
Ciencia y Tecnología
Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación
CENTRO DE INVESTIGACIONES EN ÓPTICA, A.C.
AVANCES CIENTÍFICOS Y TECNOLÓGICOS EN MÉXICO
III
TOMO I
BIOLOGÍA Y QUÍMICA

DECLARACIÓN LEGAL

EDITORES
Gloria Verónica Vázquez García
Amalia Martínez García
Cristina E. Solano Sosa
María del Socorro Hernández Montes
Laura Elena Rosales Zárate
María Eugenia Sánchez Morales
Alexandra Monsetrrat García

ISBN GENERAL 978-607-8821-655
Fecha de otorgamiento 02-09-2026

Biología y Química 978-607-8821-662
Fecha de otorgamiento 02-09-2026

El contenido de los artículos es responsabilidad de los autores.

Temacilli EDITORIAL
Lagos de Moreno, Jalisco
http:/temacilli-editorial.com

D. R. Centro de Investigaciones en Óptica, A. C. Loma del Bosque 115, Col. Lomas del Campestre, C. P. 37150, León, Guanajuato México.

Hecho en México





PREFACIO

En esta colección se presentan contribuciones de investigación y desarrollo tecnológico realizadas en diversas áreas de la ciencia, cuyo objetivo principal es contribuir a la difusión del quehacer científico y tecnológico que se realiza en México, así como promover el trabajo interdisciplinario entre miembros de diferentes disciplinas científicas.

El presente trabajo está organizado en siete tomos los cuales corresponden a las siguientes áreas científicas: I) Biología y química, II) Biotecnología y ciencias agropecuarias, III) Ciencias sociales, IV) Físico matemáticas y ciencias de la tierra, V) Humanidades, ciencias de la conducta y divulgación científica, VI) Ingenierías, así como VII) Medicina y ciencias de la salud.

Septiembre de 2026
León, Gto., México

Gloria Verónica Vázquez García
Amalia Martínez García
Cristina E. Solano Sosa
María del Socorro Hernández Montes
Laura Elena Rosales Zárate
María Eugenia Sánchez Morales
Alexandra Monsetrrat García

ÍNDICE

INDICADOR ÁCIDO-BASE NATURAL DE *Cosmos Bipinnatus* COMO ESTRATEGIA DIDÁCTICA PARA FORTALECER EL APRENDIZAJE SIGNIFICATIVO DEL pH EN EDUCACIÓN MEDIA SUPERIOR 5

HYDROCHAR FUNCIONALIZADO DE BAGAZO DE AGAVE PARA LA REMOCIÓN DEL COLORANTE REACTIVE ORANGE 84: SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y OPTIMIZACIÓN MEDIANTE REDES NEURONALES ARTIFICIALES Y ALGORITMOS GENÉTICOS 9

EVALUACIÓN ESPACIO–TEMPORAL DE ELEMENTOS POTENCIALMENTE TÓXICOS EN SEDIMENTOS DE MANGLAR DEL EJIDO AQUILES SERDÁN 22

COAGULANTE NATURAL A BASE DE *Moringa Oleifera* PARA LA DEGRADACIÓN DEL COLORANTE RO84 31

ESTUDIO DEL EFECTO DE NANOPARTÍCULAS BIOGÉNICAS SOBRE LAS PROPIEDADES ANTIOXIDANTES Y MECÁNICAS DE UN BIOCOMPUESTO A BASE DE PP/MUÉRDAGO 38

EL DESARROLLO DE UN MÉTODO RÁPIDO ESPECTROFOTOMÉTRICO POR UV-VIS PARA DETERMINACIÓN SEMICUANTITATIVA DE AMINOACIDOS (GLY, PHE, THR, TYR, NORV, NORL, LYS, GLU Y MIX 8AA) MEDIANTE REACCIÓN CON NINHIDRINA 47

EVIDENCIA DE LA SÍNTESIS EN UNA SOLA ETAPA DE COMPLEJOS METÁLICOS DE BASES DE SCHIFF 55

EL SÍNDROME METABÓLICO INDUCIDO POR DIETAS HIPERGLUCÍDICAS ALTERA LA MICROBIOTA INTESTINAL DE LAS RATAS LONG-EVANS 61

ESTIMACIÓN DE LA DL_{50} PARA CÉLULAS HaCaT EXPUESTAS A RADIACIONES UV TIPO 69

DESARROLLO DE COMPUESTOS DE GdVO4: Dy^{3+} + Tm^{3+} PARA SU APLICACIÓN COMO BIOMARCADORES 79

FLUORESCENCIA DEL EXOESQUELETO Y EXTRACTOS ETANÓLICOS DE ARÁCNIDOS *Arachnopulmonata*: COINCIDENCIAS ESPECTRALES CON NORHARMANO Y 7-HIDROXI-4-METILCUMARINA 84

OBTENCIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDO DE ZINC Y SU CARACTERIZACIÓN MEDIANTE DIFRACCIÓN DE RAYOS X Y EVALUACIÓN DE SU ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA 92

DESARROLLO DE HUMEDALES CONSTRUIDOS PARA EL TRATAMIENTO DE CONTAMINANTES ACUOSOS 97

PREVALENCIA DE ENTEROPARÁSITOS EN HORTALIZAS DE HOJA VERDE COMERCIALIZADAS EN DOS MERCADOS DE CHILPANCINGO DE LOS BRAVO, GUERRERO 112

EVALUACION DE LA CAPACIDAD DE BIOSITESIS DE PHB DE LAS CEPAS DE *Azotobacter Sp*. CRECIDAS EN DIFERENTES FUENTES DE CARBONO 122

NEUROTRANSMISORES DEL HUÉSPED Y LA MICROBIOTA INTESTINAL: INTERACCIÓN FUNCIONAL EN LA REGULACIÓN DEL EJE INTESTINO-CEREBRO 128

EVALUACIÓN DEL CONTENIDO DE ESCUALENO EN EL ACEITE DE GIRASOL (*Helianthus Annuus L.)* 134

APLICACIÓN DE ESPECTROSCOPÍA RAMAN PARA IDENTIFICAR TELOMERASA EN LINFOMA NO HODGKIN: UN CASO DE ESTUDIO 138

INFLUENCIA DEL ANILLO 1,2,3-TRIAZOL EN LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y REACTIVAS DE DERIVADOS FLUOROQUINOLÓNICOS: UN ESTUDIO TEÓRICO-COMPUTACIONAL 149

APORTE AL CONOCIMIENTO DE LA DINÁMICA POBLACIONAL DE LA BIZNAGA DE FLORES ROSADAS (*Mammillaria Rhodantha* Link & Otto) EN UN ÁREA PROTEGIDA EN EL ESTADO DE HIDALGO, MÉXICO 156

ANÁLISIS DESCRIPTIVO DEL PODER REFRACTIVO EN OJOS DE QUELONIOS BAJO CONDICIONES DE CAUTIVERIO 160

EVALUACIÓN DE LA REDUCCIÓN DE NITROANILINAS CON DITIONITO DE SODIO 166

Moringa Oleífera COMO COAGULANTE-FLOCULANTE NATURAL PARA EL TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES PROVENIENTES DE UNA EMPRESA LAVADORA DE MEZCLILLA 171

EVALUACIÓN EXPERIMENTAL DE GEOPOLÍMEROS A BASE CASCARILLA DE ARROZ PARA ADSORCIÓN DE PLOMO Y COBRE EN AGUA 181

EVALUACIÓN DE LA TOXICIDAD DE EFLUENTES TEXTILES TRATADOS MEDIANTE PROCESOS GALVÁNICOS DE OXIDACIÓN AVANZADA A TRAVÉS DE BIOENSAYOS CON *Allium Fistulosum* 187

FACTORES AMBIENTALES QUE DETERMINAN LA DISTRIBUCIÓN POTENCIAL DEL MURCIÉLAGO *Myotis Carteri* (LaVal, 1973) 198

COMPORTAMIENTO DE PEROVSKITAS $Cs_2TiCl_xBr_{6-x}$-EVA APLICADAS EN LA REDUCCIÓN FOTOCATALÍTICA DE CO_2 207

EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA DE PROPÓLEO DE ZACATECAS SOBRE UNA CEPA ATCC DE *Staphylococcus Aureus* 210

DETECCIÓN CUALITATIVA DEL IÓN SULFATO EN PRODUCTOS DE HIGIENE PERSONAL Y ASEO DOMÉSTICO 219

UN MÉTODO RÁPIDO PARA OBTENER CÉLULAS COMPETENTES DE ALTA EFICIENCIA PARA LA TRANSFORMACIÓN DE PLÁSMIDOS 224

SÍNTESIS Y DIVERSIFICACIÓN DE CUMARINAS QUIRALES MEDIANTE AMINOCATÁLISIS ASIMÉTRICA 232

EVAUACIÓN POR ESPECTROSCOPIA INFRARROJA CON TRANSFORMADA DE FOURIER DE SULFÓXIDOS EN EL ACEITE DE PULPA DE MAMEY (*Pouteria Sapota (Jacq.))* 237

ESTUDIO DE LA CAPACIDAD ANTIMICROBIANA DEL EXTRACTO NATURAL DE BUGAMBILIA 241

POLIMERIZACIÓN POR APERTURA DE ANILLO DE ε-CAPROLACTONA CON CATALIZADORES LIBRES DE METALES Y RECUPERABLES BASADOS EN SÍLICES MODIFICADAS UGM 249

OBTENCIÓN DE CARBOXILATOS METÁLICOS DE COBRE(II), ZINC(II) Y CADMIO(II) CON ÁCIDO CÁPRICO 255

EVALUACIÓN IN SILICO DEL POTENCIAL INHIBIDOR DE UNA CHALCONA NATURAL SOBRE LA ENZIMA 17 β-HSD1 IMPLICADA EN CÁNCER DE MAMA 264

IDENTIFICACIÓN DE MICROORGANISMOS EN CERVEZAS ARTESANALES POR MALDITOF BIOTYPER® 274

SÍNTESIS ONE POT DE FLUOROQUINOLONAS A PARTIR DE ANILINAS SUSTITUIDAS 279

ESTUDIO COMPARATIVO ENTRE EL CARBÓN VEGETAL EN FORMA DE POLVO Y PELLETS COMO MATERIAL BIOADSORBENTE DE COLORANTES TEXTILES EN AGUA 285

RESPUESTA A ANTIBIÓTICOS POR BACTERIAS HETERÓTROFAS PROVENIENTES DE TRES POTREROS INUNDADOS EN EL CAMARÓN (MIXTEQUILLA, VERACRUZ) 290

EVALUACIÓN DEL ESTADO DE CONSERVACIÓN DEL MURCIÉLAGO *Myotis Peninsularis* (MILLER, 1898) CON BASE EN LOS CRITERIOS DE DISTRIBUCIÓN GEOGRÁFICA DE LA UICN Y LA NOM-059-SEMARNAT 294

EFECTO DE LAS CONDICIONES AMBIENTALES SOBRE LA CAPTURA DE INSECTOS ASOCIADOS A LA MADERA DE LOS TEMPLOS DE SANTIAGO UNDAMEO Y SAN JERÓNIMO PURENCHÉCUARO, MICHOACÁN 2026 303

XEROGELES DE SÍLICE DOPADOS CON NANOPARTÍCULAS DE ALUMINIO PARA LA ADSORCIÓN DE ANIONES TÓXICOS PRESENTES EN SOLUCIÓN ACUOSA 309

EFECTO DEL MEDIO DE REACCIÓN EN CARBONIZACIÓN HIDROTERMAL DE HYDROCHAR DE MUÉRDAGO PARA LA ADSORCIÓN DEL COLORANTE RO84 326

EFECTO DEL TIEMPO DE MOLIENDA SOBRE EL DOPAJE DE ZnO con Er 334

BIOSILICIFICACIÓN ARTIFICIAL DE ORGANISMOS: CONSERVACIÓN Y REPLICACIÓN DE ESTRUCTURAS BIOLÓGICAS DESDE LO MICRO A LO MACRO 340

MAPEO DE DENSIDAD ELECTRÓNICA DEL 1,4-DIÓXIDO DE 6,9-DIHIDROPIRIDO[2,3-G]QUINOXALINA 346

EVALUACIÓN ANTIFÚNGICA DE COMPLEJOS TERNARIOS DE Zn(II) BASADOS EN FÁRMACOS AZÓLICOS Y EL LIGANDO IMIDA HBPCA EN *Candida Spp.* 352

NANOPARTÍCULAS DE SiO_2:Eu^{3+} FUNCIONALIZADAS CON BENZOCAÍNA: CARACTERIZACIÓN Y ESTUDIO DE VIABILIDAD CELULAR 357

SÍNTESIS MULTIETAPA Y CARACTERIZACIÓN DE DERIVADOS BODIPY FUNCIONALIZADOS CON CADENAS ALQUÍLICAS DE DIFERENTE LONGITUD 364

COMPOSICIÓN MICROBIOLÓGICA DE UN SUSTRATO TIPO COMPOST PARA ESPECIES FORESTALES 370

CALIDAD DEL SUELO EN FUNCIÓN DE LA MATERIA ORGÁNICA 379

NANOPARTÍCULAS ORGÁNICAS FOTOSENSIBILIZADORAS COMO ESTRATEGIA PARA LA DISMINUCIÓN DEL CRECIMIENTO MICROBIANO 384

EFECTO DEL EXTRACTO ETANÓLICO DE *Eryngium Carlinae* EN MARCADORES DE ESTRÉS OXIDANTE EN HÍGADO DE RATA CON ENFERMEDAD HEPÁTICA NO ALCOHÓLICA 389

DISEÑO PEPTIDOMIMÉTICO BASADO EN HIDANTOÍNAS COMO INHIBIDORES SELECTIVOS DE HDAC1 Y HDAC6: UN ENFOQUE DE DOCKING MOLECULAR Y RECONOCIMIENTO SUPRAMOLECULAR 395

PREPARACIÓN DEL ANTIMONIATO DE MAGNESIO PARA SU ESTUDIO COMO SENSOR DE GASES 410

DIAGNÓSTICO POBLACIONAL DEL ENCINO (*Quercus*) EN LA ZONA DE RESERVA JOYA LA BARRETA 424

EVALUACIÓN DE LAS PROPIEDADES NUTRICIONALES Y DE ÁCIDOS GRASOS DEL JUMIL (*Edessa* Spp.) 428

OPTIMIZACIÓN DE LA SÍNTESIS BIOGÉNICA DE NANOPARTÍCULAS DE SULFURO DE COBRE CON EXTRACTO DE *Moringa Oleifera* 432

DISMINUCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE COMPUESTOS FENÓLICOS EN VINAZA DE TEQUILA USADA COMO MEDIO DE CULTIVO PARA *Trichoderma Harzianum* 439

ASOCIACIÓN DE LA VARIANTE RS1800470 DEL GEN TGFB1 CON SÍNDROME METABÓLICO EN ADOLESCENTES DEL OCCIDENTE DE MÉXICO 447

AEROGELES DE TiO_2-SiO_2 DOPADOS CON Mn MEDIANTE MÉTODO SOL-GEL COMBINADO CON UN TRATAMIENTO SOLVOTERMAL 457

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UN MATERIAL HÍBRIDO ORGÁNICO-INORGÁNICO CON POTENCIALES PROPIEDADES ÓPTICAS NO LINEALES 466

ESTUDIO COMPARATIVO DE ELEMENTOS QUÍMICOS EN MUESTRAS DE AGUA DE LA ZONA DE LOS BITZALES, TABASCO, HÁBITAT DEL MANATÍ DEL CARIBE (*Trichechus Manatus*), 2018–2024 474

EVALUACIÓN DE LA RESISTENCIA ANTIMICROBIANA EN PROBIÓTICOS MÉDICOS 481

ANÁLISIS DEL DESARROLLO DE LA BIOPELÍCULA DE *Pestalotiopsis Clavispora* 487

EVALUACIÓN DE LA ANCESTRÍA GENÉTICA EN POBLACIONES MESTIZAS DEL SUR DE MÉXICO A TRAVÉS DEL ANÁLISIS DE 39 MARCADORES AIM-INDELS 496

SÍNTESIS VERDE Y CARACTERIZACIÓN DEL SISTEMA Ag/AgCl PARA LA DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS 502

LA INFECCIÓN CON *Salmonella Typhimurium DETERIORA* LOS SISTEMAS GABAÉRGICO Y SEROTONINÉRGICO EN EL NEMATODO *Caenorhabditis elegans* 510

ESTUDIO DE ADSORCIÓN Y DESORCIÓN DE UN ANTIBIÓTICO NATURAL EN EXCIPIENTES DE SÍLICE MESOPOROSA 516

ANÁLISIS COMPARATIVO DEL GRADO DE INHIBICIÓN DE DIVERSAS BACTERIAS PATÓGENAS 525

PRODUCCIÓN DE JABÓN ECOLÓGICO A PARTIR DE RESIDUOS DOMÉSTICOS: UNA ALTERNATIVA PARA LA GESTIÓN SOSTENIBLE DE ACEITES DE COCINA USADOS Y DESECHOS DE CAFÉ 530

DISTRIBUCIÓN ALÉLICA Y GENOTÍPICA DE LA VARIANTE -24 C>T DEL GEN ABCC2 (rs717620) EN POBLACIÓN MESTIZA MEXICANA 541

INDICADOR ÁCIDO-BASE NATURAL DE *Cosmos Bipinnatus* COMO ESTRATEGIA DIDÁCTICA PARA FORTALECER EL APRENDIZAJE SIGNIFICATIVO DEL pH EN EDUCACIÓN MEDIA SUPERIOR

Eduardo Zaragoza Ramos[1], Joel Hinojosa Dávalos[2], Juan Pablo Romero Gil[1] y Néstor Fernando Medina Lobato[1]

[1] Universidad de Guadalajara, Escuela Preparatoria Regional de San Miguel el Alto. [2] Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de la Ciénega.
qfblalozaragoza@gmail.com

RESUMEN

La enseñanza del concepto de pH en educación media y superior se apoya comúnmente en indicadores ácido-base sintéticos, los cuales pueden implicar riesgos potenciales para la salud y el ambiente, además de limitar la experiencia formativa a prácticas tradicionales. En este contexto, se presenta una propuesta de divulgación científica basada en el diseño y aplicación de un indicador ácido-base de origen natural obtenido a partir de la flor de Cosmos bipinnatus, con el objetivo de fortalecer el aprendizaje significativo en química. El extracto fue obtenido mediante extracción hidroalcohólica con etanol al 96 % utilizando destilación con reflujo simple. Su comportamiento como indicador se evaluó en soluciones con valores de pH de 0 a 13, previamente estandarizadas y verificadas con potenciómetro. Adicionalmente, se realizaron ensayos fitoquímicos de toxicidad mediante pruebas de germinación en Cucumis sativus y Raphanus sativus, valorando índices de germinación y elongación radical residual. Los resultados evidencian que el extracto presenta cuatro transiciones cromáticas claramente diferenciadas: rosado en pH 0-3, incoloro en 4-6, amarillo paja en 7-8 y amarillo olivo en 9-13, lo que permite identificar el carácter ácido o básico de las soluciones. Asimismo, los ensayos biológicos indican baja toxicidad incluso a concentraciones elevadas, lo que respalda su uso en entornos educativos. Se concluye que el uso de indicadores ácido-base de origen vegetal constituye una alternativa segura, sustentable y didácticamente efectiva, que favorece la integración de conocimientos teóricos y prácticos, promoviendo la participación activa del estudiantado y la apropiación del conocimiento científico desde un enfoque contextualizado.

