la oxidación del metal subyacente al actuar como barrera frente a especies corrosivas. Además, la respuesta al par ferricianuro/ferrocianuro mostró corrientes superiores, indicando que el recubrimiento no pasiva la superficie y mantiene o favorece la transferencia electrónica, sugiriendo su potencial como material protector y electroactivo.

Conclusiones

Los N-CQDs sintetizados electroquímicamente a partir de EDTA actúan como recubrimientos protectores de AuNPs, evitando la oxidación de Au (0) a AuBr_4^- y su posterior disolución. Asimismo, la cupla redox ferri/ferrocianuro demuestra que no bloquea la transferencia electrónica, manteniendo o incluso mejorando la respuesta electroquímica. En conjunto, los N-CQDs protegen las NPs sin perder funcionalidad, siendo una estrategia prometedora para estabilizar AuNPs pensadas para aplicaciones electroquímicas y optoelectrónicas.

DETECCIÓN MULTIPARAMÉTRICA CON BIOSENSORES BASADOS EN TRANSISTORES ELECTROQUÍMICOS ORGÁNICOS

Montero Jimenez Marjorie¹, Neyra ReckyJael R.¹, Azzaroni Omar¹, Scotto Juliana¹ y Marmisolle Waldemar¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
marjoriemi@inifta.unlp.edu.ar

Introducción

Los biosensores basados en transistores electroquímicos orgánicos (OECTs) son dispositivos sensibles y versátiles, que han demostrado tener un gran potencial para el monitoreo de biomarcadores. Durante el fenómeno de biosensado se produce una interacción entre la biomolécula y el analito, que genera cambios en la interfase superficie-solución. Idealmente, estos cambios se deben transducir en una señal medible, pero esto implica ciertas dificultades, porque lo que funciona para un sistema, puede ser ineficiente para otro¹.

En los OECTs, usualmente se mide la curva de transferencia que muestra la corriente drain-source (I_{DS}) en función del potencial de gate (V_G), y, a partir de esta figura se pueden obtener varios parámetros como el potencial de máxima transconductancia, la transconductancia máxima, el potencial de *threshold* y la corriente máxima. A pesar de toda la información que se puede obtener, esta medición generalmente solo se usa para evaluar el sistema, antes o después de la modificación en la interfase. Y cuando el objetivo es la evaluación durante el transcurso del fenómeno físicoquímico, se aplica un V_G constante y se mide la I_{DS} en función del tiempo, perdiendo toda la información que se obtiene de la curva de transferencia, que puede ayudar a entender y explicar el comportamiento del sistema.

En este trabajo se presenta un sistema de medición continua, en el cual se monitorearon curvas de transferencia sucesivas, alternando el sentido del barrido del V_G , de forma análoga a una voltamperometría cíclica. De esta forma se obtuvo un conjunto de datos que se pudo analizar y posteriormente determinar todos los parámetros previamente mencionados.

Resultados y conclusiones

Esta metodología de monitoreo continuo se aplicó para evaluar la adsorción de polielectrolitos, el ensamblado de enzimas y su actividad enzimática en OECTs. El análisis de las curvas de transferencia permitió identificar, para cada sistema, unos o más parámetros que presentaban la mayor sensibilidad, facilitando la selección de la variable más adecuada en cada sistema.

Referencias

- 1) Montero-Jimenez M., Neyra Recky J. R., Azzaroni O., Scotto J. and Marmisollé W. A., *Chemosensors*, **2026**, 14(1), 22.

NITRURO DE CARBONO POLIMÉRICO MODIFICADO CON HIERRO PARA LA ELIMINACIÓN DE CONTAMINANTES EMERGENTES EN EL AGUA

Montilla S. Ada I.¹, Caregnato Paula¹ y Gonzalez Mónica C.¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. adamontilla@inifta.unlp.edu.ar

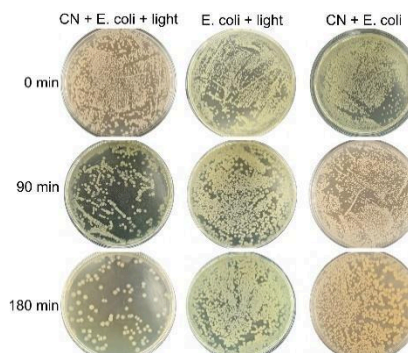
La problemática ambiental asociada a la presencia de contaminantes orgánicos persistentes de especial preocupación, como los residuos farmacéuticos, en cuerpos de agua ha intensificado la búsqueda de alternativas fotocatalíticas eficientes. En este escenario, el nitruro de carbono (CN) surge como un candidato prometedor debido a su sostenibilidad y propiedades ópticas[1]. No obstante, dado que su rendimiento intrínseco se ve restringido por limitaciones cinéticas y electrónicas, las estrategias actuales se orientan fuertemente hacia la optimización de su arquitectura morfológica, así como al dopado o incorporación de especies metálicas como el hierro para maximizar su actividad.

Se sintetizaron nanopartículas de CN y CN modificado con hierro (CNFe) utilizando urea y sales de hierro como precursores, mediante tratamiento térmico a 550 °C. La caracterización de los materiales mediante diferentes técnicas indica la obtención de nanopartículas magnéticas de CNFe de aproximadamente 10 nm de diámetro, con carga superficial negativa en suspensión acuosa formando cadenas y organizadas en capas, donde los óxidos de hierro probablemente se localicen entre capas.

Se evaluó la actividad fotocatalítica de los fotocatalizadores sintetizados bajo irradiación UV-A y radiación solar simulada (300-800 nm) para la degradación de carbamazepina y diclofenaco, así como para la decoloración de un colorante modelo, el naranja de metilo. También se analizó la liberación de hierro, carbono orgánico y nitrógeno al medio de reacción.

Además de las caracterizaciones de estos materiales se evaluaron sus propiedades desinfectantes por inactivación fotodinámica utilizando radiación UV-A. Las especies reactivas generadas tras la irradiación, responsables de la degradación de contaminantes orgánicos, también podrían desinfectar *E. coli* durante el proceso fotocatalítico.

El CN y el CNFe mostraron potencial antimicrobiano inhibiendo eficazmente el crecimiento de *Escherichia coli*. Estos hallazgos resaltan las capacidades duales fotocatalíticas y antimicrobianas de los materiales a base de nitruro de carbono, cuyo rendimiento depende en gran medida de la fuente de irradiación y la química de la superficie.



Referencias

- 1) L. S. Gómez Velázquez, M. L. Dell'Arciprete, L. Madriz, and M. C. Gonzalez, "Carbon nitride from urea: Mechanistic study on photocatalytic hydrogen peroxide production for methyl orange removal," *Catal. Commun.*, vol. 175, p. 106617, Feb. 2023, doi: 10.1016/J.CATCOM.2023.106617.