Palabras clave: indicador ácido-base; Cosmos bipinnatus; pH; aprendizaje significativo; enseñanza de la química.

INTRODUCCIÓN

En química, el concepto de pH permite comprender la naturaleza ácida, neutra o básica de sustancias presentes en el laboratorio, la industria, los seres vivos y la vida cotidiana. En los laboratorios escolares, su abordaje suele apoyarse en indicadores ácido-base comerciales, como fenolftaleína, azul de metileno, rojo de metilo o papel tornasol. Aunque estos materiales son útiles, algunos presentan limitaciones didácticas y riesgos asociados a su manejo, lo que abre la posibilidad de proponer alternativas más seguras, contextualizadas y ambientalmente amigables.

La presente propuesta parte de una investigación previa sobre extractos vegetales con capacidad indicadora de pH, particularmente el extracto hidroalcohólico de flores de mirasol o Cosmos bipinnatus recolectadas en San Miguel el Alto, Jalisco. Este recurso permite conectar el aprendizaje de la química con materiales del entorno local, favoreciendo que el estudiantado observe, formule explicaciones y relacione el cambio de color con fenómenos ácido-base.

El propósito del trabajo es presentar el indicador ácido-base natural de Cosmos bipinnatus como una estrategia didáctica para fortalecer el aprendizaje significativo del pH en educación media superior. La propuesta articula investigación experimental, seguridad en laboratorio, sustentabilidad y apropiación del conocimiento científico mediante una práctica accesible y replicable.

TEORÍA

Los indicadores ácido-base son sustancias que manifiestan cambios de color en función de la concentración de iones hidronio u oxhidrilo presentes en una disolución. En términos didácticos, permiten convertir una propiedad abstracta, como el pH, en una evidencia visual inmediata. Sin embargo, varios indicadores sintéticos solo muestran dos tonalidades predominantes, por lo que su lectura puede restringirse a identificar si una muestra es ácida o básica, sin proponer rangos aproximados de pH.

Los pigmentos vegetales, especialmente las antocianinas, pueden responder a cambios de acidez y basicidad mediante modificaciones en su estructura química, generando variaciones cromáticas observables. Esta propiedad ha sido documentada en especies como col morada, betabel, uva, pétalos de rosa y otras plantas con pigmentación intensa. Por ello, su empleo como indicadores naturales representa una alternativa con valor científico y educativo.

Desde el enfoque del aprendizaje significativo, una práctica experimental adquiere mayor potencia cuando el estudiante relaciona los conceptos nuevos con experiencias cercanas y observables. La extracción de pigmentos de una flor local, su aplicación en soluciones patrón y la interpretación de coloraciones permite integrar saberes conceptuales, procedimentales y actitudinales, además de promover conciencia ambiental y pensamiento científico.

PARTE EXPERIMENTAL

El material vegetal consistió en flores de Cosmos bipinnatus recolectadas de manera aleatoria en la región de San Miguel el Alto, Jalisco. Posteriormente, se separaron los pétalos, se determinó su masa y se colocaron en un matraz bola para realizar la extracción hidroalcohólica.

La extracción se llevó a cabo mediante destilación con reflujo simple, utilizando etanol al 96 % como solvente durante un periodo de 1 hora. De acuerdo con la formulación empleada, se utilizaron 56.64 g de pétalos y 193 mL de etanol. Después del proceso, la mezcla se dejó enfriar, se filtró y se envasó en frascos ámbar para su conservación.

Para valorar su comportamiento como indicador, se prepararon soluciones de prueba con valores de pH de 0 a 13, utilizando HCl y NaOH, con verificación mediante potenciómetro. En cada tubo de ensayo se añadieron de tres a cinco gotas del extracto, registrando las coloraciones obtenidas mediante observación directa y fotografías.

Adicionalmente, se realizaron ensayos de fitotoxicidad con semillas de Cucumis sativus y Raphanus sativus expuestas a distintas concentraciones del extracto: 10, 100, 1000, 3000 y 6000 ppm, además de agua como control. Se evaluaron el índice de germinación, la longitud de radícula, la longitud de epicótilo y los índices normalizados de germinación y elongación radical residual.

Recolección del material vegetal	Separación de pétalos	Extracción hidroalcohólica	Filtración y envasado	Valoración en pH 0-13	Ensayos de fitotoxicidad

Figura 1. Secuencia metodológica general para obtener y valorar el extracto de Cosmos bipinnatus como indicador ácido-base. Fuente propia.

RESULTADOS

El extracto de Cosmos bipinnatus presentó variaciones cromáticas diferenciadas al entrar en contacto con soluciones de distinta acidez. En medios fuertemente ácidos se observó tonalidad rosada; en medios ligeramente ácidos a cercanos a la neutralidad, el extracto se mostró incoloro; en el intervalo neutro-ligeramente básico adquirió color amarillo paja, y en condiciones básicas mostró amarillo olivo.

Estos cambios permiten utilizar el extracto como un recurso visual para identificar rangos aproximados de pH, con una lectura más específica que la ofrecida por indicadores escolares de respuesta binaria. En el contexto educativo, la diferencia de color permite que el estudiantado vincule observación experimental, medición de pH e interpretación química.

Rango de pH	Coloración observada	Carácter de la muestra	Uso didáctico
0-3	Rosado	Ácido fuerte	Identificación visual de acidez marcada
4-6	Incoloro	Ácido débil a cercano a neutro	Discusión sobre transición y aproximación de pH
7-8	Amarillo paja	Neutro a ligeramente básico	Relación entre neutralidad y cambio cromático
9-13	Amarillo olivo	Básico	Identificación visual de basicidad

Tabla 1. Coloraciones presentadas por el extracto de Cosmos bipinnatus al contacto con sustancias de distinta acidez. Fuente propia.

En los ensayos biológicos, las semillas de pepino y rábano conservaron porcentajes de germinación compatibles con baja toxicidad del extracto. Aun en concentraciones elevadas, los índices normalizados de germinación se mantuvieron en rangos que no sugieren toxicidad severa, mientras que el índice de elongación radical residual reportó valores de 0.00 en las concentraciones evaluadas. Esto respalda su posible manejo en prácticas escolares bajo condiciones ordinarias de seguridad de laboratorio.

La implementación didáctica permitió que el estudiantado participara en una secuencia experimental completa: obtención del extracto, preparación y comparación de soluciones, observación de cambios de color e interpretación de resultados. Este proceso favorece la comprensión del pH no solo como número, sino como fenómeno observable y explicable desde la química de pigmentos vegetales.

Concentración	IG pepino (%)	IG rábano (%)	IGN pepino	IGN rábano
Agua	93.33	90.00	0.00	-0.07
10 ppm	86.77	86.66	0.00	-0.21
100 ppm	93.33	90.00	-0.21	-0.25
1000 ppm	73.33	90.00	0.00	-0.04
3000 ppm	73.33	83.33	0.00	0.00
6000 ppm	70.00	70.00	-0.07	-0.22

Tabla 2. Respuesta de germinación de Cucumis sativus y Raphanus sativus expuestas al extracto de Cosmos bipinnatus. IG: índice de germinación; IGN: índice de germinación residual normalizado. Fuente propia.

CONCLUSIONES

El extracto hidroalcohólico de Cosmos bipinnatus funciona como indicador ácido-base natural al presentar cuatro coloraciones diferenciadas en el intervalo de pH evaluado. Su obtención mediante materiales vegetales y etanol al 96 % lo convierte en una alternativa más segura y sustentable frente a ciertos indicadores sintéticos empleados en laboratorios educativos. Los ensayos de fitotoxicidad sugieren baja toxicidad, incluso a concentraciones elevadas, lo que fortalece su pertinencia para prácticas escolares. Desde el punto de vista didáctico, la propuesta permite que el alumnado relacione el concepto de pH con una experiencia experimental contextualizada, visual y participativa, favoreciendo el aprendizaje significativo y la apropiación del conocimiento químico.

BIBLIOGRAFÍA

1. Bagur-González, M. G., Estepa-Molina, C., Martín-Peinado, F. y Morales-Ruano, S., “Toxicity assessment using Lactuca sativa L. bioassay of the metal(loid)s As, Cu, Mn, Pb and Zn in soluble-in-water saturated soil extracts from an abandoned mining site”, Journal of Soils and Sediments, Vol. 11, 2011, pp. 281-289.

2. Casas, J. A., García, F. y Pérez, M., “Indicadores naturales ácido-base: una alternativa didáctica para la enseñanza de la química”, Educación Química, 2009.
3. Garzón, G. A., “Las antocianinas como colorantes naturales y compuestos bioactivos: revisión”, Acta Biológica Colombiana, Vol. 13, No. 3, 2008, pp. 27-36.
4. Heredia-Ávalos, S., “Experiencias sorprendentes de química con indicadores naturales de pH”, Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias, Vol. 3, No. 1, 2006, pp. 89-103.
5. Morales, A., Pérez, R. y Vega, C., “Extracción de pigmentos vegetales mediante reflujo simple”, 2005.
6. Val-Castillo, O., “Estudio de sustancias naturales como indicadores de pH: una propuesta didáctica”, Anales de Química, Vol. 116, No. 2, 2020.
7. Zaragoza Ramos, E., Orozco Torres, L. M., Freitas de Souza, R., Castillo Guzmán, E. M., Kuroda López, D. E. y Ramírez Franco, M. A., “Valoración, como indicadores ácido-base, de extractos naturales de flores de Bougainvillea glabra, Cosmos bipinnatus, Psittacanthus calyculatus y cáscara y fruto de Opuntia ficus, de San Miguel el Alto, Jalisco”, Revista Comunicação Universitária, Vol. 1, No. 2, 2021, pp. 1-8.

HYDROCHAR FUNCIONALIZADO DE BAGAZO DE AGAVE PARA LA REMOCIÓN DEL COLORANTE REACTIVE ORANGE 84: SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y OPTIMIZACIÓN MEDIANTE REDES NEURONALES ARTIFICIALES Y ALGORITMOS GENÉTICOS

Raul E. Medina-Ganem[1], Neali Valencia-Espinoza[2], Luisa F. Medina-Ganem[2], Reinier Abreu-Naranjo[3], Fabricio G. Méndez-Landin[4], Alejandro Vega-Rios[5], Alberto Quevedo-Castro[6], Alain R. Picos-Benítez[7], Erick Bandala[8], Oscar M. Rodríguez-Narvaez [1*]

[1] UNITEC Campus León, [2] Dirección de Investigación y Soluciones Tecnológicas, Centro de Innovación Aplicada en Tecnologías Competitivas (CIATEC), [3] Departamento de Matemáticas y Ciencias Físicas, Facultad de Ciencias de la Vida, Campus Puyo, Universidad Estatal Amazónica, [4]Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingenierías Campus Guanajuato, Instituto Politécnico Nacional, Avenida Mineral de Valenciana, [5] Centro de Investigación en Materiales Avanzados, S.C. (CIMAV), [6] Facultad de Ciencias de la Tierra y el Espacio, Universidad Autónoma de Sinaloa, [7]Departamento de Formación Profesional Específica, Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingeniería Campus Zacatecas, Instituto Politécnico Nacional, [8] DASCO Inc., Estados Unidos.
orodriguez@ciatec.mx

RESUMEN

Los materiales funcionalizados a base de carbono han atraído recientemente la atención por la eficiente eliminación de contaminantes complejos, incluyendo colorantes. En este estudio, se utilizó bagazo de agave (BA), un subproducto abundante de la industria tequilera mexicana, como biomasa para producir hydrochar (HC) modificado con H_2SO_4 para la eliminación de Naranja Reactiva 84 (RO84). La síntesis del material se realizó mediante un proceso hidrotermal al cual se añadió una concentración de 120 g L-1 de BA a una solución de H2SO4 (0.25, 0.5, 0.1, 0.125, 0.2, 0.25 y 0.5 M); esta se calentó hasta los 200° C por 24 h. Posterior a la síntesis del material, se realizó una prueba de adsorción en la cual se añadieron diferentes concentraciones del HCBA a una solución del RO84 con una concentración de 100 mg L^{-1}, las cuales se dejaron en agitación durante 24 h. Una vez pasado el tiempo del experimento, las muestras se filtraron mediante un filtro jeringa de 0.45 µm. Además, a los materiales producidos se les realizaron diversas caracterizaciones, resaltando en cada una de ellas lo siguiente: por FTIR-ATR se revelaron señales características de grupos $–SO_3H$, demostrando la funcionalización del material; el análisis BET mostró una amplia gama de áreas superficiales y volúmenes de poro, con radio de poro que indicaba estructuras nano-, micro- y mesoporosas, el cual dependía de la concentración de ácido utilizada durante la síntesis. Finalmente, los análisis TGA y XRD indicaron que una mayor concentración de ácido promovió la despolimerización de los componentes de la biomasa. Para el caso de los ensayos de adsorción, se demostró que el aumento de las concentraciones de H_2SO_4 mejoraba la remoción del colorante, siendo una concentración de 0.2 M con la que se obtiene la mayor remoción (99%). Para la cuestión del modelado matemático se utilizó el modelo ANN-GA (red neuronal artificial-algoritmos genéticos), mediante el cual se obtuvo que los resultados óptimos se lograban combinando altas concentraciones de ácido durante la síntesis de HC con altas dosis de HC durante la adsorción.

INTRODUCCIÓN

La industria tequilera mexicana genera anualmente miles de toneladas de bagazo de agave como subproducto de sus procesos productivos. Este residuo, rico en fibras y compuestos lignocelulósicos, suele acumularse en grandes cantidades, generando problemas ambientales y de manejo para los productores. Por ello, el desarrollo de estrategias que permitan reutilizar esta biomasa se ha vuelto esencial para disminuir su impacto ambiental y promover modelos de aprovechamiento integral. Entre las alternativas de valorización, la carbonización hidrotérmica (HTC) se considera una de las tecnologías más eficientes para el tratamiento de residuos sólidos con alto contenido de humedad. Este proceso presenta ventajas como flexibilidad económica, menor consumo energético respecto a otros tratamientos térmicos, como la pirólisis, y mayores rendimientos de producto. La HTC

transforma la biomasa en un material carbonoso denominado carbón hidrotérmico o hydrochar, caracterizado por su estabilidad química, estructura porosa y posibilidad de modificación superficial para mejorar propiedades fisicoquímicas como la capacidad de adsorción. Entre los métodos de funcionalización, la modificación ácida destaca por incrementar la cantidad de grupos oxigenados y sulfonados sobre la superficie del material, aumentando así su capacidad para remover contaminantes orgánicos mediante adsorción. La optimización de procesos de adsorción constituye un desafío debido a la gran cantidad de variables involucradas. Tradicionalmente se han empleado diseños experimentales y modelos polinomiales; sin embargo, estos presentan limitaciones al describir interacciones complejas y relaciones no lineales. Recientemente, los modelos de inteligencia artificial, han demostrado una elevada capacidad para modelar procesos de tratamiento de agua. No obstante, presentan limitaciones asociadas a mínimos locales y a la necesidad de grandes volúmenes de datos experimentales para su entrenamiento. Por esta razón, diversos estudios han combinado redes neuronales con algoritmos genéticos (GA), los cuales permiten optimizar simultáneamente múltiples variables mediante principios inspirados en la teoría evolutiva de Darwin. El objetivo de este trabajo fue sintetizar y caracterizar carbón hidrotérmico funcionalizado con H_2SO_4 a partir de bagazo de agave, evaluar su desempeño para la adsorción del colorante Reactive Orange 84 y desarrollar un modelo ANN-GA capaz de predecir y optimizar las condiciones operativas para maximizar la remoción del contaminante. La principal novedad de esta investigación radica en la combinación de Hydrochar sulfonado obtenido de bagazo de agave con una metodología de optimización basada en inteligencia artificial, entrenada mediante un amplio conjunto de datos experimentales para modelar y optimizar la remoción de colorantes aniónicos.

TEORIA

Carbonización hidrotermal

La carbonización hidrotermal es un proceso termoquímico que transforma biomasa húmeda en un material sólido rico en carbono mediante su calentamiento en agua, dentro de un reactor cerrado y bajo presión autogenerada. Generalmente se realiza a temperaturas moderadas, cercanas a 180–250 °C, por lo que permite procesar residuos lignocelulósicos sin requerir un secado intensivo previo. Durante el tratamiento ocurren reacciones de hidrólisis, deshidratación, descarboxilación, condensación y aromatización, las cuales modifican la estructura de la biomasa y favorecen la formación de una fase sólida carbonosa.