DISEÑO DE NANOMATERIALES MAGNÉTICOS OPTIMIZADOS PARA CRIOPRESERVACIÓN DE MUESTRAS BIOLÓGICAS

Mutuberría Candela¹, Lavorato Gabriel² y Vericat Carolina³

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. mutuberriacandela@inifta.unlp.edu.ar

Introducción y Objetivos

La criopreservación es una técnica que permite almacenar materiales biológicos a muy bajas temperaturas, con aplicaciones clave en trasplantes y reproducción asistida. La vitrificación evita la cristalización del agua, pero requiere altas concentraciones de agentes crioprotectores (CPAs). Para evitar daños por gradientes térmicos durante la recuperación del material vitrificado, se necesita un calentamiento muy rápido y homogéneo. El nanocalentamiento inducido por nanopartículas (NPs) mediante hipertermia magnética o fototerapia emerge como alternativa a tal fin.¹ Sin embargo, la eficiencia de calentamiento en condiciones criogénicas no está optimizada, la estabilidad coloidal en medios de CPAs es limitada y la toxicidad del sistema debe minimizarse. Este trabajo propone el diseño de NPs con morfología, composición y recubrimiento optimizados para mejorar la eficiencia de nanocalentamiento, su estabilidad coloidal y su biocompatibilidad para tecnologías de criopreservación.

Plan de trabajo

Se propone la síntesis de NPs de Fe_3O_4 , $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ y ferritas de Zn/Mn en fase orgánica, con tamaño, morfología y composición controladas para maximizar la disipación de energía bajo campos de radiofrecuencia (RF) o iluminación en el rango infrarrojo cercano (NIR)². Las NPs se transferirán a fase acuosa empleando recubrimientos que aseguren estabilidad coloidal en CPAs de alta viscosidad y fuerza iónica³, tales como PEG funcionalizado, sílice o polímeros anfifílicos. Se caracterizará estructural, química y magnéticamente el sistema mediante microscopía electrónica de transmisión (TEM), dispersión dinámica de luz (DLS), difracción de rayos X (DRX), dispersión de rayos X a bajo ángulo (SAXS) y magnetometría DC/AC, entre otras técnicas. Posteriormente, se determinará la eficiencia de calentamiento magnético u óptico en función del medio y la temperatura. Las mejores formulaciones se vitrificarán por inmersión en N_2 líquido (-196°C) y se estudiará el nanocalentamiento verificando estabilidad coloidal en todo el proceso. Finalmente, se evaluará toxicidad en líneas celulares, realizándose vitrificación y nanocalentamiento de ovocitos y embriones bovinos, buscando un compromiso óptimo entre eficiencia de calentamiento, estabilidad coloidal y biocompatibilidad.

En esta ocasión, se presentarán avances en la síntesis y caracterización de NPs de Fe_3O_4 sintetizadas por descomposición térmica de oleato de Fe(III) bajo distintas condiciones, y caracterizadas mediante TEM, DRX y DLS.

Referencias

- [1] Bischof, J. C. et al, *Annual Review of Biomedical Engineering* **2018**, 20, 301.
- [2] Lavorato, G. C. et al, *Nanoscale Advances* **2021**, 3, 867.
- [3] Lavorato, G. C. et al, *Applied Surface Science* **2021**, 570, 151171.

PROPIEDADES CRÍTICAS DE PELÍCULAS MULTICAPA FERROMAGNÉTICAS FUERTEMENTE ANISOTRÓPICAS CON INTERACCIONES DIPOLARES

Pagliaro, Paula S.¹, Bab, Marisa A.¹ y Saracco, Gustavo P.¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
pspagliaro@inifta.unlp.edu.ar

Introducción

Las películas magnéticas ultradelgadas son materiales magnéticos con una de sus dimensiones de escala nanométrica. Se utilizan ampliamente en tecnologías de almacenamiento de datos, sensores, dispositivos de espintrónica y biomedicina, pero el estudio de estos sistemas es en sí mismo de gran interés teórico. En estructuras multicapa, emergen nuevos comportamientos debido a fenómenos como la interacción interfacial, el acoplamiento entre capas y las anisotropías magnéticas.

En este trabajo abordaremos el modelado de un sistema magnético multicapa, compuesto por dos capas ferromagnéticas idénticas, fuertemente anisotrópicas, separadas por un espaciador no magnético. Para ello, realizamos simulaciones Monte Carlo del modelo de Ising 2D con interacciones dipolares en cada capa e interacción de intercambio entre capas. Determinamos el diagrama de fases a campo externo nulo, utilizando los métodos de Wang-Landau y Dinámica de Tiempos Cortos. Nos centramos en el efecto de la interacción entre capas, estudiando el comportamiento crítico del sistema para valores de la constante de intercambio entre capas (J_3), en relación con la constante dipolar (g), $0 < \delta_3 = J_3/g \leq 2,0$. Los resultados se analizan en relación con los modelos de Ising dipolar monocapa (MID) y el modelo bicapa de Ising ferromagnético con interacciones de corto alcance.

Resultados

Ambas capas presentaron idénticas configuraciones a bajas T , con patrones de dominios tipo franjas. Al aumentar la T , se observó una única transición, en ambas capas a la misma T , hacia una fase tetragonal líquida (TL). Las técnicas utilizadas arrojaron las mismas temperaturas críticas (T_c), y fue posible determinar que la transición es continua. Las fases observadas, así como el carácter de las transiciones resultan similares a los del MID. Además, T_c aumenta de forma monótona con δ_3 , alcanzando valores de hasta el doble de la temperatura crítica del MID.

Por otra parte, la temperatura reducida, relativa al sistema monocapa, exhibe un comportamiento de ley de potencia para bajos acoplamientos ($\delta_3 < 0,2$), con un exponente $1/\phi$, cuyo valor ϕ es cercano al exponente crítico γ del MID. Estos resultados evidencian un comportamiento de escala similar al observado en el modelo bicapa de Ising ferromagnético, en la transición orden-desorden. Para altos acoplamientos, los exponentes críticos estimados son cercanos a los del MID.

Conclusiones

Se determinó que las transiciones franjas-TL son continuas. Además, T_c crece monótonamente con δ_3 . La temperatura reducida exhibe una ley de escala para bajos acoplamientos, generalizando las predicciones de escala reportadas a sistemas con interacción de largo alcance.

Para altos acoplamientos los exponentes críticos estimados parecen pertenecer a la misma clase de universalidad que el modelo de Ising dipolar.

DIFUSIÓN IÓNICA EN FERRITAS: DE LAS TRANSFORMACIONES QUÍMICAS A LA OPTIMIZACIÓN DE LAS PROPIEDADES FISICOQUÍMICAS DE NANOPARTÍCULAS

Paino Franco Daniel¹, Lavorato Gabriel¹ y Fonticelli Mariano¹

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. fpaino@inifta.unlp.edu.ar

Introducción

Las nanopartículas (NPs) de óxidos de hierro se utilizan en una amplia variedad de aplicaciones debido a sus propiedades magnéticas, electroquímicas y su generalmente alta biocompatibilidad. En particular, las partículas de ferritas (MFe_2O_4 , $M=Fe, Co, Zn$, etc.), permiten un control preciso de sus propiedades en función del grado de oxidación[1] y de la naturaleza y ocupación de los cationes metálicos en la red cristalina[2]. Esta posibilidad permite la preparación y diseño de nuevos materiales con propiedades optimizadas para, por ejemplo, electrocatálisis o dispositivos magnéticos.

Objetivos y Plan de Trabajo

Este trabajo tiene como objetivo principal la comprensión y el control de los procesos de difusión iónica que permitan el diseño de nuevos materiales basados en NPs de ferritas. Para esto, se propone explorar y estudiar a nivel atómico los factores que gobiernan las transformaciones redox de estos materiales, como la oxidación de NPs de magnetita (Fe_3O_4) a maghemita ($\gamma-Fe_2O_3$) y/o hematita ($\alpha-Fe_2O_3$), o la reducción de las mismas a wüstita (FeO) y hierro metálico ($\alpha-Fe$). Se planea seguir estas reacciones para NPs monodispersas, preparadas mediante métodos de descomposición térmica en fase orgánica, mediante la combinación de técnicas *ex situ*, como espectroscopía UV-Vis, y con ensayos *in situ*, de difracción de rayos X (DRX) y microscopía electrónica de transmisión (TEM).

Por otro lado, se proyecta la preparación de NPs epitaxiales con estructura *core/shell* (carozo/coraza) de Fe_3O_4/MFe_2O_4 para explorar el alcance del control de la interdifusión en la interfase para la optimización de sus propiedades fisicoquímicas. En este sentido, se presentarán avances en el análisis de la estequiometría local de NPs *core/shell* $Fe_3O_4/CoFe_2O_4$ y $Fe_3O_4/ZnFe_2O_4$ mediante imágenes espectrales de rayos X por energía dispersiva obtenidas por TEM en modo barrido (STEM-EDS). Dado que alcanzar resolución nanométrica implica analizar señales débiles e interfaces curvas que complican el procesamiento de los datos, se mostrarán resultados asociados al uso de métodos de reducción dimensional basados en análisis multivariado y *machine learning* que permiten filtrar el ruido, aislar contribuciones de diferentes fases e identificar elementos minoritarios[3].

Referencias

- 1) Lavorato, G., *Nanotechnology*, **2023**, 34, 192001
- 2) Orozco-Henao, J. M., *Nano Letters*, **2025**, 25, 12645-12652
- 3) Tertruie, A., *Mach. Learn.: Sci. Technol*, **2024**, 5, 045050

ESTUDIOS OPERANDO EN LA INTERFAZ DE LA SUPERFICIE DE NANOMATERIALES MEDIANTE EL EMPLEO DE RADIACIÓN DE SINCROTRÓN

Paz Guadalupe¹, Giovanetti Lisandro¹, Bava Yanina¹ y Requejo Felix¹

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. paz.guada99@gmail.com

Resumen

Se propone el estudio experimental de la naturaleza de la interfaz sólido/gas y sólido/líquido en materiales nanoestructurados, en particular en aglomerados atómicos de pocos átomos y en los nanocristales que conforman los granos de materiales activos en celdas de ion litio. Ambos sistemas son de especial interés en los campos de la catálisis y del desarrollo de tecnologías energéticas de almacenamiento, respectivamente.

Para ello, se emplearán como herramientas distintivas de caracterización aquellas técnicas basadas en el uso de radiación de sincrotrón, con énfasis en las capacidades que ofrecen las fuentes de cuarta generación (alto brillo, elevada resolución espacial y temporal, coherencia de la radiación, entre otras). Se diseñarán arreglos experimentales orientados a estudiar los aspectos estructurales y químicos de los sistemas en condiciones de operación ("modo operando"), con el fin de obtener información directa que permita comprender los mecanismos que gobiernan las interacciones fisicoquímicas en las superficies de los materiales. Este conocimiento servirá como base racional para el diseño y desarrollo de materiales más eficientes en cada caso.

Referencias

1. Buceta, D.; Huseyinova, S.; Cuerva, M.; Lozano, H.; Giovanetti, L. J.; Ramallo-López, J. M.; López-Caballero, P.; Zanchet, A.; Mitrushchenkov, A. O.; Hauser, A. W.; Barone, G.; Huck-Iriart, C.; Escudero, C.; Hernández-Garrido, J. C.; Calvino, J. J.; López-Haro, M.; De Lara-Castells, M. P.; Requejo, F. G.; López-Quintela, M. A. *Chem. Eur. J.*, **2023**, 29, e202301517.
2. Jori, K.; Mizrahi, M.; Giovanetti, L. J.; Ramallo-López, J. M.; Buceta, D.; Arias, I. R.; Trillo, J. M. B.; Quintela, M. A. L.; Requejo, F. G. *Catal. Today*, **2025**, 449, 115184.
3. Liu, Y.; Halder, A.; Seifert, S.; Marcella, N.; Vajda, S.; Frenkel, A. I. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2021**, 13, 53363–53374.
4. Holler, M.; Diaz, A.; Guizar-Sicairos, M.; Karvinen, P. et al. *Sci. Rep.*, **2014**, 4, 3857.
5. Dierolf, M.; Menzel, A.; Thibault, P. et al. *Nature*, **2010**, 467, 436–439.

NANOZIMAS FOTOACTIVABLES PARA LA DETECCIÓN DE MANGANESO INTRACELULAR Y EL MODELADO DE ESTRÉS OXIDATIVO EN MODELOS NEURONALES

Rabasa Matías¹, Mártire Daniel Osvaldo¹ y Bosio Gabriela Natalia¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. matirabasa@inifta.unlp.edu.ar

Introducción

El manganeso (Mn) es un oligoelemento esencial. Existen ventanas críticas de vulnerabilidad durante el desarrollo fetal e infantil, etapas en las que la homeostasis del Mn presenta particularidades que aumentan la susceptibilidad a alteraciones motoras y cognitivas en la vida posterior. La detección precisa y temprana de Mn intracelular es un desafío debido a su concentración fisiológica relativamente baja y a la falta de métodos in situ que no requieran destrucción de la muestra, por lo que es necesario desarrollar técnicas sensibles, selectivas y biocompatibles. En este contexto, las nanozimas fotoactivables a base de Mn debido a su biodegradabilidad, biocompatibilidad y su actividad oxidasa fácilmente modulable mediante la activación por luz [1].

Objetivos y plan de trabajo

En este plan de trabajo se plantea sintetizar nanozimas fotoactivables por el método layer-by-layer, con un carozo de SiO₂, la deposición secuenciada de polímeros catiónicos y aniónicos y luego capas de Mn(II)-EDTA y de un fotosensibilizador, ya sea 5,10,15,20-tetrakis(1-metilpiridinio-4-il)porfirina (TMPyP) o verde de indocianina (ICG). Estas nanozimas serán caracterizadas físicoquímicamente por diversos métodos (TEM, DRX, FTIR, UV-Vis, XPS y potencial ζ) y también se evaluará la actividad mediante el sustrato modelo 3,3',5,5'-tetrametilbenzidina (TMB), compuesto incoloro altamente usado en diversos ensayos que al oxidarse forma un compuesto azul con un pico de absorbancia en 652 nm, y la citotoxicidad e internalización celular en ensayos con células HeLa.