Hydrochar

El hydrochar es el producto sólido obtenido mediante carbonización hidrotermal. Sus propiedades dependen del tipo de biomasa, la temperatura, el tiempo de reacción y el uso de agentes modificadores, como ácidos. Este material contiene una matriz carbonosa y grupos funcionales superficiales que pueden incluir grupos hidroxilo, carboxilo, carbonilo y sulfónico. Dichos grupos, junto con la porosidad y el área superficial del material, determinan su interacción con contaminantes presentes en agua. Por ello, el hydrochar puede utilizarse como adsorbente de bajo costo y como alternativa para valorizar residuos agroindustriales, como el bagazo de agave.

Adsorción

La adsorción es un fenómeno superficial mediante el cual moléculas o iones presentes en una fase líquida o gaseosa se acumulan sobre la superficie de un sólido. El contaminante retenido se denomina adsorbato y el material que lo captura se denomina adsorbente. En la remoción de colorantes, la adsorción puede involucrar interacciones electrostáticas, puentes de hidrógeno, fuerzas de van der Waals e interacciones entre estructuras aromáticas. La eficiencia del proceso depende de factores como la dosis del adsorbente, la concentración inicial del contaminante, el pH, la temperatura, el tiempo de contacto y las propiedades químicas y texturales de la superficie. En este trabajo, el hydrochar funcionalizado actúa como adsorbente para retener el colorante Reactive Orange 84 de la solución acuosa.

MATERIALES Y MÉTODOS

Producción de hydrochar

El hydrochar a partir de bagazo de agave (HCBA) se produjo mediante carbonización hidrotermal. El bagazo de agave (BA) se secó inicialmente a 80 °C durante aproximadamente 3 horas hasta eliminar completamente la humedad; posteriormente, se trituró y tamizó hasta obtener un tamaño de partícula de 1 mm. Los recipientes internos de PTFE se llenaron al 49.5 % de su volumen con 1.07 g de BA y 8.91 mL de soluciones de ácido sulfúrico (H_2SO_4) de concentraciones de 0.025, 0.05, 0.1, 0.125, 0.2, 0.25 y 0.5 M. Se preparó un control neutro utilizando agua destilada en lugar de ácido. Los recipientes se colocaron en reactores de acero inoxidable YVZOTCK (Industrial KEM, León, Guanajuato, México) y se calentaron en una mufla (Paragon Industries, L.P., Mesquite, Texas, EE. UU.) a 200° C durante 24 horas, alcanzando una presión interna aproximada de 2 MPa. Después de la reacción, los reactores se dejaron enfriar hasta temperatura ambiente y el hydrochar resultante se filtró mediante papel filtro Whatman No. 1 (Sigma-Aldrich, St. Louis, Missouri, EE. UU.) durante 24 horas.

Caracterización

El análisis termogravimétrico (TGA) se realizó utilizando aproximadamente 17 ± 0.5 mg de hydrocharen una cápsula de alúmina. Las muestras se calentaron desde temperatura ambiente hasta 700 °C a una velocidad de 10 °C min^{-1} empleando un equipo SDT Q600 (TA Instruments, New Castle, Delaware, EE. UU.). La espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier con reflectancia total atenuada (FTIR-ATR) se utilizó para identificar grupos funcionales superficiales mediante un espectrómetro Thermo Scientific Smart iTR (Nicolet iS10, Thermo Fisher Scientific, Waltham, Massachusetts, EE. UU.) equipado con un cristal ATR de diamante, en un intervalo de números de onda de 500–4000 cm^{-1}. El análisis por difracción de rayos X (XRD) se llevó a cabo utilizando un difractómetro Phillips X'Pert MPD (Malvern Panalytical, Almelo, Países Bajos) equipado con un monocromador curvo de grafito y radiación Cu Kα (λ = 1.54056 Å). El área superficial específica y la distribución de tamaño de poro mediante el método Brunauer–Emmett–Teller (BET) se determinaron utilizando un equipo Quantachrome NOVA 4200e (SpectraLab Scientific Inc., Markham, Ontario, Canadá). El sistema de adsorción utilizó nitrógeno como adsorbato. Los experimentos de isotermas de adsorción se realizaron a 77.35 K con una relación de presión relativa P/P_0 de 0.050/0.100 (adsorción/desorción).

Experimentos de remoción del colorante

El colorante Reactivo Naranja 84 (RO84) se utilizó como contaminante modelo en una solución sintética con una concentración inicial de 0.1 g L^{-1}. La solución de colorante se mezcló en vasos de precipitados con HCBA a diferentes dosificaciones (10, 8, 6, 4 y 2 g L^{-1}) y se agitó en una incubadora agitadora a 160 rpm durante 24 horas. Todos los experimentos se realizaron por triplicado. Después de la agitación, las muestras se filtraron mediante papel filtro Whatman No. 1 y se dejaron secar durante 24 horas. Se tomaron alícuotas de 5 mL y se analizaron mediante espectroscopía UV-Visible a 492 nm para determinar la concentración del colorante. Los datos de adsorción se ajustaron a los modelos de isotermas de Freundlich y Langmuir.

Red neuronal artificial: modelo ANN-GA

Para el desempeño de la red neuronal artificial (ANN), se requiere la recopilación de datos experimentales reales. Se utilizaron un total de 432 experimentos con cuatro variables para controlar y evaluar el comportamiento de la eficiencia de remoción bajo los parámetros establecidos. El siguiente paso consistió en diseñar la arquitectura de la ANN, probando diversas configuraciones con entradas como la concentración molar de H_2SO_4, la proporción de hydrochar por litro de solución y la concentración inicial del colorante. Finalmente, se utilizó una única salida: la eficiencia de remoción. Dado que no existe una metodología establecida para determinar el número de capas ocultas, el número de neuronas en la capa oculta o las funciones de transferencia, esta etapa se realizó mediante prueba y error. El modelado se llevó a cabo utilizando el software MATLAB (R2014a). La ANN fue entrenada mediante un perceptrón multicapa utilizando el algoritmo de retropropagación de Levenberg–Marquardt (LMBP).

De los 432 conjuntos de datos experimentales recopilados, el 70 % se utilizó para entrenar la ANN, el 20 % para realizar pruebas y el 10 % restante para validación, con base en el error cuadrático medio de la raíz (RMSE, Ecuación (1)) y el error porcentual absoluto medio (MAPE, Ecuación (2)).

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(t_i - t_{di})^2} \quad (1)$$

$$MAPE = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left|\frac{t_i - t_{di}}{t_i}\right| \times 100 \quad (2)$$

Para optimizar el proceso de adsorción, el algoritmo genético (GA) evalúa el conjunto de combinaciones posibles de condiciones operativas (individuos), buscando la mejor solución mediante una probabilidad de cruce (*crossover*) del 85 % y una tasa de mutación del 10 %, con el fin de evitar quedar atrapado en mínimos locales. La población inicial estuvo compuesta por 50 individuos, con un grupo élite de 4 individuos. Los límites superiores e inferiores de las variables de entrada se determinaron a partir de los datos experimentales. Al igual que en el modelado con ANN, no existe una metodología específica establecida para determinar los parámetros iniciales del algoritmo genético (GA). Por lo tanto, los valores correspondientes al tamaño de la población inicial, la tasa de mutación, la selección de individuos y el tipo de cruce fueron determinados mediante un proceso de prueba y error.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Espectroscopía de infrarrojo por transformada de Fourier (FTIR)

La Figura 1 muestra los espectros FTIR de los materiales producidos. Las señales en 2920 y 2848 cm^{-1} corresponden a vibraciones de estiramiento C–H, que pueden atribuirse a grupos alifáticos –CH, $–CH_2$ y $–CH_3$ derivados de compuestos lignocelulósicos abundantemente presentes en la biomasa. Las bandas en 1695 y 1600 cm^{-1} están asociadas con las vibraciones de estiramiento de los enlaces C=C y C=O, características de compuestos aromáticos presentes en el bagazo de agave. Además, picos adicionales entre 1161 y 1152 cm^{-1} indican la presencia de grupos $–SO_3H$, mientras que la señal en 1043 cm^{-1} corresponde al estiramiento simétrico O–S–O. Estas características confirman la sulfonación exitosa de la superficie del hydrochar (HC). Los resultados sugieren que la hidrólisis en medio ácido modificó la estructura del hydrochar, introduciendo grupos funcionales sulfónicos que incrementan su potencial de adsorción. Por otra parte, la Figura 1 muestra los espectros FTIR de HCBAW, obtenidos en agua destilada sin la adición de solución de ácido sulfúrico. Se puede observar que las bandas correspondientes a la hemicelulosa, lignina y celulosa aún están presentes, aunque con una disminución en su intensidad, lo que indica una degradación parcial de estos componentes.

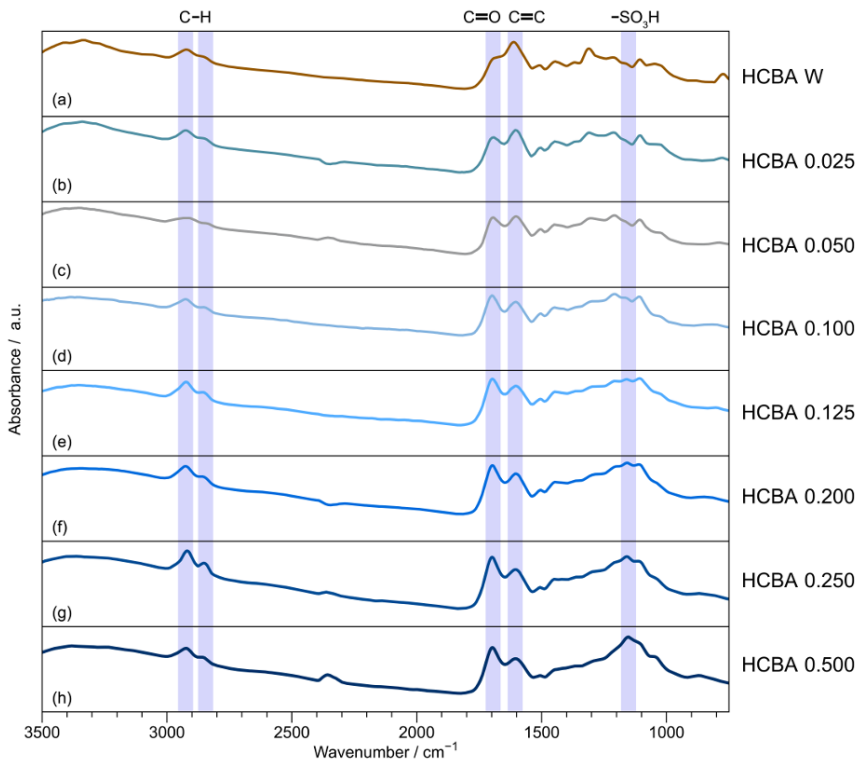


Figura 1. Espectroscopía FTIR-ATR de: (a) HCBA W; (b) HCBA 0.025; (c) HCBA 0.05; (d) HCBA 0.1; (e) HCBA 0.125; (f) HCBA 0.2; (g) HCBA 0.25; y (h) HCBA 0.5.

Análisis Termogravimétrico (TGA)

La Figura 2 presenta las curvas de análisis termogravimétrico (TGA) de las muestras sintetizadas, las cuales muestran de tres a cuatro etapas principales de pérdida de masa (I–IV). La primera pérdida de masa (~30–200 °C, etapa I) corresponde a la evaporación del agua y de compuestos volátiles ligeros. La segunda etapa (228–390 °C, etapa II, marcada en azul) se atribuye a la despolimerización de la celulosa y la hemicelulosa, mientras que las pérdidas de masa por encima de 400 °C (etapa III) están asociadas con la degradación de la lignina o la oxidación del carbón residual. Como se muestra en las Figuras 2a–c, se observó una pérdida de masa adicional por encima de 600 °C (etapa IV), la cual ha sido reportada como la combustión completa del material carbonáceo sólido. Una tendencia notable es que el incremento de la concentración de ácido durante la síntesis reduce el porcentaje de despolimerización de la celulosa y la hemicelulosa, lo que indica que la temperatura de reacción podría ser insuficiente para lograr la degradación completa de estos componentes. No obstante, concentraciones más elevadas de ácido sulfúrico (Figuras 2d–h) parecen favorecer la hidrólisis, facilitando la modificación estructural de la biomasa.

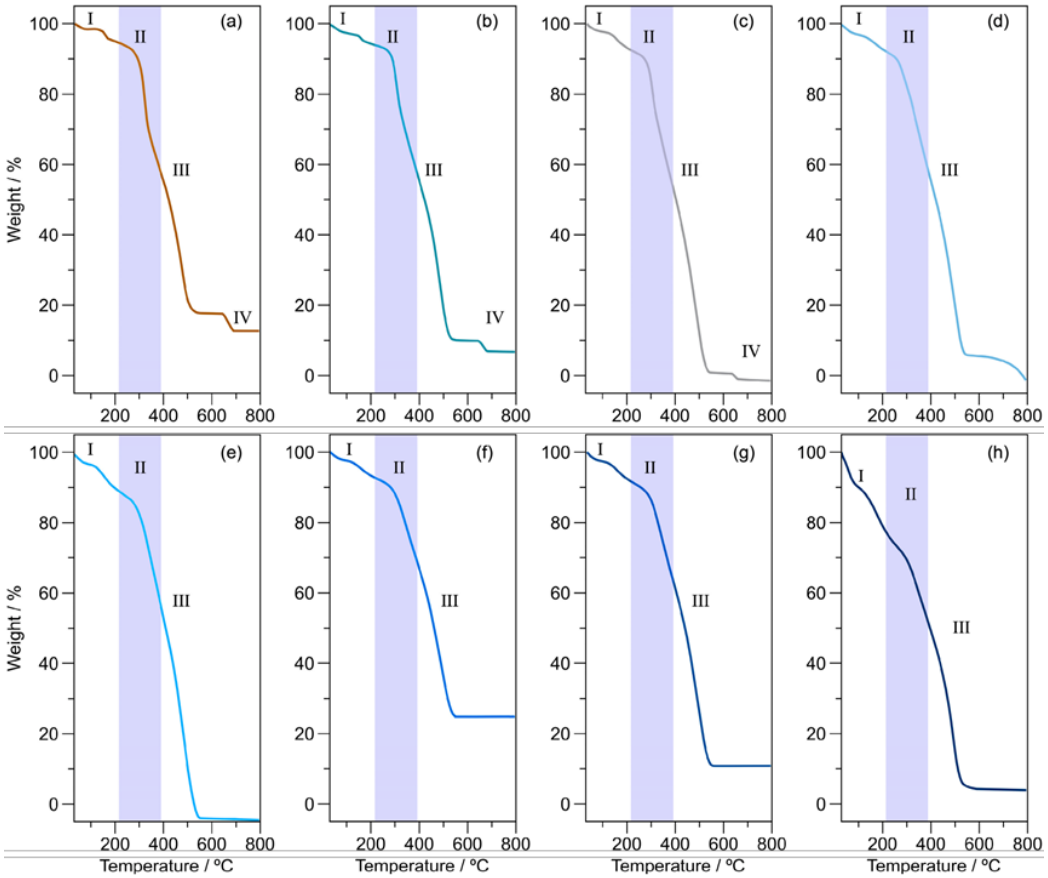


Figura 2. Termogramas TGA de: (a) HCBA W; (b) HCBA 0.025; (c) HCBA 0.05; (d) HCBA 0.1; (e) HCBA 0.125; (f) HCBA 0.2; (g) HCBA 0.25; y (h) HCBA 0.5. La despolimerización de la celulosa y la hemicelulosa se denomina etapa II, indicada en color azul.

Difracción de rayos X (XRD)

La Figura 3 presenta los difractogramas de rayos X (XRD) de las muestras de hydrochar modificadas (HC). La biomasa sin tratamiento (Figura 3a, HCBA W) exhibió picos en 14.92°, 24.78°, 29.99° y 38.02°. En contraste, HCBA 0.025 (Figura 3b) mostró picos en 14.78°, 24.35°, 25.48°, 30.13° y 38.30°, mientras que HCBA 0.05 (Figura 3c) presentó picos en 15.06°, 24.49°, 25.48° y 30.27°. Las muestras preparadas con concentraciones más altas de ácido (HCBA 0.1 a HCBA 0.5) mostraron un único pico cercano a 25°, indicando una pérdida progresiva de cristalinidad (Figuras 3d–h).

Las muestras que exhiben múltiples picos corresponden a una estructura de carbono amorfo junto con celulosa residual proveniente del bagazo de agave, lo que sugiere una carbonización incompleta. A medida que aumentó la concentración de H_2SO_4, estos picos disminuyeron gradual y finalmente desaparecieron, indicando la hidrólisis de los componentes lignocelulósicos. Este resultado coincide con los datos obtenidos mediante TGA, donde concentraciones más elevadas de ácido produjeron una menor pérdida de masa, comportamiento consistente con una hidrólisis más intensa. Además, la desaparición de los picos característicos de la celulosa alrededor de 25° sugiere la formación de microcristales de carbono amorfo durante el tratamiento hidrotérmico, de manera similar a lo reportado en estudios que describen la destrucción de la estructura de la celulosa tras la adición de ácido.

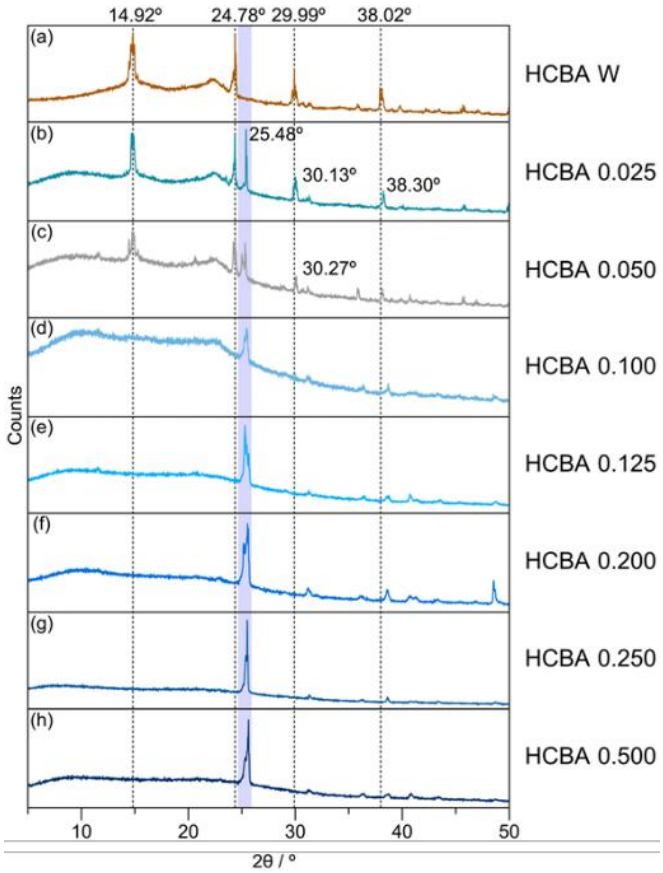


Figura 3. Difractogramas XRD de las muestras: (a) HCBA W; (b) HCBA 0.025; (c) HCBA 0.05; (d) HCBA 0.1; (e) HCBA 0.125; (f) HCBA 0.2; (g) HCBA 0.25; y (h) HCBA 0.5. La zona marcada en azul indica la formación de microcristales de carbono amorfo durante el tratamiento hidrotérmico.

Remoción del colorante

La Figura 4 muestra los resultados de adsorción del colorante RO84 utilizando hydrochars sintetizados con diferentes concentraciones de ácido y distintas dosificaciones (2–10 g L^{-1}). La eficiencia de remoción del colorante aumentó al incrementar la dosis de Hydrochar, probablemente debido a una mayor superficie de adsorción disponible. Sin embargo, las condiciones de síntesis también influyeron en el desempeño del adsorbente: las muestras sintetizadas únicamente con agua o con bajas concentraciones de ácido removieron menos colorante que aquellas preparadas con concentraciones más elevadas de ácido. Las propiedades de distribución del conjunto de datos respaldan completamente la elección de métodos estadísticos no paramétricos. Todas las variables asociadas con la remoción (Absorbancia, RO84_remain y Removal_percent) no superaron las pruebas de normalidad de Shapiro–Wilk, D'Agostino K^2 y Anderson–Darling. Además, tanto las pruebas de Levene como de Bartlett rechazaron la hipótesis de homogeneidad de varianzas. Estos resultados confirman que los supuestos requeridos para aplicar un ANOVA paramétrico no se cumplieron, validando el uso exclusivo de los análisis no paramétricos de Kruskal–Wallis y Dunn-Bonferroni.

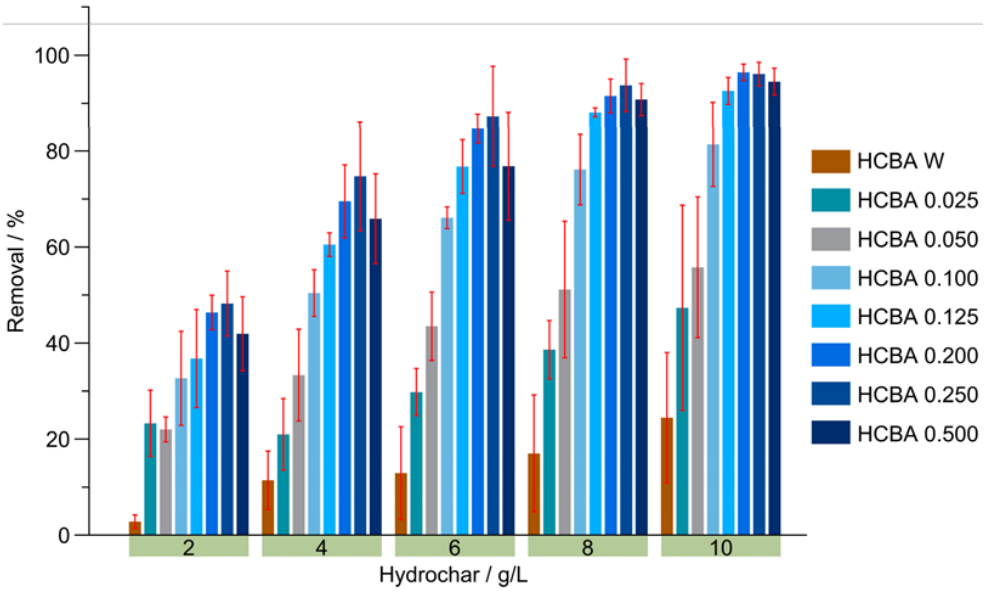


Figura 4. Remoción del colorante Reactive Orange 84 (RO84) utilizando Hydrochars sintetizados con diferentes concentraciones de H_2SO_4 y dosificaciones (2–10 g L^{-1}). Las barras de error representan el error estándar (n = 3). Las diferencias estadísticas entre tratamientos se evaluaron mediante la prueba de Kruskal–Wallis, seguida de comparaciones post hoc de Dunn con corrección de Bonferroni, debido a que no se cumplieron los supuestos de normalidad y homocedasticidadLetras diferentes indican diferencias estadísticamente significativas ($p < 0.05$).

Aunque inicialmente se consideró la aplicación de un ANOVA y la prueba de Tukey, los supuestos de normalidad y homogeneidad de varianzas no se cumplieron, como lo indicaron las pruebas de Shapiro–Wilk, D'Agostino K^2, Anderson–Darling, Levene y Bartlett. Por lo tanto, todas las comparaciones estadísticas reportadas en la Figura 4 se realizaron exclusivamente mediante la prueba de Kruskal–Wallis, seguida del procedimiento post hoc de Dunn con corrección de Bonferroni, garantizando una completa consistencia metodológica. El mejor desempeño se obtuvo con la muestra HCBA 0.25, aunque su diferencia con HCBA 0.2 y HCBA 0.5 no fue estadísticamente significativa. Estos resultados concuerdan con los reportados por Caglar et al., quienes informaron que la funcionalización con ácido sulfúrico mejora la adsorción de colorantes aniónicos sobre superficies de biochar. Los resultados también muestran que la mayor remoción de colorante se alcanzó con la muestra HCBA 0.25; sin embargo, esta diferencia no fue estadísticamente significativa en comparación con las muestras HCBA 0.2 y HCBA 0.5. En este estudio se obtuvieron porcentajes de remoción superiores (con un máximo de 96 %) a los reportados en otros trabajos que utilizaron Hydrochar funcionalizado con H_2SO_4 para la eliminación de colorantes catiónicos, donde se registraron eficiencias de aproximadamente 85.3 % y 76 %. Los espectros FTIR obtenidos después de la adsorción son consistentes con la participación de grupos $–SO_3H$ en la remoción del colorante, lo que sugiere que estos grupos estuvieron directamente involucrados en la interacción con el RO84. No obstante, se requieren análisis adicionales (por ejemplo, XPS) para confirmar dicha interacción.

ANÁLISIS DE DATOS

Redes neuronales

Durante la recopilación de datos, todos los parámetros fueron variados aleatoriamente a lo largo de 432 experimentos. Como se mencionó anteriormente, la aplicación de un modelo basado en redes neuronales artificiales (ANN, por sus siglas en inglés) implica cinco etapas: recopilación de datos, entrenamiento, selección de la arquitectura, pruebas y validación. Después de recopilar el 70 % del conjunto de datos, el 30 % restante se utilizó para entrenar el modelo y seleccionar la arquitectura adecuada de la ANN. Durante este proceso, se evaluaron diferentes cantidades de capas ocultas y

neuronas por capa, y se analizó la precisión predictiva de cada red neuronal hasta identificar aquella que presentó los menores valores de MAPE y RMSE . La Tabla 1 presenta los valores de entrada utilizados para el entrenamiento y la selección de la arquitectura de la ANN.

Tabla 1. Valores promedio, mínimos y máximos de los datos experimentales recopilados para el entrenamiento del modelo ANN.

Parámetro	Valor medio	Mínimo	Máximo
Concentración de H_2SO_4 (M)	0.16 (±0.15)	0	0.5
Hydrochar (g L^{-1})	5.01 (±3.42)	0	10
Concentración inicial del colorante (mg L^{-1})	57.45 (±36.68)	1.11	116.7
Remoción (%)	47.10 (±33.8)	0	98.9

La red neuronal artificial (ANN) se utilizó para identificar una relación no lineal entre las variables de entrada y salida. Se probaron varias topologías con el fin de obtener los valores más bajos de MAPE y RMSE, dando como resultado una ANN con las entradas seleccionadas, dos capas ocultas que contenían 12 y 7 neuronas, respectivamente, y funciones de transferencia sigmoidal tangencial para cada capa (Figura 5). Esta arquitectura alcanzó un MAPE de 1.42 y un RMSE de 0.6 %. De acuerdo con estudios previos, el aprendizaje automático (*machine learning*) puede aprender y predecir el comportamiento de un proceso; sin embargo, la selección adecuada de las variables de entrada y salida es esencial. Diversos factores pueden influir en la eficiencia de remoción de colorantes sintéticos en soluciones acuosas. Estas variables incluyen el pH, la concentración inicial del contaminante, el tiempo de contacto y la temperatura. En algunos casos, también se consideran el tipo de adsorbente utilizado y la velocidad de agitación.

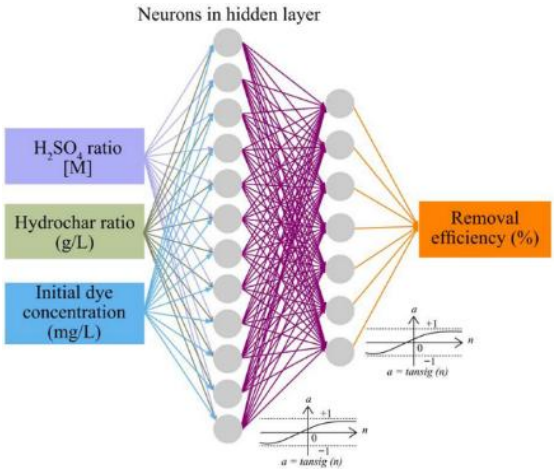


Figura 5. Arquitectura de la ANN (red neuronal artificial).

En todos los casos se analizó la eficiencia de remoción. En este estudio, las variables de entrada seleccionadas están alineadas con este objetivo, eligiéndose variables de entrada la concentración inicial del colorante y la dosis del adsorbente. Sin embargo, en lugar de utilizar valores de pH, se seleccionó la concentración molar de H_2SO_4. Algunos estudios han empleado modelos de aprendizaje automático para predecir la remoción de colorantes sintéticos mediante adsorbentes a base de carbono, incluyendo verde brillante (Brilliant Green), rojo Congo y azul de metileno. Estos modelos predijeron con precisión el comportamiento del proceso; sin embargo, para alcanzar las máximas eficiencias de remoción o minimizar el uso de reactivos, fue necesario implementar un método de optimización. En este estudio se utilizó un algoritmo genético para este propósito.

Optimización de la adsorción de un colorante sintético mediante AG

El objetivo de utilizar un modelo ANN-AG (Red Neuronal Artificial–Algoritmo Genético) fue identificar condiciones operativas que maximizaran la eficiencia de remoción mientras se requerían relativamente pocos recursos. Estudios previos han optimizado con éxito la adsorción de colorantes sintéticos mediante el diseño de experimentos, donde la metodología de superficie de respuesta ha resultado adecuada para determinar las condiciones operativas óptimas y lograr la mayor remoción del colorante sintético, identificando la variable con mayor impacto sobre la variable de respuesta. Estos estudios lograron la remoción completa del colorante sintético a concentraciones inferiores a 40 mg L^{-1}. Sin embargo, una limitación de estos estudios es que solo pueden realizarse pocas modificaciones en cada variable, lo que normalmente conduce al análisis de únicamente entre 3 y 5 combinaciones. Por el contrario, algunos autores han reportado que la modificación de la concentración inicial del colorante, el pH, el tiempo de contacto o la temperatura puede incrementar la eficiencia máxima de remoción del proceso. Tales estudios demandan una cantidad considerable de tiempo, esfuerzo y recursos, ya que las variables se examinan de forma independiente y solo se evalúan un número limitado de combinaciones a la vez. En esta investigación se empleó un modelo de AG, capaz de evaluar simultáneamente todas las combinaciones e interacciones posibles, ya que explora de manera integral todo el rango de opciones potenciales. Cuando se aplica un AG, la ANN funciona como una herramienta de aptitud (fitness function) capaz de simular virtualmente todos los datos experimentales que no fueron recopilados durante la fase de obtención de datos debido a limitaciones de tiempo y recursos. En consecuencia, el modelo se vuelve fundamental para simular y probar todas las combinaciones posibles de condiciones experimentales, permitiendo así ahorrar recursos valiosos. Fue necesario un modelo combinado de inteligencia artificial ANN-AG para simular los complejos procesos no lineales involucrados en la adsorción del colorante sintético utilizando hydrochar. Aunque solo se utilizaron tres variables, estas fueron las que ejercieron la mayor influencia sobre la eficiencia de remoción del colorante sintético, según lo determinado por estudios de optimización de la adsorción. El modelo de AG se desarrolló utilizando una población de individuos, cada uno con un código genético basado en la concentración molar de H_2SO_4, la dosis del adsorbente, la concentración inicial del colorante y la eficiencia de remoción resultante. Después de seleccionar las probabilidades de cruzamiento (crossover) y una tasa de mutación para una población inicial basada en posibles condiciones experimentales que maximizaran la eficiencia de remoción mientras minimizaban los requerimientos, el AG genera una población de individuos que producen nuevos descendientes, representando combinaciones completamente nuevas de condiciones experimentales. Este proceso continúa hasta que se identifica la solución óptima al problema, definida como la combinación de condiciones experimentales que proporciona la mayor eficiencia de remoción con los menores requerimientos posibles (Tabla 2).

Tabla 2. Posibles condiciones operativas para el proceso de investigación del HCBA.

Variable	Parámetro
$[H_2SO_4]$ (M)	0.45
Hydrochar (g L^{-1})	1.4
Concentración inicial del colorante (mg L^{-1})	100
Remoción (%)	99.9

Combinación propuesta

La Tabla 2 proporciona un ejemplo claro de una solución global a un problema de optimización, donde el algoritmo genético (GA) recomienda una concentración molar de H_2SO_4 de 0.45 M, una baja dosificación de hydrochar y una alta concentración de colorante sintético. Aunque controlar la concentración inicial del contaminante resulta difícil en instalaciones reales de tratamiento de aguas residuales, este valor ofrece información valiosa sobre el desempeño del proceso bajo estos parámetros, de acuerdo con el modelo ANN-GA. En conclusión, este estudio aporta evidencias confiables sobre cómo la inteligencia artificial (IA) puede mejorar la eliminación de contaminantes en procesos de adsorción. Finalmente, la Tabla 3 muestra los resultados obtenidos tras evaluar experimentalmente las condiciones recomendadas por el modelo de IA. Como puede observarse, se alcanzó una remoción cercana al 100 %, lo que confirma la confiabilidad del modelo.

Tabla 3. Validación experimental del modelo ANN-GA.

Experimento	[H_2SO_4] (M)	Hydrochar (g L^{-1})	Concentración inicial del colorante (mg L^{-1})	Remoción (%)
1	0.45	1.4	100	97.0
2	0.45	1.4	100	99.9
3	0.45	1.4	100	98.0

CONCLUSIONES

El estudio demostró que el HC funcionalizado obtenido mediante tratamiento hidrotérmico del bagazo de agave en presencia de H_2SO_4 mejora eficazmente el desempeño en la remoción de colorantes. Los análisis de caracterización (BET, FTIR-ATR, TGA y XRD) confirmaron que la síntesis hidrotérmica asistida por ácido produce un material con una amplia distribución de tamaños de poro y grupos funcionales sulfonados. El aumento de la concentración de ácido en el medio de síntesis promueve la hidrólisis de los componentes lignocelulósicos, mejorando la reactividad superficial del HC resultante. Los experimentos de adsorción y los análisis FTIR posteriores a la adsorción indicaron que los grupos sulfonados ($–SO_3$) del HC interactúan activamente con el colorante RO84, probablemente mediante mecanismos de enlace o intercambio iónico, mejorando así la eficiencia de remoción. La desaparición de la banda correspondiente a $–SO_3$ después de la adsorción respalda además la participación de estos grupos en el proceso de remoción. Los análisis estadísticos confirmaron que tanto la concentración de H_2SO_4 como la dosis de HC ejercen efectos significativos y sinérgicos sobre la remoción del colorante. Estos hallazgos fueron respaldados de manera consistente por pruebas no paramétricas, análisis de correlación y modelos predictivos, proporcionando una base sólida para la optimización del proceso. El modelo de regresión desarrollado permite predecir de manera confiable la eficiencia de remoción bajo diferentes condiciones experimentales. La remoción óptima se logró utilizando HC sintetizado con concentraciones de ácido entre 0.20 y 0.25 M y una dosis de adsorbente de 10 g L^{-1}, proporcionando el mejor equilibrio entre el desempeño del material y la estabilidad del proceso. El análisis FTIR reveló la aparición del grupo $–SO_3$ en el material funcionalizado. Sin embargo, la desaparición de esta banda después del proceso de remoción indica que dichos grupos interactúan activamente con el colorante, posiblemente mediante enlaces iónicos o reacciones de intercambio, lo que sugiere que el ácido no solo modifica la superficie del adsorbente, sino que también interviene directamente en el mecanismo de remoción. El modelo de red neuronal artificial (ANN) fue capaz de simular el proceso de adsorción y, tras la aplicación del algoritmo genético (GA), se determinó una combinación óptima de condiciones operativas. Al evaluar estos valores, el modelo demostró su confiabilidad, alcanzando una alta eficiencia de remoción con un consumo mínimo de recursos. Esto valida la utilidad de este modelo de inteligencia artificial para resolver problemas de optimización que involucran interacciones no lineales complejas.