Luego se procederá a sintetizar nanozimas que no cuenten con Mn(II) y a evaluar sus actividad con el sustrato TMB en presencia de distintas concentraciones de Mn(II), para crear una curva de calibración de Mn(II) y poder medir el Mn(II) intracelular de células N2A de neuroblastoma murino incubando estas últimas con las nanozimas e irradiándolas en presencia de TMB para después medir la absorbancia a 652 nm.

Resultados

Se realizaron ensayos de internalización celular en células HeLa, pudiéndose ver la fluorescencia correspondiente al fotosensibilizador en el interior de las células, lo que demuestra una correcta internalización. Además, se evaluó la actividad de las nanozimas con TMPyP a distintos pH=6 y pH=7, teniendo buena actividad en ambas condiciones.

Referencias

1. Qiu, L., J. *Nanoscale*, **2025**, 17, 8301–8315.

HIDROGELES COMPUESTOS Y APATITAS BIOACTIVAS COMO BASE PARA BIOMATERIALES

Sánchez Dova, Anaclara^{1,2}, Fernández Juan Manuel² y Oberti Tamara¹

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. sanchezanaclara@inifta.unlp.edu.ar
2. Laboratorio de Investigaciones en Osteopatías y Metabolismo Mineral (LIOMM), Departamento de Biología, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CIC, c. 50 184, La Plata, Argentina.

Introducción

En esta oportunidad se presentarán los avances de mi tesis doctoral, orientada al diseño de materiales para Ingeniería de Tejido Óseo (ITO), los cuales deben ser capaces de proporcionar un microambiente que favorezca la adhesión, proliferación y diferenciación celular, con propiedades estructurales, fisicoquímicas y biológicas adecuadas.

Resultados

En primer lugar, se llevó a cabo la síntesis de hidroxiapatita (HAp), con y sin tratamiento térmico (CTT y STT), a partir de cáscaras de huevo de *Caiman latirostris*, con un protocolo optimizado respecto al presentado anteriormente. Esto se reflejó en cambios en el producto final, por lo que se realizó FTIR, DRX y SEM-EDS. Se confirmó la formación de partículas HAp de tamaño heterogéneo, con ausencia de fases secundarias y una relación Ca/P distinta a la estequiometría ideal. También se realizaron ensayos de viabilidad celular con MC3T3-E1 a 48 h, donde se observó un aumento de la proliferación para [HAp CTT] = (0,02-0,18) mg/mL. Además, se evaluó la capacidad de las cerámicas para promover la diferenciación osteoblástica (cuantificación de FAL y Col), donde HAp CTT presentó los resultados más prometedores. Con el fin de realizar un estudio comparativo, también se comenzó con la síntesis de HAp con una nueva fuente de calcio: cáscaras de huevo de gallina comerciales.

Por otra parte, se exploró la obtención de hidrogeles semi-interpenetrados (semi-IPN), basados en hidroxietil metacrilato (HEMA), etilenglicol dimetacrilato (EGDMA) y escleroglucano (Scl). Estos sistemas mostraron un buen desempeño en cuanto a la proliferación celular en células MC3T3-E1, aunque también indujo un aumento en la producción de NO con células RAW 264.7, lo que sugiere una mayor activación de la respuesta inflamatoria, un aspecto no deseado para nuestras aplicaciones. Actualmente nos encontramos en la búsqueda de estrategias que permitan mitigar este efecto, además de la exploración de otros posibles soportes poliméricos para nuestros hidrogeles compuestos.

Conclusiones

Los estudios realizados hasta el momento confirman la obtención de una HAp que reúne las características fisicoquímicas, de biocompatibilidad y de osteoinducción para ser utilizada en ITO. En cuanto a la membrana semi-IPN, aún nos encontramos en proceso de hallar una formulación que nos permita su aplicación en ITO y la incorporación de HAp.

Referencias

- 1) Sanchez Dova, *Actual. Osteol. Argentina*, **2025**; 21(3), 177-188

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

Scaramutti, Mariel¹, Rosso, Janina A.¹ y Mora, Verónica C.²

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. marielscaramutti@inifta.unlp.edu.ar , janinarosso@gmail.com
2. Centro de Investigación y Desarrollo en Fermentaciones Industriales (CINDEFI), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, UNLP-CONICET, Calle 50 e/ 115 y 116, La Plata, Argentina. vcmorad@gmail.com

Introducción

Durante la refinación y el almacenamiento del petróleo se generan residuos altamente tóxicos conocidos como residuos oleosos (RO). La creciente demanda de combustibles fósiles provoca que su acumulación aumente año tras año. Ante esta problemática, la combinación de procesos avanzados de oxidación con técnicas de biorremediación surge como una estrategia eficaz y complementaria para disminuir la carga contaminante en los sistemas actuales.

En el marco de mi tesis doctoral, en este periodo se evaluó el uso de oxidantes químicos, permanganato de potasio (PM) y persulfato de sodio (PS), para tratar un fondo de tanque (FT) de almacenamiento de crudo, con el objetivo de optimizar la reducción de hidrocarburos totales de petróleo (HTP) y minimizar el impacto para posterior biorremediación.

Resultados

Se ensayó la oxidación de FT con PM en condiciones de agitación orbital y sonicación. Los resultados mostraron que la sonicación de 10 g de FT con 10 mL de fase acuosa alcanzó un 24% de oxidación, mientras que la agitación orbital logró un 19%, con diferencias estadísticamente significativas respecto al control. Se evaluó también la adición de una segunda dosis de PM a los 7 días, llegando al final del tratamiento en 14 días totales, con una degradación de 24%. En todos los casos se observó disminución del crecimiento microbiano (BH-DB, PHA-DB, HA-DB) y de la diversidad de colonias.

Se realizaron tres ensayos con PS, análogos a los realizados con PM en condiciones de agitación, sonicación y con el agregado de una dosis adicional luego de 7 días. Se alcanzó un 27% de oxidación al sonicar, y alrededor de 28% para los otros ensayos. Se registró escaso o nulo crecimiento de bacterias heterótrofas, manteniéndose únicamente colonias degradadoras de PAH y HA.

Además, aunque no estaba en plan original, se exploró la combinación de oxidación química con PS y radiación UV. En estos ensayos, muestras de FT fueron irradiadas en presencia de PS durante cinco horas, obteniéndose una reducción del 23% en la [HTP] respecto del control con agua destilada mantenido en oscuridad. En contraste, una solución de PS en oscuridad mostró una reducción del 7%.

Conclusiones

En conjunto, los resultados evidencian que los oxidantes químicos permiten reducir parcialmente la carga de hidrocarburos, aunque afectan la comunidad microbiana, lo que resalta la importancia de combinar estos procesos con estrategias biológicas para lograr una remediación integral y sostenible.