BIBLIOGRAFÍA

1. Medina-Esparza, W.N.; Aguilar-Juárez, O.; Gómez-Salazar, S.; Morán-Salazar, R.; López-Covarrubias, M.; Leal-Quezada, L.O.; Del Real-Olvera, J.; Reyes-Gómez, V.M. Efficiency of a New Biochar Made from Agave Bagasse to Remove Conventional Pollutants in Samples from Laguna de Bustillos, Chihuahua, Mexico, and Pharmaceutical Derivatives in Synthetic Water. Processes 2025, 13, 1861.
2. Ruiz-Velducea, H.A.; de Moreno-Vásquez, M.J.; Guzmán, H.; Esquer, J.; Rodríguez-Félix, F.; Graciano-Verdugo, A.Z.; Santos Sauceda, I.; Quintero-Reyes, I.E.; Barreras-Urbina, C.G.; Vásquez-López, C.; et al. Valorization of Agave Angustifolia Bagasse Biomass from the Bacanora Industry in Sonora, Mexico as a Biochar Material: Preparation, Characterization, and Potential Application in Ibuprofen Removal. Sustain. Chem. 2024, 5, 196–214.
3. Hamad, N.; Galhoum, A.A.; Saad, A.; Wageh, S. Efficient Adsorption of Cationic and Anionic Dyes Using Hydrochar Nanoparticles Prepared from Orange Peel. J. Mol. Liq. 2024, 409, 125349.
4. Cavali, M.; Libardi Junior, N.; de Sena, J.D.; Woiciechowski, A.L.; Soccol, C.R.; Belli Filho, P.; Bayard, R.; Benbelkacem, H.; de Castilhos Junior, A.B. A Review on Hydrothermal Carbonization of Potential Biomass Wastes, Characterization and Environmental Applications of Hydrochar, and Biorefinery Perspectives of the Process. Sci. Total Environ. 2023, 857, 159627.
5. Giraldo, L.; Bernal Fernandez, V.; Moreno-Piraján, J.C. Thermodynamic Data of Phenol Adsorption on Chemically Modified Activated Carbons. Data Brief. 2020, 29, 105240.
6. Ramirez, A.; Ocampo, R.; Giraldo, S.; Padilla, E.; Flórez, E.; Acelas, N. Removal of Cr (VI) from an Aqueous Solution Using an Activated Carbon Obtained from Teakwood Sawdust: Kinetics, Equilibrium, and Density Functional Theory Calculations. J. Environ. Chem. Eng. 2020, 8, 103702.
7. Grisales-Cifuentes, C.M.; Serna Galvis, E.A.; Porras, J.; Flórez, E.; Torres-Palma, R.A.; Acelas, N. Kinetics, Isotherms, Effect of Structure, and Computational Analysis during the Removal of Three Representative Pharmaceuticals from Water by Adsorption Using a Biochar Obtained from Oil Palm Fiber. Bioresour. Technol. 2021, 326, 124753.
8. Dhanda, A.; Thulluru, L.P.; Chakraborty, D.; Chowdhury, S.; Dubey, B.K.; Ghangrekar, M.M. Sulfonated Algal Hydrochar Modified PVA Membranes for Microbial Fuel Cell Applications and Valorization of Hydrothermal by-Products. Mater. Chem. Phys. 2025, 346, 131329.
9. Boral, P.; Varma, A.K.; Maity, S. Nitration of Jharia Basin Coals, India: A Study of Structural Modifications by XRD and FTIR Techniques. Int. J. Coal Sci. Technol. 2021, 8, 1034–1053.
10. Xu, X.; Zhu, D.; Jian, Q.; Wang, X.; Zheng, X.; Xue, G.; Liu, Y.; Li, X.; Hassan, G.K. Treatment of Industrial Ferric Sludge through a Facile Acid-Assisted Hydrothermal Reaction: Focusing on Dry Mass Reduction and Hydrochar Recyclability Performance. Sci. Total Environ. 2023, 869, 161879.
11. Alhammadi, A.A.; Nasser, R.; Shaban, M.S.; Othman, S.I.; Khim, J.S.; Ajarem, J.S.; Allam, A.A.; Abukhadra, M.R. Insight into the Effect of Sulfonation Techniques on the Adsorption Properties of -SO3H Surface-Functionalized Coal as Adsorbent for Malachite Green Dye: Steric and Energetic Investigation. ACS Omega 2022, 7, 36697–36711.
12. Muteeb, G.; Alshoaibi, A.; Ansari, K. Experimental Optimization and Machine Learning Modeling for Sustainable Congo Red Dye Removal from Wastewater Using Activated Goat Bone Biochar. J. Sci. Adv. Mater. Devices 2025, 10, 100947.
13. Alvez-Tovar, B.; Scalize, P.S.; Angiolillo-Rodríguez, G.; Albuquerque, A.; Ebang, M.N.; de Oliveira, T.F. Agro-Industrial Waste Upcycling into Activated Carbons: A Sustainable Approach for Dye Removal and Wastewater Treatment. Sustainability 2025, 17, 2036.
14. Zhao, W.; Hao, C.; Guo, Y.; Shao, W.; Tian, Y.; Zhao, P. Optimization of Adsorption Conditions Using Response Surface Methodology for Tetracycline Removal by MnFe2O4/Multi-Wall Carbon Nanotubes. Water 2023, 15, 2392.
15. Brooke, R.; Fan, L.; Khayet, M.; Wang, X. A Complementary Approach of Response Surface Methodology and an Artificial Neural Network for the Optimization and Prediction of Low Salinity Reverse Osmosis Performance. Heliyon 2022, 8, e10692.

16. Kohzadi, S.; Marzban, N.; Libra, J.A.; Bundschuh, M.; Maleki, A. Removal of RhB from Water by Fe-Modified Hydrochar and Biochar—An Experimental Evaluation Supported by Genetic Programming. J. Mol. Liq. 2023, 369, 120971.
17. Velásco-Mejía, A.; Vallejo-Becerra, V.; Chávez-Ramírez, A.U.; Torres-González, J.; Reyes-Vidal, Y.; Castañeda-Zaldivar, F. Modeling and Optimization of a Pharmaceutical Crystallization Process by Using Neural Networks and Genetic Algorithms. Powder Technol. 2016, 292, 122–128.
18. Dinno, A. Nonparametric Pairwise Multiple Comparisons in Independent Groups Using Dunn's Test. Stata J. 2015, 15, 292–300.

EVALUACIÓN ESPACIO–TEMPORAL DE ELEMENTOS POTENCIALMENTE TÓXICOS EN SEDIMENTOS DE MANGLAR DEL EJIDO AQUILES SERDÁN

Ilse Irene Hernández Mendoza[1,2], María Antonia Lunagómez Rocha[1], Hermicenda Pérez Vidal[1] , Ciro Eliseo Márquez Herrera[2]

[1]División Académica de Ciencias Básicas, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, [2]Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México.

ilse.i@quimica.unam.mx.

RESUMEN

Los manglares del Área Natural Protegida Laguna de Mecoacán sostienen funciones ecológicas clave y, por su dinámica de retención de sedimentos, pueden acumular elementos potencialmente tóxicos (EPT) cuya distribución responde tanto a controles naturales como a presiones antrópicas. En este estudio se integran tres campañas de muestreo (2023–2025) para establecer una línea base geoquímica y describir los principales patrones espacio–temporales de Co, Cr, Cu, Ni, Pb, V y Zn en sedimento superficial del Ejido Aquiles Serdán, considerando cuatro zonas con distinto uso de suelo: reforestada, regeneración natural, reserva y agrícola. Se realizaron muestreos en 2023 (estiaje), 2024 (transición lluvias–estiaje) y 2025 (lluvias) mediante un diseño sistemático por zona. Las muestras se acondicionaron (secado, homogenización y tamizado), se digirieron por vía ácida y se cuantificaron EPT mediante espectrometría con plasma acoplado inductivamente. Los resultados se analizaron con estadística descriptiva por zona/campaña y herramientas multivariadas para evaluar co-variación, agrupamientos y cambios entre temporadas. En las tres campañas, Cr y Ni dominaron en concentración relativa, mientras que Pb y Co se mantuvieron en niveles comparativamente menores. En 2023 se observó un contraste espacial más marcado, con incrementos de Cr, V y Ni en sitios asociados a condiciones hidrodinámicas y deposicionales locales, y una variabilidad notable de Cu y Zn entre zonas, sugiriendo controles geoquímicos puntuales. Durante 2024 se registró la mayor dispersión de concentraciones entre zonas, consistente con procesos estacionales de resuspensión, transporte y redeposición. En 2025 persistió la dominancia de Cr y Ni, con tendencia a mayor homogeneidad espacial para algunos EPT; sin embargo, Cu, Pb y Zn conservaron contrastes locales vinculados al uso de suelo. El patrón multivariado mostró asociaciones fuertes Cr–Ni–Co, compatibles con un control predominantemente litogénico, mientras que Cu, Pb y Zn se asociaron a componentes más variables del sistema sedimentario. En conjunto, los hallazgos confirman que la señal geoquímica del manglar está dominada por fuentes naturales, moduladas por la estacionalidad y por diferencias de uso de suelo, lo que influye en la movilidad y redistribución de EPT. El enfoque multitemporal permite reportar resultados concluyentes y sustenta el monitoreo futuro y la evaluación de riesgo ambiental con criterios comparables internacionalmente.

INTRODUCCIÓN

Los manglares son ecosistemas costeros de alta relevancia ecológica debido a su capacidad para proteger la línea de costa, retener sedimentos, acumular materia orgánica, sostener biodiversidad y participar activamente en los ciclos biogeoquímicos de nutrientes y carbono. Su estructura radicular favorece la disminución de la energía hidrodinámica, la deposición de partículas finas y la retención de materiales transportados desde ambientes terrestres, fluviales y marinos. Por esta razón, los sedimentos de manglar pueden funcionar como reservorios naturales de elementos traza, incluyendo elementos potencialmente tóxicos como Cr, Ni, Cu, Pb, V, Zn y Co [1,2].

La acumulación de metales y metaloides en sedimentos de manglar puede responder tanto a fuentes naturales como a actividades humanas. Entre los controles naturales destacan la composición litológica de los materiales parentales, la granulometría, la mineralogía, el contenido de materia orgánica, las condiciones redox, el pH y la dinámica de mareas o escorrentía. Por otro lado, las actividades agrícolas, urbanas, industriales y petroquímicas pueden modificar las concentraciones

naturales de estos elementos, incrementar su disponibilidad o alterar sus patrones de distribución espacial [2–4].

En sistemas de manglar sometidos a presiones ambientales crecientes, el análisis de sedimentos superficiales permite establecer líneas base geoquímicas útiles para diferenciar entre señales naturales y posibles aportes antrópicos. Estudios realizados en manglares de China, el Golfo Pérsico y otros sistemas costeros han mostrado que elementos como Cr, Ni, Cu, Zn, Pb, Cd y As pueden presentar distribuciones contrastantes según el uso de suelo, la intensidad de urbanización, la acuacultura, la actividad industrial y las condiciones sedimentarias locales [3–6]. En este sentido, la evaluación multitemporal de elementos potencialmente tóxicos resulta fundamental para comprender si las variaciones observadas responden a procesos estacionales, a diferencias espaciales persistentes o a cambios recientes en el entorno.

El Área Natural Protegida Laguna de Mecoacán, ubicada en Paraíso, Tabasco, constituye un ecosistema costero de alta importancia ambiental y socioecológica. En esta zona se localiza el Ejido Aquiles Serdán, donde existen áreas de manglar reforestado, zonas de regeneración natural, áreas destinadas a reserva y zonas agrícolas. Esta heterogeneidad del uso de suelo ofrece una oportunidad para evaluar cómo la estructura del paisaje y la dinámica sedimentaria influyen en la distribución de elementos potencialmente tóxicos.

El objetivo de este trabajo fue evaluar la distribución espacio–temporal de Co, Cr, Cu, Ni, Pb, V y Zn en sedimentos superficiales del Ejido Aquiles Serdán durante tres campañas de muestreo realizadas entre 2023 y 2025, considerando cuatro zonas con distinto uso de suelo. Asimismo, se buscó identificar patrones geoquímicos dominantes, diferencias significativas por zona y año, y posibles asociaciones elementales que permitan fortalecer una línea base ambiental para el monitoreo futuro del sistema de manglar.

TEORÍA

Sedimentos de manglar como reservorios geoquímicos

Los sedimentos de manglar presentan condiciones particulares que favorecen la acumulación y transformación de elementos traza. La abundancia de raíces, la elevada producción de materia orgánica y la presencia de sedimentos finos incrementan la capacidad de adsorción, complejación y coprecipitación de metales. En ambientes anóxicos o subóxicos, algunos elementos pueden asociarse con sulfuros, óxidos e hidróxidos de Fe y Mn, materia orgánica o fracciones minerales residuales. Sin embargo, cambios en el pH, potencial redox, salinidad o contenido de materia orgánica pueden modificar la movilidad y disponibilidad de estos elementos [1,2].

Los elementos potencialmente tóxicos pueden tener orígenes diversos. Cr, Ni, Fe y Al suelen estar asociados con la matriz mineral o fuentes litogénicas, aunque también pueden incrementarse por actividades industriales. Cu, Zn y Pb pueden presentar mayor sensibilidad a aportes urbanos, agrícolas, industriales o a procesos locales de acumulación sedimentaria. V, por su parte, puede estar presente de forma natural en ciertos materiales geológicos, pero también se ha relacionado con emisiones, combustión de hidrocarburos y actividades vinculadas al petróleo en ambientes influenciados por desarrollo industrial [2,4,5].

PARTE EXPERIMENTAL

Área de estudio

El estudio se realizó en el Ejido Aquiles Serdán, ubicado en el municipio de Paraíso, Tabasco, dentro del Área Natural Protegida Laguna de Mecoacán (Fig.1). El área presenta ambientes de manglar con diferentes grados de conservación, restauración e influencia por actividades productivas. Para el

diseño de muestreo se consideraron cuatro zonas: Z1, zona reforestada; Z2, zona de regeneración natural; Z3, zona de reserva; y Z4, zona agrícola.

Estas zonas representan condiciones contrastantes de uso de suelo y cobertura vegetal, lo que permite evaluar diferencias en la acumulación de elementos potencialmente tóxicos en sedimentos superficiales. La zona reforestada y la zona de regeneración natural se caracterizan por procesos de recuperación de manglar, mientras que la zona de reserva representa un área con menor intervención directa. La zona agrícola se encuentra influenciada por actividades productivas y por procesos de escorrentía superficial.

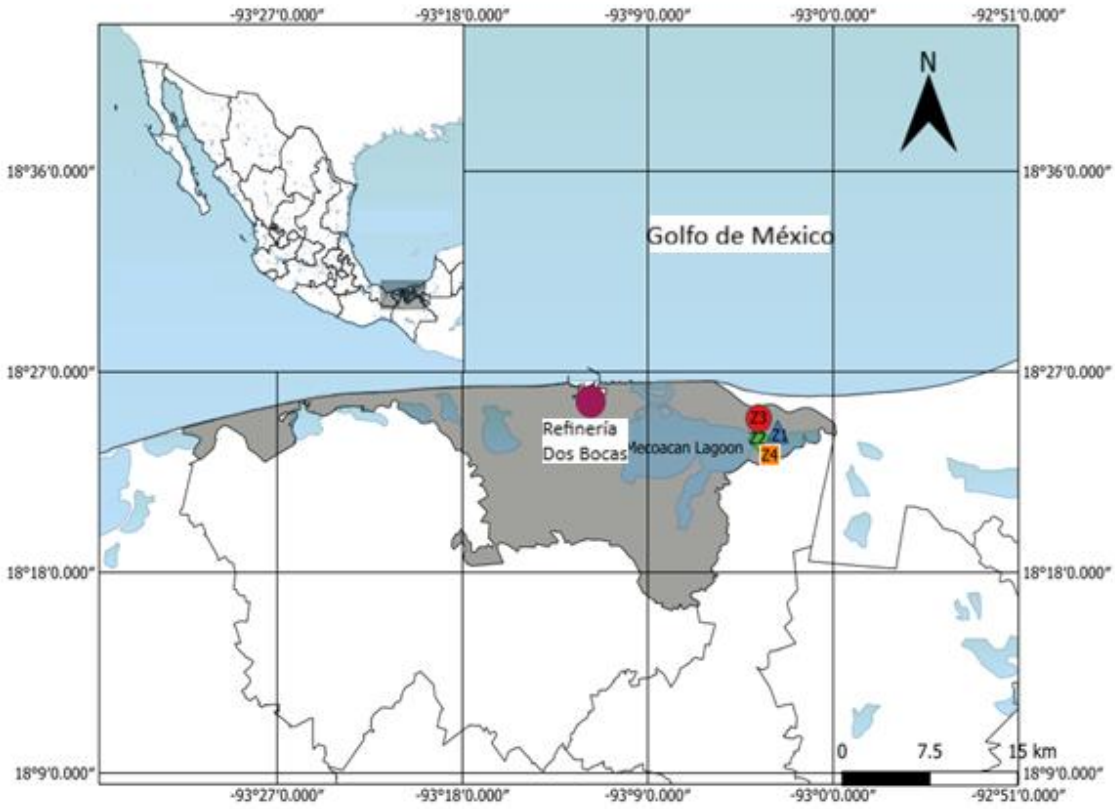


Figura 1 Ubicación geográfica de las zonas de estudio

Diseño de muestreo

Se integraron tres campañas de muestreo realizadas durante condiciones estacionales contrastantes: estiaje 2023, transición lluvias–estiaje 2024 y lluvias 2025. En total se consideraron 78 muestras de sedimento superficial distribuidas entre las cuatro zonas de estudio. La distribución muestral fue: Z1, n = 26; Z2, n = 14; Z3, n = 19; y Z4, n = 19. Por año, se analizaron 24 muestras para 2023, 28 para 2024 y 26 para 2025.

El muestreo se realizó mediante un diseño sistemático por zona, procurando representar la variabilidad espacial del sedimento superficial (Fig.2). Las muestras fueron colocadas en recipientes limpios, etiquetadas y trasladadas al laboratorio para su acondicionamiento y análisis.



Figura 2 Muestreo de sedimentos de manglar junio 2023

Preparación de muestras y análisis químico

Las muestras de sedimento fueron secadas, homogenizadas y tamizadas antes del proceso de digestión ácida. Posteriormente, se realizó una digestión por vía ácida para extraer los elementos de interés (Fig. 3). La cuantificación de Co, Cr, Cu, Ni, Pb, V, Zn, Fe y Al se llevó a cabo mediante espectrometría con plasma acoplado inductivamente.

El uso de técnicas espectrométricas con plasma acoplado inductivamente permite la determinación multielemental de metales y metaloides en matrices ambientales con adecuada sensibilidad, precisión y capacidad de análisis simultáneo.

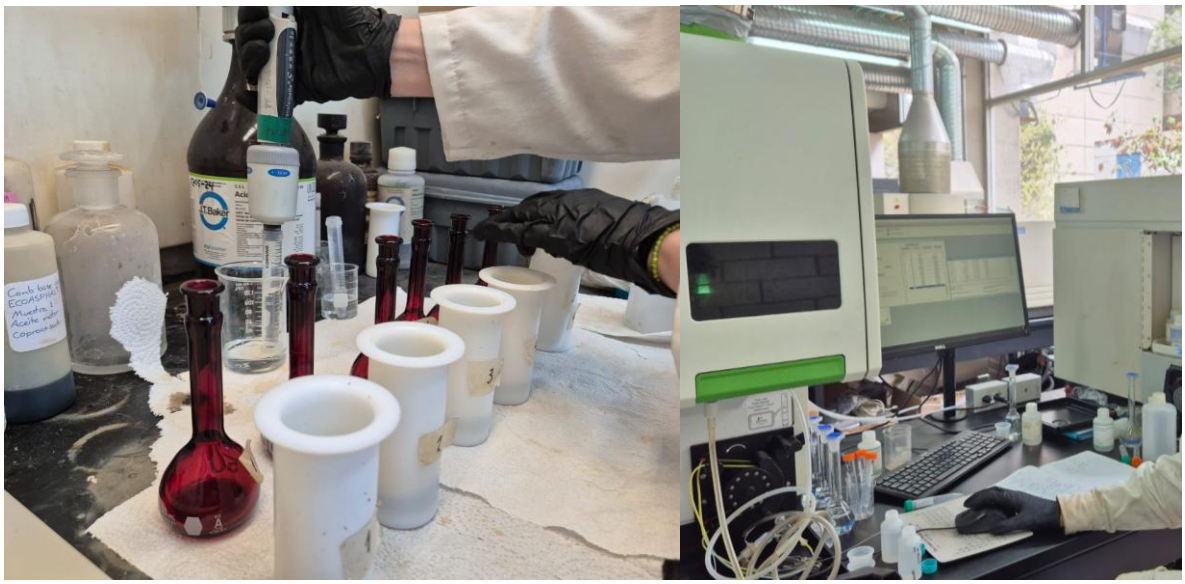


Figura 3 Preparación química de muestras y medición de muestras en ICP-OES

Análisis estadístico

Los datos fueron analizados mediante estadística descriptiva por zona y campaña. Se evaluaron medias, desviaciones estándar y patrones de dispersión. Para determinar diferencias significativas se aplicó un modelo factorial considerando los factores zona, año y la interacción zona × año. Asimismo, se emplearon contrastes multivariados para evaluar cambios globales en la composición elemental de los sedimentos.

La comparación entre grupos se realizó mediante pruebas post hoc de Tukey, considerando un nivel de significancia de $p < 0.05$. Debido a que la prueba de Levene indicó heterogeneidad de varianzas para varios elementos, la interpretación estadística se realizó considerando tanto la significancia como el tamaño del efecto y los patrones gráficos observados.

RESULTADOS

Composición elemental general

Las concentraciones promedio generales mostraron que los elementos mayoritarios en el conjunto de EPT evaluados fueron Cr, V, Ni y Zn, mientras que Co y Pb presentaron concentraciones menores. Las medias generales fueron aproximadamente: Co = 8.51 mg kg^{-1}, Cr = 171.68 mg kg^{-1}, Cu = 23.08 mg kg^{-1}, Ni = 64.41 mg kg^{-1}, Pb = 7.91 mg kg^{-1}, V = 79.45 mg kg^{-1}, Zn = 64.56 mg kg^{-1}, Fe = 19809.71 mg kg^{-1} y Al = 39178.53 mg kg^{-1}.

Este patrón evidencia una señal geoquímica dominada por Cr, V, Ni y Zn dentro de los elementos potencialmente tóxicos evaluados. La presencia de Fe y Al en concentraciones elevadas es consistente con su papel como componentes principales de la matriz mineral del sedimento, mientras que Co y Pb se mantuvieron en niveles comparativamente bajos.

Efecto de la zona

El análisis de varianza mostró que el factor zona fue significativo para Co, Cr, Cu, Pb, V, Zn, Fe y Al, mientras que Ni no presentó diferencias significativas entre zonas. Este resultado indica que la mayoría de los elementos evaluados respondieron a diferencias espaciales asociadas con el uso de suelo y las características sedimentarias de cada zona.

La zona Z1, correspondiente al área reforestada, presentó las mayores concentraciones promedio de Cr, V, Ni y Al. Este patrón puede asociarse con una mayor capacidad de retención de partículas finas y material mineral dentro de la estructura del manglar reforestado. La presencia de raíces y la acumulación de materia orgánica pueden favorecer la deposición de sedimentos y la retención de elementos asociados con la matriz mineral.

La zona Z4, correspondiente al área agrícola, presentó los mayores valores promedio de Co, Pb, Zn y Fe. Este comportamiento sugiere una señal geoquímica distinta, posiblemente influenciada por escorrentía superficial, aporte de partículas desde áreas productivas o diferencias en la composición del sedimento. En contraste, la zona Z3, considerada de reserva, mostró las menores concentraciones de Cu, Pb, V, Zn, Fe y Al, lo que indica una menor acumulación relativa de varios elementos en comparación con las zonas reforestada, en regeneración o agrícola.

Las comparaciones múltiples de Tukey mostraron diferencias claras para Cu, V, Zn, Fe y Al. Para Cu, la zona Z3 presentó los valores más bajos y fue significativamente diferente de las demás zonas. Para V, Z1 y Z2 presentaron mayores valores relativos, mientras que Z3 fue significativamente menor. Para Zn, Z3 también presentó concentraciones significativamente menores respecto a Z1, Z2 y Z4. Este comportamiento permite identificar a Z3 como una zona con menor acumulación relativa de varios elementos, aunque con cambios importantes durante la campaña de 2025.

Efecto del año

El factor año fue significativo para Co, Cr, Cu, Ni, Pb, V, Zn y Al, mientras que Fe no presentó diferencias significativas entre campañas. Esto indica que la temporalidad y la estacionalidad influyeron en la distribución de la mayoría de los elementos evaluados.

Durante la campaña de lluvias 2025 se observaron los valores más altos de Co, Cr, Ni y Pb. En particular, Cr presentó una media de 242.35 mg kg^{-1} en 2025, superior a las medias observadas en 2023 y 2024. Ni también aumentó durante 2025, alcanzando una media de 90.99 mg kg^{-1}. Pb mostró un comportamiento similar, con una media de 10.59 mg kg^{-1} en 2025, mayor que en las campañas anteriores.

En contraste, V presentó su concentración promedio más alta durante el estiaje 2023, con una media de 96.45 mg kg^{-1}. Este comportamiento sugiere que durante condiciones de menor aporte hídrico puede favorecerse la concentración o permanencia de partículas enriquecidas en V. Zn alcanzó su mayor valor promedio durante la transición 2024, con una media de 81.77 mg kg^{-1}, lo que puede estar relacionado con procesos de resuspensión, transporte y redeposición durante el cambio estacional.

Cu presentó valores más altos durante 2023 y 2024, y disminuyó durante 2025. Este patrón contrasta con el comportamiento de Cr, Ni y Pb, lo que sugiere que Cu responde a controles geoquímicos o sedimentarios distintos.

Interacción zona – año

La interacción zona × año fue significativa para todos los elementos evaluados. Este resultado es especialmente relevante porque demuestra que la distribución de los elementos no puede explicarse únicamente por diferencias espaciales o temporales independientes, sino por la respuesta particular de cada zona durante cada campaña.

Los boxplots de Cr, Ni, V y Zn evidenciaron este comportamiento. Cr y Ni mostraron incrementos marcados en Z3 durante la campaña de lluvias 2025. Este aumento fue acompañado de una dispersión amplia, lo que sugiere heterogeneidad local en la acumulación de estos elementos. La similitud del comportamiento de Cr y Ni puede indicar una asociación geoquímica común, posiblemente vinculada con la fracción mineral del sedimento o con la redistribución de partículas durante la temporada de lluvias.

V presentó un patrón diferente. Sus valores más altos se registraron durante el estiaje 2023, principalmente en Z1 y Z2. Posteriormente, las concentraciones disminuyeron en 2024 y se hicieron más homogéneas entre zonas durante 2025. Este comportamiento puede estar asociado con condiciones de menor dilución, mayor estabilidad sedimentaria o acumulación de partículas durante el estiaje.

Zn mostró sus mayores concentraciones durante la campaña de transición 2024, particularmente en Z1, Z2 y Z4. En 2025 se observó una disminución general, especialmente en Z3. Este patrón sugiere que Zn puede ser más sensible a procesos de transporte, mezcla sedimentaria o cambios fisicoquímicos asociados con la transición estacional.

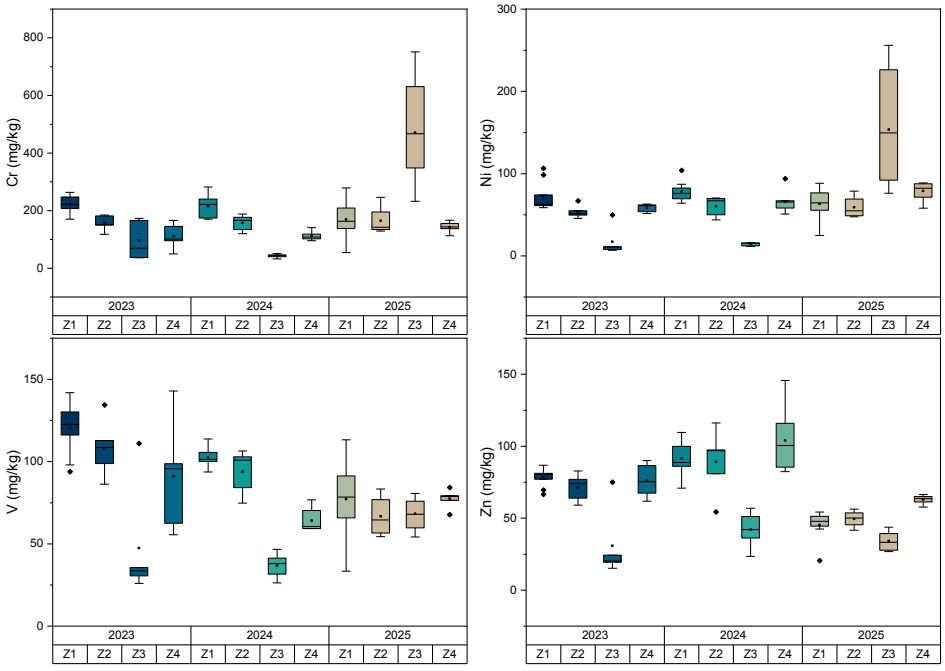


Figura 4 Variación espacio–temporal de Cr, Ni, V y Zn

Interpretación geoquímica

Los resultados indican que la composición elemental de los sedimentos superficiales del Ejido Aquiles Serdán está controlada por una combinación de factores naturales, estacionales y de uso de suelo. La asociación de Cr y Ni, junto con Fe y Al, sugiere una contribución importante de la matriz mineral o litogénica. Esta interpretación es consistente con estudios en sedimentos de manglar donde Cr y Ni suelen relacionarse con materiales geogénicos, aunque sus concentraciones pueden ser moduladas por procesos de transporte y acumulación [3,5,6].

Por otro lado, Cu, Pb y Zn mostraron una mayor variabilidad espacial y temporal. Estos elementos pueden estar asociados con condiciones locales de uso de suelo, aportes superficiales, materia orgánica o cambios en la dinámica sedimentaria. La mayor concentración de Zn durante la transición 2024 puede reflejar procesos de redistribución sedimentaria, mientras que los mayores valores de Pb en 2025 podrían estar relacionados con movilización y redeposición de partículas durante la temporada de lluvias.

La zona de reserva presentó menores concentraciones de varios elementos en el promedio general; sin embargo, el incremento de Cr y Ni en Z3 durante 2025 evidencia que incluso zonas con menor intervención directa pueden presentar cambios importantes cuando las condiciones hidrológicas y sedimentarias favorecen el transporte o acumulación de material particulado. Esto resalta la importancia de realizar monitoreos multitemporales y no depender de una sola campaña para caracterizar la calidad geoquímica de los sedimentos.

Los resultados obtenidos constituyen una línea base geoquímica relevante para el Área Natural Protegida Laguna de Mecoacán. Esta línea base podrá ser utilizada en estudios futuros para evaluar posibles cambios asociados con actividades industriales cercanas, modificaciones en el uso de suelo, eventos climáticos extremos o procesos de restauración del manglar.

CONCLUSIONES

Los sedimentos superficiales del Ejido Aquiles Serdán mostraron una variabilidad geoquímica significativa asociada con la zona, el año y la interacción zona × año. Cr, Ni, V y Zn fueron los elementos más relevantes para explicar los cambios espacio–temporales observados. Cr y Ni presentaron incrementos importantes durante la campaña de lluvias 2025, especialmente en la zona de reserva, lo que sugiere procesos de redistribución sedimentaria o acumulación localizada de material mineral. V fue mayor durante el estiaje 2023, principalmente en zonas con manglar reforestado y en regeneración natural, mientras que Zn alcanzó sus valores más altos durante la transición 2024.

La zona reforestada presentó una señal geoquímica enriquecida en Cr, V, Ni y Al, posiblemente asociada con la retención de sedimentos finos y la acumulación de material mineral. La zona agrícola mostró mayores concentraciones de Co, Pb, Zn y Fe, lo que sugiere una influencia local del uso de suelo sobre la composición elemental del sedimento. En contraste, la zona de reserva presentó menores concentraciones relativas de varios elementos, aunque mostró incrementos puntuales de Cr y Ni en 2025.

En conjunto, los resultados indican que la distribución de EPT en el manglar está modulada por la estacionalidad, la dinámica sedimentaria y las diferencias de uso de suelo. El enfoque multitemporal permitió identificar patrones que no serían evidentes con una sola campaña de muestreo. Por ello, este estudio establece una línea base geoquímica útil para el monitoreo ambiental, la evaluación futura del riesgo ecológico y la toma de decisiones orientadas a la conservación del Área Natural Protegida Laguna de Mecoacán.

BIBLIOGRAFÍA

1. D. M. Alongi, “Impact of global change on nutrient dynamics in mangrove forests”, *Forests*, Vol. 9, 10, 2018, 596.
2. Z. W. Zhang, X. R. Xu, Y. X. Sun, S. Yu, Y. S. Chen, and J. X. Peng, “Heavy metal and organic contaminants in mangrove ecosystems of China: a review”, *Environmental Science and Pollution Research*, Vol. 21, 20, 2014, pp. 11938–11950. DOI: 10.1007/s11356-014-3100-8.
3. X. Zhou, Y. P. Wang, and Z. Song, “Heavy metal contamination and ecological risk assessments in urban mangrove sediments in Zhanjiang Bay, South China”, *ACS Omega*, Vol. 7, 24, 2022, pp. 21306–21316. DOI: 10.1021/acsomega.2c02516.
4. J. Liu, Y. Hou, F. Li, R. Yu, B. Zheng, and X. Zhang, “Effects of specific land-use categories on heavy-metal pollution in mangrove sediments—A case study of Bamen Bay Reserve in Hainan, China”, *Sustainability*, Vol. 17, 24, 2025, 11246. DOI: 10.3390/su172411246.
5. Z. W. Zhang, X. R. Xu, Y. X. Sun, S. Yu, Y. S. Chen, and J. X. Peng, “Heavy metal and organic contaminants in mangrove ecosystems of China: a review”, *Environmental Science and Pollution Research*, Vol. 21, 20, 2014, pp. 11938–11950. DOI: 10.1007/s11356-014-3100-8.
6. H. Davoodi, M. Gharibreza, H. Negarestan, M. S. Mortazavi, and R. Lak, “Ecological risk assessment of the Assaluyeh and Bassatin estuaries (northern Persian Gulf) using sediment

quality indices", *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, Vol. 192, 2017, pp. 17–28. DOI: 10.1016/j.ecss.2017.05.003.
7. G. Müller, "Index of geoaccumulation in sediments of the Rhine River", *Geojournal*, Vol. 2, 1969, pp. 108–118.
8. L. Håkanson, "An ecological risk index for aquatic pollution control: A sedimentological approach", *Water Research*, Vol. 14, 8, 1980, pp. 975–1001.
9. D. L. Tomlinson, J. G. Wilson, C. R. Harris, and D. W. Jeffrey, "Problems in the assessment of heavy-metal levels in estuaries and the formation of a pollution index", *Helgoländer Meeresuntersuchungen*, Vol. 33, 1980, pp. 566–575.
10. A. Pejman, G. N. Bidhendi, M. Ardestani, M. Saeedi, and A. Baghvand, "A new index for assessing heavy metals contamination in sediments: A case study", *Ecological Indicators*, Vol. 58, 2015, pp. 365–373. DOI: 10.1016/j.ecolind.2015.06.012.