Para el próximo año se propone combinar oxidación con PM y con PS en las condiciones ensayadas con biorremediación utilizando tierra de un landfarming.

DINÁMICA MULTIESCALA DEL EEG INTRACRANEAL A TRAVÉS DE LOS ESTADOS DE SUEÑO-VIGILIA

Tenti Juan Martín¹, Bab Marisa A.¹ y Arlego Marcelo J. F.²

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. tesista@inifta.unlp.edu.ar
2. Instituto de Física La Plata (IFLP)-Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Departamento de Física, Universidad Nacional de La Plata, La Plata, Argentina.

Introducción

El sueño apoya la consolidación de la memoria mediante complejas dinámicas neuronales. Para estudiar este proceso, caracterizamos la actividad de 38 regiones cerebrales durante el sueño y la vigilia utilizando registros de EEG intracraneal (*Multicenter iEEG Sleep Atlas*). Empleamos un enfoque multiescala que integra análisis espectral, estadística de avalanchas neuronales y análisis de fluctuaciones sin tendencia (DFA).

Resultados

El sueño no REM (etapas N2 y N3) mostró un aumento de potencia en baja frecuencia (delta), avalanchas neuronales a gran escala y dinámicas no estacionarias con fuerte persistencia temporal ($\alpha > 1$ en DFA). En contraste, el sueño REM exhibió correlaciones temporales estacionarias (α entre 0.8 y 1.0) y dinámicas más fragmentadas, compartiendo rasgos con la vigilia. Se observaron variaciones espaciales distintivas en regiones vinculadas a la memoria, como áreas frontales y temporales mediales.

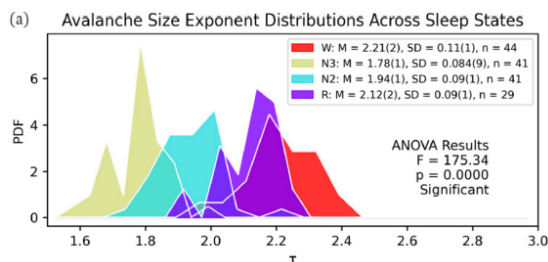


Figura 1. Distribución del exponente de tamaño de avalanchas (τ) a través de los estados de sueño.

Conclusiones

Estas firmas multiescala sugieren que el sueño de ondas lentas propicia la estabilización de nuevas representaciones, mientras que el sueño REM favorece su refinamiento. Además, estos descriptores proporcionan marcadores anatómico-funcionales robustos para optimizar la clasificación automatizada de las etapas del sueño.

Referencias

- 1) Beggs, J. M., et al., D., *J. Neurosci.*, **2003**, 23, 11167–11177.
- 2) Diekelmann, S., et al., J., *Nat. Rev. Neurosci.*, **2010**, 11, 114–126.
- 3) von Ellenrieder, N., et al., *Ann. Neurol.*, **2020**, 87, 289–301.

BIOESPECTROSCOPIA DE LÁGRIMA PARA EL ESTUDIO DE ALTERACIONES EN LA SUPERFICIE OCULAR

Toledo, Florencia E.¹, Faccia, Paula A.¹ y Rasse Suriani, Federico A. O.¹

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. ftoledo@exactas.unlp.edu.ar

El plan propone evaluar la bioespectroscopía del fluido lagrimal, combinada con técnicas de análisis multivariado, como una herramienta analítica no invasiva y de bajo costo para la detección, seguimiento y evaluación de alteraciones en la superficie ocular (SO) en pacientes con diabetes mellitus (DM). Se propone: evaluación clínica de la SO en grupos de casos (diabéticos) y controles, análisis de la asociación entre alteraciones visuales y variables metabólicas, y aplicación de diversos algoritmos de quimiometría para correlacionar las características espectrales de la lágrima con los hallazgos clínicos. Las alteraciones de la SO en la DM (ojo seco, neuropatía corneal, úlceras recurrentes), son frecuentemente subdiagnosticadas y afectan la calidad de vida. Actualmente, no existe un método estandarizado de análisis lagrimal con fines pronósticos en DM, y las técnicas de referencia son costosas y de acceso limitado. En contraste, la bioespectroscopía (absorción UV-Vis y fluorescencia) ofrece una alternativa prometedora, ya que permite obtener "huellas espectrales" de fluidos biológicos de manera rápida y económica ^[1]. En este sentido, el grupo de investigación ha validado previamente un protocolo de recolección y análisis de lágrima, que es la base metodológica de este proyecto ^[2]. Se postula que la bioespectroscopía, acoplada con técnicas multivariadas, puede generar un test capaz de discriminar entre individuos sanos y aquellos con DM que presentan alteraciones oculares. Para contrastar esta hipótesis, se ha diseñado un estudio analítico comparativo con: casos (DBT tipo 2 con glucemia ≥ 126 mg/dL y HbA1c $\geq 6.5\%$) y controles (glucemia < 100 mg/dL, HbA1c $< 5.7\%$, y puntuación FINDRISC ≤ 11). El reclutamiento se ha realizado garantizando participación voluntaria y anónima bajo cumplimiento del marco ético establecido. La metodología propuesta incluye: en la fase clínica, la evaluación optométrica (cuestionarios, biomicroscopía, pruebas de ruptura lagrimal, etc.) con obtención de imágenes para análisis cuantitativo, y la recolección de muestras de lágrima mediante instilación con solución fisiológica, y posterior registro de los espectros de absorción UV-Vis y matrices de excitación-emisión de fluorescencia (EEMs). En la fase de procesamiento: los datos espectrales se analizarían para generar descriptores con potencial discriminatorio de las condiciones clínicas. El análisis estadístico incluirá pruebas para evaluar la capacidad diagnóstica de los modelos. Se determinará el poder discriminante de los descriptores y se seleccionarán los más adecuados para futuros desarrollos.

En síntesis, esta tesis pretende avanzar en la comprensión de las bases fisiopatológicas de las alteraciones de la SO en la DM y desarrollar una herramienta diagnóstica accesible, con potencial para la práctica clínica en atención primaria, mejorando el tamizaje y monitoreo de complicaciones oculares.

Referencias

- 1) Corti, A., Pasquale, M.A., García Einschlag, F.S., *J. Photochem. Photobiol. B*, **2023**, 238, 112598.
- 2) Corral, S., Faccia, P.A., Rasse Suriani, F., García Einschlag, F.S., *Libro de Resúmenes de las V Jornadas de Investigadores e Investigadoras en Formación en Ciencia y Tecnología*, UNQ, **2023**, 10.