COAGULANTE NATURAL A BASE DE *Moringa Oleifera* PARA LA DEGRADACIÓN DEL COLORANTE RO84

Alexis Y Zurita-Suarez[2], Neali Valencia-Espinoza[1], Fabricio G Mendez-Landin[2], Shaden G. Gazcon-Rocha[3], Alejandro Vega-Rios[4], Locksley F. Castañeda[5] y Oscar M. Rodriguez-Narvaez[1]

[1]Centro de Innovación Aplicada en Tecnologías Competitivas (CIATEC), [2]Instituto Politécnico Nacional UPIIG, [3]Instituto Tecnológico Superior de Purísima del Rincón, [4]Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), [5]CONHACYT - Universidad de Guanajuato.
orodriguez@ciatec.mx

RESUMEN

El tratamiento de aguas residuales contaminadas se ha basado en el uso de tecnologías convencionales como la coagulación química y filtración. Sin embargo, estos presentan diversas limitaciones, entre ellas la generación de grandes volúmenes de lodos, costos elevados, y posibles efectos adversos sobre la salud y el ambiente. Ante este panorama, surge el interés por alternativas sostenibles, como los coagulantes naturales de origen vegetal, los cuales se basan en el uso de extractos naturales que sustituyan a los coagulantes químicos convencionales. En este contexto, el presente estudio evaluó el uso de extractos naturales de Moringa oleifera, obtenidos a partir de semillas y hojas, para la remoción del colorante sintético RO84. Los extractos se prepararon mediante diferentes métodos: infusión, salting-out y una combinación de los anteriores, salting-out-infusión. Posteriormente, los extractos fueron caracterizados utilizando pruebas bioquímicas específicas, incluyendo los métodos de DNS para la cuantificación de azúcares reductores, Bradford para la determinación de proteínas, Folin–Ciocalteu para el contenido de polifenoles totales y la evaluación de flavonoides totales, con el fin de identificar y analizar los compuestos activos responsables del proceso de coagulación. Finalmente, se realizaron pruebas de emoción de colorante utilizando el proceso de pruebas en jarras; esto con el objetivo de evaluar la capacidad de remoción de los diversos extractos. Durante los ensayos se analizaron parámetros clave como la velocidad de sedimentación, la absorbancia y el porcentaje de remoción del colorante. Los resultados mostraron que los extractos obtenidos a partir de hojas no presentaron actividad coagulante significativa. En contraste, los extractos de semillas mostraron una reducción de la remoción de color, siendo el más eficiente el preparado mediante el método de salting-out-infusion (SIS), que alcanzó un porcentaje de remoción del 92.12%; de ahí, el extracto con mejor remoción fue el generado con el método de salting-out (SS), al lograr una remoción del 77.58%. En los extractos de Moringa oleifera se encontraron diferencias marcadas entre hoja y semilla: las hojas mostraron concentraciones mucho más altas de flavonoides (1.6–185 mg L^{-1}) y polifenoles (9.168–115.84 mg L^{-1}), mientras que las semillas destacaron por su mayor aporte de azúcares (hasta 296 mg L^{-1}) y proteínas (0.14–0.26 mg L^{-1}). Dentro de las semillas, el extracto SIS fue el más relevante porque presentó las concentraciones más bajas de todas las biomoléculas: 1.8 mg L^{-1} de flavonoides, 0.15 mg L^{-1} de proteínas, 34.4 mg L^{-1} de azúcares y 9.1 mg L^{-1} de polifenoles, evidenciando que no todas las fracciones de semilla tienen el mismo potencial para el tratamiento de agua. A partir de ello, se determinó que los extractos de semillas de Moringa oleifera, especialmente bajo el método SIS, son eficientes para la remoción del colorante RO84.

INTRODUCCIÓN

La creciente contaminación de los cuerpos de agua por efluentes industriales que contienen colorantes sintéticos ha impulsado la búsqueda de tecnologías más sostenibles para el tratamiento de aguas residuales (Solayman et al., 2023). En este contexto, los coagulantes naturales han cobrado relevancia debido a su origen orgánico, biodegradabilidad y menor impacto ambiental en comparación con los coagulantes químicos convencionales (Guzmán et al., 2013). Entre ellos, *Moringa oleifera* ha destacado por contener biomoléculas activas, principalmente proteínas, polisacáridos y compuestos fenólicos, capaces de promover procesos de coagulación y floculación.

Sin embargo, la eficiencia de estos extractos puede variar significativamente en función del método de extracción empleado y de la composición de biomoléculas presentes (Saucedo et al., 2018). Considerando lo anterior, el presente estudio se enfocó en la obtención y caracterización de extractos de semillas y hojas de *Moringa oleifera*, así como en la evaluación de su capacidad para la remoción del colorante Reactive Orange 84 (RO84), con el fin de identificar las fracciones con mayor potencial para aplicaciones en el tratamiento sustentable de aguas residuales.

TEORÍA

Coagulación en el tratamiento de aguas residuales

La coagulación es uno de los procesos más utilizados para el tratamiento de aguas residuales, ya que permite la remoción de partículas suspendidas, materia orgánica, turbidez y diversos contaminantes mediante la desestabilización de coloides presentes en el agua (Safferman 2010). Tradicionalmente, este proceso se ha llevado a cabo mediante el uso de coagulantes químicos como el sulfato de aluminio y el cloruro férrico (Halder et al., 2021). Sin embargo, su aplicación puede generar grandes cantidades de lodos, incrementar los costos operativos y ocasionar efectos negativos sobre la salud humana y el medio ambiente. Debido a ello, en los últimos años ha surgido un creciente interés por el desarrollo de alternativas más sostenibles basadas en coagulantes naturales de origen vegetal (Bahrodin et al., 2021), los cuales se consideran biodegradables y renovables, porque generan menores cantidades de lodos y presentan una menor toxicidad en comparación con los coagulantes convencionales (Bahrodin et al., 2021).

Coagulantes Naturales de Origen Vegetal

Los coagulantes de extractos naturales son sustancias obtenidas a partir de materiales biológicos que contienen compuestos capaces de promover la agregación y sedimentación de partículas suspendidas. Entre las principales fuentes de estos coagulantes se encuentran semillas, hojas, raíces y frutos de diversas especies vegetales, los cuales son conocidos por presentar altas concentraciones de biomoléculas que ayudan en la coagulación de contaminantes. Estos materiales biológicos se someten a una técnica de extracción (e.g., infusión, maceración, soxhlet y salting-out), donde se obtienen los compuestos bioactivos que ayudan en la neutralización de cargas y la formación de puentes entre partículas del contaminante y las biomoléculas (e.g., proteínas, carbohidratos, polifenoles, aminoácidos), para así remover contaminantes sin generar grandes cantidades de lodos.

Moringa oleifera

Entre las especies vegetales utilizadas como coagulantes naturales, *Moringa oleifera* ha recibido especial atención debido a su elevada capacidad para remover turbidez, sólidos suspendidos y diversos contaminantes presentes en aguas residuales. Las semillas de esta planta contienen biomoléculas solubles en agua con pesos moleculares bajos, las cuales actúan como agentes coagulantes favoreciendo su agregación y posterior sedimentación (Ghebremichael et al., 2005). Diversos estudios han demostrado que la composición química de los extractos de *Moringa oleifera* depende tanto de la parte de la planta utilizada como del método de extracción empleado (Leone 2015). Las semillas presentan mayores concentraciones de proteínas y carbohidratos, mientras que las hojas contienen cantidades superiores de polifenoles y flavonoides. Estas diferencias pueden influir significativamente en la eficiencia de remoción de contaminantes, por lo que resulta fundamental caracterizar las biomoléculas presentes en cada extracto para comprender su papel dentro del proceso de coagulación (Ghebremichael et al., 2005).

Remoción de Colorantes Mediante Coagulación

Los colorantes sintéticos empleados en las industrias textil, alimentaria y química representan una importante fuente de contaminación debido a su estabilidad química y resistencia a la degradación biológica. Entre ellos, el colorante RO84 se caracteriza por su persistencia en medios acuáticos, lo que dificulta su eliminación mediante tratamientos convencionales. La aplicación de extractos de *Moringa oleifera* constituye una alternativa prometedora para la remoción de este tipo de contaminantes, ya que las biomoléculas presentes en los extractos pueden interactuar con las

moléculas del colorante mediante mecanismos de neutralización de cargas y formación de flóculos. Como resultado, se favorece la sedimentación de los complejos formados y se incrementa la eficiencia del tratamiento del agua (Beltrán et al., 2008).

PARTE EXPERIMENTAL

Obtención de extractos de *Moringa oleifera*

Se emplearon hojas y semillas de *Moringa oleifera* para la obtención de extractos naturales mediante tres métodos de extracción: infusión, salting-out y salting-out–infusión. Para la extracción por salting-out de hoja o semilla de *Moringa oleifera* a concentraciones de 100 g L^{-1} y 50 g L^{-1} de NaCl, la mezcla se sometió a agitación constante a 100 rpm durante 1 h a temperatura ambiente y los extractos obtenidos fueron denominados SS para semilla y SH para hoja. La extracción por infusión se realizó utilizando una concentración de 100 g L^{-1} de hoja o semilla de *Moringa oleifera* en agua destilada. La mezcla se mantuvo a 80 °C durante 1 h; los extractos obtenidos se identificaron como IS para semilla e IH para hoja. Para la extracción combinada (salting-out-infusión) se empleó una concentración de 100 g L^{-1} de hoja o semilla de *Moringa oleifera* y 50 g L^{-1} de NaCl. La mezcla se mantuvo a 80 °C durante 1 h. Los extractos obtenidos se denominaron SIS para semilla y SIH para hoja. Finalizada la agitación de los extractos, se llevaron a su filtración mediante un filtro con un tamaño de poro de 100 micras y después por un filtro Whatman n.º 1.

Pruebas de coagulación

Se realizaron pruebas de jarras utilizando soluciones del colorante RO84 (100 mg L^{-1}). Inicialmente, se sometió a una etapa de agitación rápida a 250 rpm durante 5 min, durante la cual se adicionaron 4 mL por cada 100 mL de la solución de colorante. Posteriormente, la velocidad de agitación se redujo a 50 rpm durante 15 min. Finalizada la etapa de mezcla lenta, los lodos se dejaron sedimentar durante 120 min. Después del proceso de sedimentación, se tomaron alícuotas cada 30 min del sobrenadante de cada muestra, lo cual se realizó por triplicado, y se determinó su absorbancia mediante espectrofotometría UV-Vis a 492 nm.

Caracterización mediante FT-IR ATR

Los lodos obtenidos después de las pruebas de coagulación fueron recuperados y secados para su posterior análisis. La caracterización se realizó mediante espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier con reflectancia total atenuada (FT-IR ATR). Los espectros se registraron en un intervalo de 4000 a 400 cm^{-1} con el objetivo de identificar los principales grupos funcionales presentes en las muestras. Posteriormente, las señales obtenidas fueron analizadas y asignadas a los grupos funcionales correspondientes de acuerdo con los rangos característicos reportados en la literatura.

Determinación de la concentración de polifenoles totales

Para la cuantificación de polifenoles totales, las muestras fueron sometidas a un pretratamiento mediante la adición de metanol al 70 % a las muestras liofilizadas contenidas en tubos Eppendorf. Posteriormente, las mezclas se mantuvieron en agitación durante 24 h en ausencia de luz para favorecer la extracción de los compuestos fenólicos. Finalizado este periodo, las muestras se centrifugaron a 10,000 rpm durante 15 min, recuperándose el sobrenadante para su análisis. A continuación, se preparó la mezcla de reacción agregando 237 µL de agua destilada estéril, 45 µL de Na_2CO_3 al 15 % y 15 µL del reactivo Folin-Ciocalteu al 10 %, empleando 3 µL del extracto obtenido. La mezcla se incubó durante 5 min a temperatura ambiente protegida de la luz directa. Finalmente, la absorbancia se determinó a una longitud de onda de 760 nm. Para la cuantificación de los polifenoles se elaboró una curva de calibración utilizando ácido gálico como estándar, a partir de una solución madre con una concentración de 2 mg mL^{-1}.

Determinación de la concentración de proteínas totales

Para cuantificar el contenido de proteínas totales, las muestras liofilizadas se resuspendieron en agua destilada estéril mediante agitación en vórtex. Posteriormente, se colocaron 10 µL de cada muestra en los respectivos pocillos y se añadieron 200 µL del reactivo Bradford, previamente preparado en una proporción 1:4. Las mezclas se incubaron durante 5 min a temperatura ambiente

y protegidas de la luz directa. Finalmente, la absorbancia se registró a 595 nm. La cuantificación de proteínas se realizó mediante una curva de calibración elaborada a partir de una solución estándar de albúmina sérica bovina (BSA) con una concentración de 2 mg mL^{-1}.

Determinación de la concentración de flavonoides totales

Para la determinación de flavonoides totales, las muestras fueron sometidas a un pretratamiento que consistió en la liofilización y la posterior extracción con metanol al 70 %, empleando 1 mL de solvente por cada 50 mg de muestra. Las mezclas se mantuvieron en agitación durante 24 h a temperatura ambiente y en condiciones de oscuridad. Posteriormente, se centrifugaron a 10,000 rpm durante 15 min para recuperar el sobrenadante, repitiendo el procedimiento hasta obtener una solución libre de partículas en suspensión. Una vez obtenidos los extractos, se colocaron 12.5 µL de muestra en una microplaca y se añadieron 7.5 µL de $NaNO_2$ al 5 %. Después de una incubación de 5 min en oscuridad a temperatura ambiente, se agregaron 15 µL de $AlCl_3 \cdot 6H_2O$ al 10 % y se incubó nuevamente durante 5 min bajo las mismas condiciones. Finalmente, se añadieron 50 µL de NaOH 1 M y 165 µL de agua destilada estéril. La absorbancia de las muestras se determinó a 510 nm. Para la cuantificación se utilizó una curva de calibración preparada con una solución estándar de quercetina a una concentración de 0.5 mg mL^{-1}.

Determinación de la concentración de azúcares reductores

La concentración de azúcares reductores se determinó mediante el método del ácido 3,5-dinitrosalicílico (DNS). Para ello, se mezclaron 0.125 mL de muestra con 0.125 mL de reactivo DNS y 1.25 mL de agua destilada. Posteriormente, la mezcla se incubó durante 5 min a 90 °C. Finalizado el tratamiento térmico, las muestras se enfriaron en un baño de hielo durante 5 min. Posteriormente, se transfirieron a una microplaca y se registró la absorbancia a una longitud de onda de 540 nm. Para la cuantificación se utilizó una curva de calibración preparada con una solución estándar de glucosa a una concentración de 0.5 mg mL^{-1}.

RESULTADOS

Remoción del colorante RO84

Como se observa en la Figura 1a, el extracto SS presentó un incremento gradual en el porcentaje de remoción conforme aumentó el tiempo de sedimentación, alcanzando una eficiencia cercana al 77.6 % después de 120 minutos. Por otro lado, el extracto SIS mostró un comportamiento más eficiente, logrando porcentajes de remoción superiores al 75% durante los primeros 30 minutos y alcanzando una remoción final de 92.12% a los 120 minutos (Figura 1b). Estos resultados sugieren que el método de extracción influye significativamente en la capacidad coagulante del extracto. Aunque SIS presentó menores concentraciones de biomoléculas cuantificadas en comparación con otros extractos, obtuvo la mayor eficiencia de remoción, lo que indica que la actividad coagulante depende no solamente de la concentración total de biomoléculas, sino también de la naturaleza y disponibilidad de los compuestos responsables del proceso de coagulación. Mientras que mediante los extractos de hoja (IH, SH y SIH) y el extracto IS, las remociones del colorante fueron menores al 1%; esto se puede deber a la composición química de los extractos y la relación que existe entre estos.

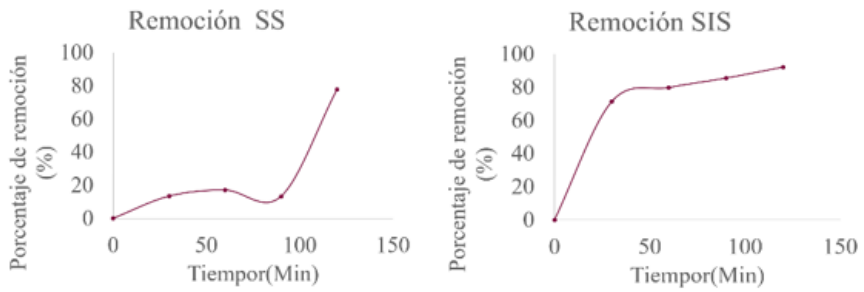


Figura 1. Remoción de RO84 con extracto SS y SIS

Cuantificación de biomoléculas

Se realizó la caracterización bioquímica de los extractos obtenidos a partir de hojas y semillas de *Moringa oleifera* mediante la cuantificación de flavonoides, proteínas, azúcares y polifenoles (Tabla 1). Los resultados mostraron diferencias importantes entre ambas fuentes vegetales. En general, los extractos de hoja presentaron mayores concentraciones de flavonoides y polifenoles, alcanzando valores de hasta 185.66 mg L^{-1} y 115.85 mg L^{-1}, respectivamente. Por otra parte, los extractos obtenidos de semillas presentaron mayores concentraciones de azúcares y proteínas. El extracto IS registró la mayor concentración de azúcares reductores (296.65 mg L^{-1}), mientras que las proteínas de los extractos de semilla oscilaron entre 0.15 y 0.26 mg L^{-1}. Diversos estudios han señalado que las proteínas presentes en las semillas de *Moringa oleifera* actúan como agentes coagulantes naturales debido a su carácter catiónico, favoreciendo la neutralización de cargas y la formación de flóculos durante el tratamiento de aguas (Ghebremichael 2005).

Tabla 1. Composición bioquímica de extractos de *Moringa oleífera*

Fuente	Muestra	Flavonoides (mg L^{-1})	Proteínas (mg L^{-1})	Azúcares (mg L^{-1})	Polifenoles (mg L^{-1})
Semilla	IS	8.173	0.261	296.65	25.088
	SS	1.614	0.192	79.033	34.418
	SIS	1.8	0.150	34.416	9.168
Hoja	IH	64.136	0.187	49.498	115.849
	SH	185.663	0.142	91.215	57.123
	SIH	92.073	0.141	121.336	75.35

Caracterización mediante FT-IR

Con el objetivo de identificar los grupos funcionales involucrados en el proceso de coagulación, se realizó la caracterización de los lodos obtenidos mediante espectroscopía FT-IR ATR (Figura 2). Los espectros correspondientes a los extractos SS y SIS mostraron señales características en la región de 3400–3200 cm^{-1}, asociadas a vibraciones de estiramiento de grupos O–H y N–H, las cuales corresponden principalmente a compuestos fenólicos, alcoholes y proteínas presentes en los extractos. Se identificaron señales entre 2900 y 2800 cm^{-1} relacionadas con grupos C–H alifáticos; bandas entre 1700 y 1600 cm^{-1} asociadas a grupos carbonilo (C=O); señales entre 1200 y 900 cm^{-1} correspondientes a enlaces C–O presentes en polisacáridos, alcoholes y éteres; y bandas entre 700 y 400 cm^{-1} atribuidas a grupos SOH^{-3}. La presencia de estos grupos funcionales confirma la participación de biomoléculas derivadas de *Moringa oleifera* durante la formación de los flóculos y la remoción del colorante. Las similitudes observadas entre los espectros FT-IR de SS y SIS indican que ambos extractos contienen componentes con grupos funcionales semejantes; sin embargo, la mayor eficiencia observada para SIS sugiere que las diferencias en la concentración relativa y

disponibilidad de dichas biomoléculas podrían favorecer una interacción más eficiente con las moléculas del colorante RO84.