GRAFITO AERO-EUTÉCTICO DERIVADO DE FUNDICIÓN GRIS COMO ÁNODO AUTOSOPORTADO PARA BATERÍAS DE ION-LITIO

Tsunoda Sofía^{1,2}; Azpeitia Leticia A.^{1,2}; Gregorutti Ricardo W.³; Reinoso María⁴; Ortiz Mariela G.¹; Roviglione Alicia N.⁵

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
2. Laboratorio de Investigaciones de Metalurgia Física (LIMF), Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de La Plata (UNLP) - CICPBA, Calle 48 y 116, La Plata, Argentina.
3. Laboratorio de Entrenamiento Multidisciplinario para la Investigación Tecnológica (LEMIT) - CICPBA, Buenos Aires, Argentina.
4. Gerencia de Investigación y Aplicaciones, CNEA - CONICET. ECyT, Universidad de San Martín, Buenos Aires, Argentina.
5. Laboratorio de Caracterización-Funcionalización y Diseño de Materiales (LCFD-M), FIUBA, CABA, Argentina.
sofia.tsunoda@ing.unlp.edu.ar

Introducción

El desarrollo de electrodos autosoportados representa una estrategia clave para reducir la masa inerte y simplificar el diseño de las baterías de ion-litio. En este trabajo se explora el uso de Grafito Aero-Eutéctico (GAE) como una arquitectura anódica porosa e integrada. El GAE se obtiene a partir de una aleación comercial de fundición gris mediante un tratamiento ácido que remueve la matriz metálica y preserva la red tridimensional de “hojuelas” de grafito. Esta estructura porosa y liviana funciona directamente como el material activo del electrodo, eliminando la necesidad de colectores metálicos convencionales y aglomerantes poliméricos.

Resultados y Conclusiones

Mediante técnicas de caracterización microestructural, difracción de rayos X y espectroscopía Raman, se verificó que el material conserva la elevada cristalinidad y el ordenamiento típico de la red gráfica tras la extracción de la matriz ferrosa. Las evaluaciones por adsorción de gases confirmaron la presencia de una estructura altamente porosa. La respuesta electroquímica del GAE se evaluó en celdas de laboratorio utilizando técnicas de voltamperometría cíclica, ciclado galvanostático y espectroscopía de impedancia electroquímica. Los resultados mostraron procesos reversibles de intercalación y desintercalación de iones litio, así como la formación de una capa de interfase (SEI) electroquímicamente estable desde los primeros ciclos. En ensayos de carga y descarga prolongados, el electrodo presentó un comportamiento estable a lo largo del ciclado, con una elevada retención de su respuesta electroquímica. Asimismo, el estudio de impedancia confirmó una disminución en las resistencias interfaciales a medida que avanza el ciclado, lo que refleja un favorecimiento en los procesos de transferencia de carga.

De este modo, el Grafito Aero-Eutéctico demuestra ser una alternativa promisoría para la fabricación de ánodos autosoportados en baterías de ion-litio. La conservación de la red porosa tridimensional garantiza el transporte iónico y electrónico adecuado, ofreciendo una vía para el desarrollo de electrodos simplificados.

EFFECTO DE LA COMPOSICIÓN ORO:PLATA EN NANOHÍBRIDOS BIMETÁLICOS CON PUNTOS CUÁNTICOS DE GRAFENO PARA LA DETECCIÓN Y DEGRADACIÓN DE CONTAMINANTES

Ventre Josefina¹, Faccio Ricardo², Bellino Martín G.³ e Ibañez Francisco J.¹

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. jventre@inifta.unlp.edu.ar
2. Área Física & Centro NanoMat, DETEMA, Facultad de Química. Universidad de la República. Uruguay.
3. Instituto de Nanociencia y Nanotecnología CNEA-CONICET, Av. Gral. Paz, 1499, San Martín, Buenos Aires, B1650, Argentina

Introducción

Los contaminantes orgánicos emergentes en cuerpos hídricos representan un desafío ambiental creciente. Los nanohíbridos (NHs) bimetálicos Au/Ag recubiertos con puntos cuánticos de grafeno (GQDs) combinan la resonancia plasmónica local de los metales nobles con las propiedades de transporte de carga de los GQDs, posicionándose como plataformas multifuncionales para fotocatalisis y espectroscopía SERS. Se sintetizaron NHs AuAg@GQDs con relaciones molares Au:Ag de 100:0, 70:30, 50:50, 30:70 y 0:100, purificados por centrifugado y redispersos en agua. Asimismo, se evaluó el efecto de la composición de la aleación en relación a la actividad fotocatalítica y detección por Raman.

Resultados

Los ensayos de detección por SERS de azul de metileno (MB) (0,34 mM) y rodamina 6G (1 mM) revelaron señales intensas para todas las composiciones, siendo las muestras con mayor proporción de Ag las de mayor intensidad espectral, consistente con el mayor factor de mejora plasmónico proporcionado por este metal. Los NHs se mezclaron con 2 ppm de MB y se sometieron a irradiación UV durante 3 h, mostrando un comportamiento fuertemente dependiente de la composición. Las aleaciones alcanzaron porcentajes de remoción entre el 20 y 26%, superando ampliamente a los metales puros (11,2% Ag y 4,4% Au) y evidenciando un efecto favorable de la combinación Au/Ag. Los controles con GQDs sin metal alcanzaron solo 4,7% de fotodegradación. En términos generales, todas las muestras desarrollaron la capacidad de detectar y fotodegradar contaminantes en agua, posicionándose como plataformas bifuncionales viables para su aplicación con interés ambiental.

Conclusiones

Los NHs presentaron propiedades ópticas y funcionales modulables mediante la composición Au:Ag, permitiendo ajustar su respuesta plasmónica y su desempeño en SERS y fotocatalisis. En particular, las composiciones con mayor contenido de Ag presentaron una respuesta SERS más intensa, mientras que las composiciones bimetálicas mostraron una mayor actividad fotocatalítica frente al MB que los sistemas monometálicos. Estos resultados posicionan a los NHs AuAg@GQDs como plataformas multifuncionales con potencial para integrar procesos de degradación y detección de contaminantes.

MODELO DE SLIP-SPRINGS PARA EL ENTRELAZAMIENTO DE CADENAS EN REDES POLIMÉRICAS

Villares Matias¹, Ceolin Marcelo¹ y Müller Marcus²

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
villaresmatias@inifta.unlp.edu.ar
2. Institut für Theoretische Physik, Georg-August-Universität, Göttingen, Alemania.

Introducción

En una red polimérica, la elasticidad y la dinámica están determinadas no sólo por los entrecruzamientos permanentes, sino también por las restricciones topológicas impuestas por el entrelazamiento entre cadenas. Sin embargo, capturar estas restricciones en simulaciones microscópicas resulta computacionalmente costoso, limitando el acceso a las escalas de tiempo y longitud relevantes experimentalmente. En este trabajo presentamos el uso de un modelo de grano grueso (*coarse-grained*) que incorpora *slip-springs* (SLSPs) [1] para representar eficientemente el entrelazamiento entre cadenas y estudiar su coexistencia con los entrecruzamientos químicos permanentes que dan origen a la red.

Resultados

A partir de simulaciones de dinámica molecular, estudiamos la respuesta mecánica macroscópica, a través del módulo elástico (G_{eq}), y la dinámica microscópica, mediante la longitud de localización de los segmentos (ξ), en sistemas de redes poliméricas con distinto grado de entrecruzamiento permanente y entrelazamiento transitorio. Nuestros resultados muestran que los enredos físicos atrapados topológicamente actúan como entrecruzamientos "suaves" adicionales. Demostramos que el efecto combinado de ambas restricciones puede unificarse mediante una densidad de entrecruzamiento efectiva ($\Phi_{eff} = \Phi_{cl} + \alpha \Phi_{slsp}$). Mostramos que un único parámetro de efectividad (α) captura simultáneamente el confinamiento local de los beads y la elasticidad colectiva de la red, estableciendo una conexión directa entre la topología microscópica y las propiedades macroscópicas.

Conclusiones

Los resultados muestran el potencial del modelo de SLSPs para estudiar redes poliméricas en las que coexisten entrecruzamientos químicos permanentes y restricciones físicas topológicas. El modelo permite acceder a escalas temporales y espaciales inaccesibles mediante modelos de mayor resolución, lo que significa un avance fundamental en el desarrollo de modelos jerárquicos [2] que permitan una descripción integral de los materiales poliméricos.

Referencias

- 1) Chappa, V. C., et al. *Phys. Rev. Lett.*, **2012**, 109, 148302.
- 2) Behbahani, A. F., et al. *Macromolecules.*, **2021**, 54(6), 2740.

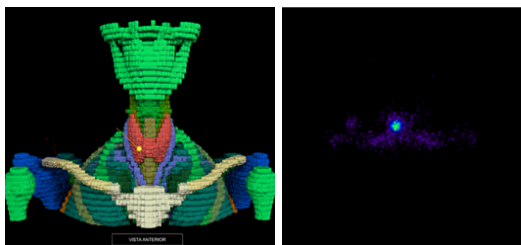
GENERACIÓN DE UN FANTOMA ANTROPOMÓRFICO PERSONALIZADO PARA LA SIMULACIÓN Y CUANTIFICACIÓN DE ACTIVIDAD EN SPECT CON ¹³¹I

Vitaller M. Julia^{1,2}, Chain C. Yamil^{1,2} y Illanes Luis²

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. mjvitaller@inifta.unlp.edu.ar
2. Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata (UNLP), 47 y 115 – (B1900AJL) La Plata – Prov. Buenos Aires – Argentina.

Introducción: La cuantificación de actividad mediante SPECT requiere considerar características anatómicas del paciente y los efectos físicos asociados a la formación de imagen. Los fantasmas antropomórficos personalizados permiten reproducir escenarios clínicos y evaluar metodologías de cuantificación en condiciones controladas. El objetivo del trabajo fue desarrollar un fantoma personalizado de un paciente con carcinoma diferenciado de tiroides (CDT) tratado con ¹³¹I-yoduro de sodio y evaluar la exactitud de la cuantificación de actividad en un remanente tiroideo respecto de un valor de referencia.

Resultados y Conclusiones: Se generó un fantoma voxelizado personalizado mediante 3D Slicer y Python, incorporando la distribución de actividad según un modelo biocinético basado en Huang et al.¹ Se simularon y reconstruyeron imágenes SPECT con SIMIND y CASToR, aplicando correcciones por dispersión y penetración septal. La cuantificación recuperó 17,42 MBq (26,92%) mediante una máscara anatómica y 44,91 MBq (69,42%) con una máscara extendida, respecto de los 64,7 MBq de referencia. La mayor recuperación con la máscara extendida podría asociarse a la contribución de las colas del perfil de actividad, mientras que la subestimación observada podría estar asociada, entre otros factores, a la ausencia de corrección por atenuación. El modelo desarrollado permitió generar un modelo anatómico personalizado, constituyendo una base para la evaluación de metodologías de cuantificación personalizada en medicina nuclear.



Figuras: Vista anterior del fantoma antropomórfico (Izq.) y proyección anterior de las imágenes SPECT (Der.)

Referencias

- 1) Huang., et al., PLoS ONE, **2020**, 15 (5), e0232480.



UNIVERSIDAD
NACIONAL
DE LA PLATA

I N I F T A



XVIII Jornadas de Tesistas del INIFTA 2026

EXPOSICIONES DE ESTUDIANTES DE GRADO EN LA MODALIDAD PÓSTER

EFFECTO DE LAS CARGAS PRESENTES EN REDES METALO-ORGÁNICAS Y EL MOMENTO CUADRUPOLO EN LA ADSORCIÓN SELECTIVA DE BENCENO Y TOLUENO EN UiO-66 PRÍSTINO

Catalano Uriel¹, Pérez-Chávez Néstor Ariel¹ y Albesa Alberto¹

1. Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina. catalanouriel68@inifta.unlp.edu.ar

Introducción: La separación de hidrocarburos monoaromáticos como benceno y tolueno es un proceso clave en la industria petroquímica debido al potencial cancerígeno de dichos compuestos, incluso en concentraciones ínfimas. A su vez las Redes Metalo-Orgánicas prometen ser una gran alternativa para la realización de técnicas de separación no térmicas, gracias a su gran superficie de área y estabilidad química.

En este trabajo, empleamos simulaciones de Monte Carlo en el Colectivo Gran Canónico (GCMC) para estudiar la adsorción de Benceno y Tolueno en UiO-66 prístino.

En particular hemos analizado cómo influyen la incorporación de cargas parciales en la estructura de la red y el momento cuadrupolo de los adsorbatos en las isothermas de adsorción y la selectividad de la mezcla.

Para ello, comparamos de forma sistemática modelos con y sin cargas en la red, y adsorbatos con y sin momento cuadrupolo. Los resultados muestran cómo la competencia interacciones electrostáticas- fuerzas dispersivas define la selectividad de la separación de los adsorbatos.

Resultados y conclusiones: Luego de realizar las simulaciones de Monte Carlo se apreció que la incorporación de las cargas de la red y el cuadrupolo del adsorbato afectan la adsorción en direcciones opuestas: incorporar cargas en la estructura disminuye sistemáticamente el calor isostérico y la cantidad adsorbida de ambos compuestos, mientras que incorporar el cuadrupolo del adsorbato tiende a aumentarlas. El efecto de cargar la red es además marcadamente asimétrico entre compuestos: la isoterma del benceno se desplaza a presiones varias veces mayores al incorporar cargas, mientras que la del tolueno apenas se modifica.

También se observa una inversión de la afinidad relativa según el rango de presión y el modelo de red. En la red neutra, el benceno tiene mayor afinidad que el tolueno a baja presión (mayor pendiente inicial de la isoterma), pero el tolueno lo supera a presiones intermedias/altas y alcanza mayor capacidad de saturación. En la red cargada, en cambio, el tolueno domina en todo el rango de presiones estudiado, sin cruce con el benceno.

La adsorción de benceno y tolueno en UiO-66 está gobernada principalmente por la electrostática de la red más que por el cuadrupolo del adsorbato, con un efecto marcadamente más fuerte sobre el benceno que sobre el tolueno.

INFLUENCIA DE LA CONFIGURACIÓN DE MATRICES POLIMÉRICAS EN LA LIBERACIÓN DE RISEDRONATO. EFECTO INHIBIDOR DE OSTEOCLASTOS

Cruz Naiara¹, Isalberti Gabriel¹, Cadavid Vargas Juan¹, Lastra María Laura², Belluzo María Soledad¹ y Oberti Tamara G.¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
2. Laboratorio de Investigación en Osteopatías y Metabolismo Mineral (LIOMM), Facultad de Ciencias Exactas, UNLP-CIC, La Plata, Argentina.

ncruz2437@gmail.com; agabiisal.10gd@gmail.com

Introducción: El risedronato es un bisfosfonato utilizado para el tratamiento de enfermedades asociadas a la pérdida de masa ósea, aunque su administración oral presenta baja biodisponibilidad y efectos gastrointestinales.¹ En este contexto, se desarrollaron matrices multicapas de PVA (Alcohol polivinílico), quitosano (Q) y un copolímero de acetato de vinilo y fumarato de dioctilo (AcV:FDO) como sistemas de liberación, evaluando el efecto de su configuración sobre la liberación del risedronato. Considerando su potencial aplicación transdérmica, se evaluó además la biocompatibilidad de las matrices.

Resultados: Se obtuvo risedronato desde pastillas comerciales,² se caracterizó por FTIR y se determinó su pureza por 1H-NMR. Se sintetizó un copolímero fumárico empleando energía de microondas. Éste fue aislado, purificado y caracterizado por 1H-NMR, FTIR y GPC. Luego se prepararon matrices poliméricas bicapa mediante evaporación de solvente, ensamblando una primera capa de PVA y sobre ella una capa de copolímero AcV:FDO (75:25), la cual actúa como adhesivo para favorecer la fijación del sistema a la piel y contiene la droga a liberar. Posteriormente, se desarrollaron matrices tricapa adicionando una capa intermedia de quitosano conteniendo 6% del principio activo respecto de la masa de copolímero. La incorporación del risedronato se evaluó mediante FTIR y la liberación *in vitro* mediante celdas de difusión de Franz en buffer acetato (pH 6,5), cuantificándose por UV-Vis. Los ensayos de biocompatibilidad se realizaron con macrófagos RAW 264.7, preincubados con las matrices con y sin risedronato. Se estudió la viabilidad celular (cristal violeta) y la producción de NO (ensayo de griess) a las 48 hs.

La pureza del risedronato obtenido fue del 60%, con probable presencia de lactosa u otro excipiente. El copolímero AcV:FDO presentó un peso molecular de 6×10^5 g/mol. Se encontró que la liberación es más lenta en el sistema bicapa. Finalmente, las matrices de AcV:FDO sin fármaco no modificaron significativamente la viabilidad celular respecto del control, mientras que la matriz con risedronato produjo una disminución, en concordancia con lo reportado para otros bisfosfonatos. Ninguna de las matrices presentó citotoxicidad, dado que la producción de NO fue similar a la del control.

Conclusiones: Se desarrollaron matrices poliméricas bicapa y tricapa capaces de incorporar y liberar risedronato, observándose una liberación más lenta en el sistema tricapa. Los ensayos con macrófagos RAW 264.7 demostraron que las matrices no presentan citotoxicidad. La disminución de la viabilidad celular observada en presencia de risedronato constituye un indicio de su potencial para inhibir la actividad osteoclástica y disminuir la resorción ósea.

Referencias

- 1) Ramachandran, C., Fleisher, D., Adv. Drug Deliv. Rev., 2000, 42, 197-223.
- 2) Pasqualone, M., Andreetta, H. A., Cortizo, M. S., Mater. Sci. Eng. C, 2017, 76, 652-658.

DEGRADACIÓN DE CONTAMINANTES EMERGENTES EN AGUA UTILIZANDO FOTOCATALIZADORES NANOESTRUCTURADOS MAGNÉTICOS

Mamani Lopez Rocio Anabel¹, Toso Tiziana Anabela¹, Villabrille Paula Isabel²,
Caregnato Paula¹ y Rosso Janina Alejandra¹

1. Instituto de Investigaciones Físicoquímicas Teóricas y Aplicadas (INIFTA), Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas (UNLP)-CONICET, Diag. 113 y 64, La Plata, Argentina.
romamanilopez@gmail.com; tizz.toso@gmail.com
2. Centro de Investigación y Desarrollo en Ciencias Aplicadas (CINDECA), Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, CCT La Plata-CONICET, La Plata, 1900, Argentina.

Introducción

El ZnO y TiO₂ son semiconductores de bajo costo y con buena actividad fotocatalítica. Las nanocintas de TiO₂ pueden utilizarse como material para soportar nanopartículas de ZnO para construir heteroestructuras. Adicionalmente, el ensamblado con nanopartículas de óxidos de hierro magnéticos permite una fácil recuperación del material del medio de reacción. Como contaminantes emergentes para evaluar la eficiencia de los materiales se eligieron la carbamazepina (CBZ), el diclofenac (DIC) y el ibuprofeno (IBU), por ser fármacos persistentes y no biodegradables, relevantes a nivel local.

Resultados

Las nanocintas de TiO₂ se obtuvieron en medio alcalino a partir de P25, en mufla a 180°C, lavado con HCl y por último mufla a 400 °C (**NB**). Luego, una sub-muestra se puso en contacto con una solución etanólica de acetato de zinc (10⁻² M), en un ciclo de 24h en un rotador de tubos y se calcinó a 500°C (material: **Z1-NB-500**). Por otro lado, a otra sub-muestra se le confirieron propiedades magnéticas mediante la formación in situ de óxidos de hierro a 80 °C (material: **NBM**). Posteriormente, se pusieron en contacto los **NBM** con una solución etanólica de acetato de zinc (10⁻² M), en un ciclo de 24 h en un rotador de tubos. Los sólidos secos obtenidos por calcinación a 300°C y 500°C, denominándose **Z1-NBM-300** y **Z-NBM-500**.

Los 5 materiales se caracterizaron por microscopía electrónica de barrido (SEM con EDS), microscopía electrónica de transmisión (TEM), difracción de rayos X (DRX), espectroscopía Raman, magnetometría de muestra vibrante (VSM), y espectrometría de reflectancia difusa (DRS).

Los ensayos de fotocatálisis heterogénea se llevaron a cabo en un reactor fotoquímico Rayonet RPR-100 con ocho lámparas UV-A, usando una solución acuosa de contaminante en agua ultrapura con una carga de 0,5 g/L de catalizador. La evolución en la concentración del contaminante con el tiempo de irradiación se determinó utilizando HPLC.

Conclusiones

El **NBM** presentó mayor potencialidad como fotocatalizador. Los porcentajes de degradación de CBZ, DIC e IBU fueron 42%, 84% y 77% respectivamente. Además, este material presentó un comportamiento ferromagnético, con una magnetización de saturación de 4,3 emu/g permitiendo una fácil separación del medio de reacción para su reutilización.



Jornadas de
Tesistas

INIFTA