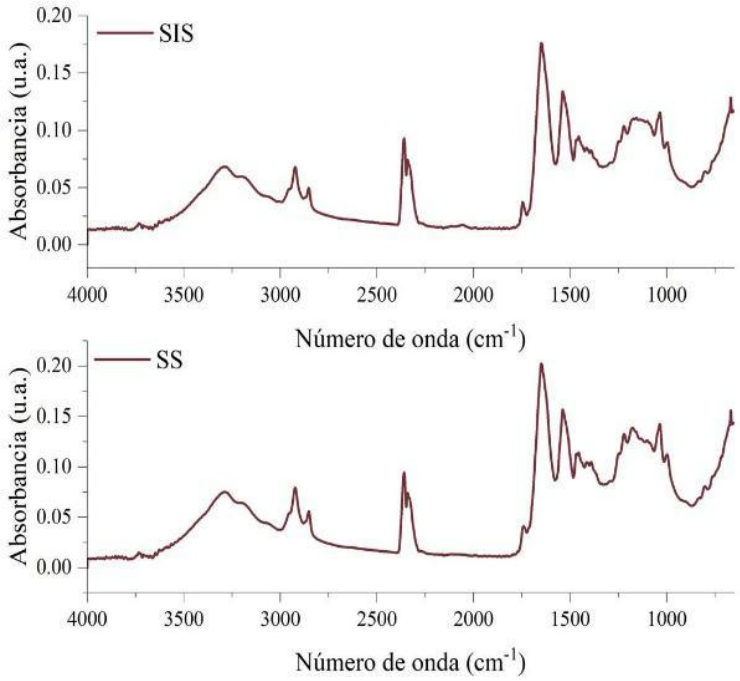


Fig 2. Espectroscopía FT-IR ATR de los lodos mediante extracto SS e SIS

CONCLUSIONES

Los extractos obtenidos de hojas y semillas de *Moringa oleifera* presentaron diferencias significativas en su composición bioquímica. Las hojas mostraron mayores concentraciones de flavonoides y polifenoles, mientras que las semillas destacaron por su contenido de azúcares reductores y proteínas. Estas diferencias evidencian que la composición de las biomoléculas depende tanto de la fuente vegetal como del método de extracción empleado. Los ensayos de coagulación realizados para la remoción del colorante RO84 demostraron que los extractos de semillas poseen una mayor capacidad coagulante en comparación con los extractos de hoja. Entre ellos, el extracto obtenido mediante el método salting-out-infusión (SIS) presentó el mejor desempeño, alcanzando una eficiencia de remoción del 92.12 %, seguido del extracto salting-out (SS) con 77.58 %. Por otra parte, el análisis FT-IR confirmó la presencia de grupos funcionales asociados a proteínas, polifenoles y polisacáridos, biomoléculas que participan en el proceso de coagulación. En conjunto, los resultados demuestran que los extractos de semillas de *Moringa oleifera*, especialmente los obtenidos mediante el método SIS, representan una alternativa sustentable, eficiente y de bajo costo para el tratamiento de aguas contaminadas con colorantes sintéticos.

BIBLIOGRAFÍA

1. Bahrodin, M. B., Zaidi, N. S., Hussein, N., Sillanpää, M., Prasetyo, D. D., & Syafiuddin, A. (2021). Recent advances on coagulation-based treatment of wastewater: Transition from chemical to natural coagulant. Current Pollution Reports, 7(3), 379-391.
2. Beltrán-Heredia, J., & Sánchez Martín, J. (2008). Azo dye removal by Moringa oleifera seed extract coagulation. Coloration Technology, 124(5), 310-317.
3. Ghebremichael, K. A., Gunaratna, K. R., Henriksson, H., Brumer, H., & Dalhammar, G. (2005). A simple purification and activity assay of the coagulant protein from Moringa oleifera seed. Water research, 39(11), 2338-2344.

4. Guzmán, L., Villabona, Á., Tejada, C., & García, R. (2013). Reducción de la turbidez del agua usando coagulantes naturales: una revisión. Revista UDCA Actualidad & Divulgación Científica, 16(1), 253-262.
5. Halder, A. (2021). Bio-coagulants, a substitute of chemical coagulants. Journal of Advanced Scientific Research, 12(04 Suppl 1), 58-67.
6. Leone, A., Spada, A., Battezzati, A., Schiraldi, A., Aristil, J., & Bertoli, S. (2015). Moringa oleifera Seeds and Oil: Characteristics and Uses for Human Health. International Journal of Molecular Sciences, 17(12), 2141. https://doi.org/10.3390/ijms17122141
7. Safferman, S. (2010). Fundamentals of Coagulation and Flocculation. Water World Continuing Education, 1-7.
8. Saucedo-Pompa, S., Torres-Castillo, J. A., Castro-López, C., Rojas, R., Sánchez-Alejo, E. J., Ngangyo-Heya, M., & Martínez-Ávila, G. C. G. (2018). Moringa plants: Bioactive compounds and promising applications in food products. Food Research International, 111, 438-450.
9. Solayman, H. M., Hossen, M. A., Abd Aziz, A., Yahya, N. Y., Leong, K. H., Sim, L. C., ... & Zoh, K. D. (2023). Performance evaluation of dye wastewater treatment technologies: A review. Journal of Environmental Chemical Engineering, 11(3), 109610.

ESTUDIO DEL EFECTO DE NANOPARTÍCULAS BIOGÉNICAS SOBRE LAS PROPIEDADES ANTIOXIDANTES Y MECÁNICAS DE UN BIOCOMPUESTO A BASE DE PP/MUÉRDAGO

Luisa Fernanda Medina Ganem, Domancar Orona Tamayo, Oscar Manuel Rodríguez Narváez y Flora Itzel Beltrán Ramírez.

Centro de Innovación Aplicada en Tecnologías Competitivas (CIATEC).
lganem.estudiantepicyt@ciatec.mx

RESUMEN

Los biocompuestos son materiales que incorporan fibra natural en matrices poliméricas, con la finalidad de reducir el uso de polímeros sintéticos. Aunado a esto, su baja densidad y costo los hace atractivos en sectores como el automotriz. No obstante, la incompatibilidad entre fibra y polímero afecta sus propiedades, limitando su aplicabilidad. Para abordar esta problemática, se han utilizado diversas técnicas, entre las cuales han resaltado la incorporación de nanopartículas (NPs), ya que se ha reportado que mejoran propiedades antioxidantes, mecánicas y térmicas de los materiales. Sin embargo, los procesos de síntesis química son poco sostenibles debido al uso de reactivos tóxicos y altos gastos energéticos. El presente trabajo propone el uso de NPs biogénicas para la elaboración de compuestos a base de polipropileno (PP) y muérdago, con la finalidad de mejorar sus propiedades antioxidantes y mecánicas, limitando la cantidad de polímero sintético requerido. Para ello, las NPs utilizadas se sintetizaron biogénicamente con extracto de Moringa oleífera, usando una metodología previamente reportada (Medina-Ganem et al., 2026). Las fibras de muérdago fueron secadas, pulverizadas y tamizadas a un tamaño de partícula < 125 mm. Se prepararon distintas formulaciones de material variando el porcentaje de fibra (i.e. 30-40%) y de NPs (i.e. 0.25-0.5% considerando 20% de hierro), así como controles con PP-g-MA e Irganox. Las formulaciones se mezclaron en extrusor de doble husillo y el material resultante se trituró e inyectó para realizar pruebas mecánicas (i.e. ASTM D638) y antioxidantes (i.e. ABTS y DPPH). Todos los materiales presentaron una alta capacidad de inhibición del radical DPPH (entre 86 a 91%). Los valores más altos corresponden a las formulaciones con 0.5% de nanopartículas biogénicas y compatibilizante (i.e 88.71 a 91.56 %). En el ensayo de ABTS se observó que las muestras sin nanopartículas presentan ~92% de inhibición máxima, mientras que aquellas con 0.5% de nanopartículas presentaron > 93.5%. Por otra parte, también se observó que el IC50 de los materiales disminuye >1 mg/mL con respecto a los controles, al usar 30% de fibra y un mínimo de 0.25% de nanopartículas, demostrando que estas permiten mejorar las propiedades antioxidantes del biocompuesto. Las pruebas mecánicas mostraron que las formulaciones con 40% de fibra y 0.5% nanopartículas presentaron una disminución en resistencia a la tensión y porcentaje de deformación de 11.64 MPa y 11.581 respectivamente con respecto al PP virgen, mientras que las muestras con 30% de fibra y nanopartículas sólo se redujo ~9 MPa y mantiene valores similares al control en porcentaje de deformación (i.e. ~35% de deformación). Con base a ello, se concluyó que el biocompuesto con 30% de fibra y 0.25% de nanopartículas era el óptimo para incrementar las propiedades antioxidantes sin afectar las propiedades mecánicas del compuesto.

INTRODUCCIÓN

Cada año se utilizan toneladas de polímeros sintéticos en diversas industrias entre las cuales destaca la automotriz. Actualmente, aproximadamente el 50% del volumen total de un carro está compuesto por polímeros, siendo el PP el más utilizado por su contribución a la eficiencia de los vehículos (Maddah, 2016). Sin embargo, debido a las condiciones ambientales a las que se someten, estos polímeros son considerados de baja calidad y no pueden ser reciclados (Giacomin et al., 2019; Sharma et al., 2016).

El impacto ambiental generado por los polímeros ha impulsado cambios en tendencias, favoreciendo el uso de materiales más sostenibles. Entre estos, destacan los biocompuestos, que se elaboran usando fibras naturales (Gallos et al., 2017); principalmente fibras lignocelulósicas. Dichas fibras

tienen múltiples ventajas; son biodegradables, de baja densidad, económicas y se encuentran ampliamente disponibles **(Ngo & Ho, 2016)**. Adicionalmente permiten hacer uso de residuos como la poda de muérdago (*Psittacanthus calyculatus*), un hemiparásito que ataca especies de arboládo endémicas en la zona central de México (Aguilar-Venegas et al., 2023).

No obstante, la baja compatibilidad entre fibra y polímero afecta a las propiedades del material y limita su aplicabilidad (Ibrahim et al., 2016). Para mejorar dichas propiedades se han propuesto diversas técnicas, entre las cuales destaca el uso de NPs con agentes de acoplamiento (Guo et al., 2021; Ismaeilimoghadam et al., 2016). Sin embargo, la síntesis química de NPs es poco sostenible debido al uso de reactivos tóxicos y altos consumos energéticos (Bandala et al., 2020).

Este trabajo propone desarrollar un proceso que integre NPs de óxido de hierro biogénicamente sintetizadas a biocompuestos de PP y muérdago. La hipótesis es que el recubrimiento biológico de las NPs aumentará las propiedades antioxidantes del material y que, con el uso de un agente de acoplamiento, se favorecerá la interacción de los elementos del biocompuesto, por lo que las propiedades mecánicas no se verán negativamente afectadas.

El objetivo general de este trabajo es evaluar el efecto de NPs biogénicas de óxido de hierro sobre las propiedades antioxidantes y mecánicas de biocompuestos a base de PP y muérdago para su aplicación en autopartes internas. Se tiene como objetivos específicos sintetizar NPs de óxido hierro y caracterizarlas, elaborar los biocompuestos a base de NPs-PP-muérdago y evaluar sus propiedades antioxidantes y mecánicas.

PARTE EXPERIMENTAL

Síntesis de nanopartículas

Para síntesis biogénica se siguió la metodología reportada por Medina-Ganem et al. (2026). Primero, se elaboró un extracto de *Moringa oleífera*. Para ello se agregó una concentración de 0.1 g mL^{-1} de hoja seca y pulverizada en una solución salina al 5% y se dejó en agitación durante 1 h a 80°C. El extracto se filtró a vacío a través de un filtro Whatman No.1 y se almacenó a 4°C hasta su uso.

Posteriormente se preparó una solución precursora de $FeSO_4*7H_2O$ 0.1M, se mezcló con el extracto a una relación 2:8 y se dejó en agitación 24 h a temperatura ambiente. Finalmente, material se secó en un horno a 80°C por 24 h.

Elaboración de Biocompuesto

Se recolectaron plantas de muérdago *P. calyculatus* de mezquites infectados en la zona sur del CINVESTAV en Irapuato, Gto. y se dejaron al sol durante 1 semana para posteriormente ser triturados y pulverizadas. Finalmente, el material se tamizó hasta obtener materiales de un diámetro ≤125 μm.

Se prepararon las formulaciones usando los porcentajes enlistados en la Tabla 1 con porcentajes de fibra entre 30% y 40%, NPs entre 0.25% y 0.5%, agente de acoplamiento (PP-g-MAH) entre 0 y 5% y 1% de antioxidante comercial (Irganox 1076) para las muestras control.

Tabla 1. Formulaciones de biocompuesto.

Formulación	PP (%)	Fibra (%)	NPs (%)	PP-g-MAH (%)	Antioxidante (%)
M40N0.5	59.50	40.00	0.50	0.00	0.00
M40N0.5C	54.50	40.00	0.50	5.00	0.00
M30N0.5	69.50	30.00	0.50	0.00	0.00
M30N0.5C	64.50	30.00	0.50	5.00	0.00
M30N0.25	69.75	30.00	0.25	0.00	0.00
M30N0.25C	64.75	30.00	0.25	5.00	0.00
M30	70.00	30.00	0.00	0.00	0.00
M30C	65.00	30.00	0.00	5.00	0.00
M30A1	69.00	30.00	0.00	0.00	1.00
M30CA1	64.00	30.00	0.00	5.00	1.00

*para el porcentaje de NPs se consideró 20% de hierro.

Los componentes sólidos de cada formulación se mezclaron de manera manual y se colocaron en un dosificador que operaba a 16 rpm para adicional los materiales a un extrusor de doble husillo. Las muestras se mezclaron en el extrusor, a 60 rpm y siguiendo la rampa de temperatura desglosada en la Tabla 2.

Tabla 2. Distribución de temperaturas en las zonas del extrusor.

Zona	1	2	3	4	5	6	7	8
Temperatura (°C)	175	180	180	180	180	180	185	185

El material obtenido del extrusor fue molido en un molino de cuchillas, se alimentó en la inyectora y se procesó usando las temperaturas descritas en la Tabla 3, un tamaño de disparo de 63 mm, una presión de 80 bar y un tiempo de enfriamiento de 22 segundos, con la finalidad de obtener las probetas requeridas para el ensayo de tracción.

Tabla 3. Distribución de temperaturas en las zonas de la inyectora.

Zonas	1	2	3	Boquilla
Temperatura (°C)	180	180	185	185

Determinación de propiedades antioxidantes

Para determinar la capacidad antioxidante del biocompuesto y los componentes que lo constituyen primero se determinaron los polifenoles presentes. Para ello se pesaron 70 mg de muestra molida y seca y adicionaron 350 μL de metanol al 70% en tubos eppendorff. Los tubos se dejaron en agitación en ausencia de luz durante 24 h. Posteriormente se centrifugaron y se recuperó el sobrenadante. En una placa de 96 pocillos se agregaron 237 μL de agua destilada, 45 μL de Na_2CO_3 al 15%, 3 μL de muestra con metanol y 15 μL de reactivo de Folin al 10%. La placa se incubó en ausencia de luz por 5 min y se leyó a 760 nm. De igual manera, se llevó a cabo la lectura de la curva de calibración preparada a partir de una solución de ácido gálico de 2 mg mL^{-1}. Una vez que se obtuvo la concentración de polifenoles, se realizaron los métodos de inhibición de radicales DPPH* y $ABTS^{+*}$.

Para la primera prueba se preparó una solución de DPPH a 180 μM disueltos en metanol al 80%. Esta se colocó en la microplaca con diferentes cantidades de la solución con polifenoles previamente preparada para obtener diversas concentraciones de biomoléculas (i.e. entre 1 y 160 μg mL^{-1}). La placa se incubó a 37°C por 30 min en ausencia de luz para posteriormente leer la absorbancia a 517 nm.

Para la segunda prueba se preparó una solución stock de ABTS 7 mM y se mezcló con una solución de persulfato de amonio 2.45 mM a una relación 1:5 v/v. Posteriormente se dejó reposar en ausencia de luz por 16 h a temperatura ambiente. Finalmente se diluyó la solución usando metanol al 100%

hasta obtener una absorbancia de 0.7 ± 0.2 a una longitud de onda de 734 nm. La solución ajustada se colocó con diversas cantidades de la solución de polifenoles para obtener distintas cantidades de los mismos (i.e. entre 0.25 y 160 $\mu g\ mL^{-1}$) y se incubó en ausencia de luz por 6 min a temperatura ambiente. Finalmente, se leyó la absorbancia a 734 nm.
En ambos casos se utilizó agua como blanco y se calculó el porcentaje de inhibición de radicales libres usando la siguiente ecuación:

$$\%_{inhibición} = 100\text{-}100*(Abs_{muestra}/Abs_{control}) \quad [1]$$

Adicionalmente todos los ensayos se realizaron con n = 4 réplicas.

Análisis de Estadística Multivariada
Con la finalidad de determinar los factores principales que influyen en las propiedades de los materiales elaborados, se llevaron a cabo análisis de correlación paramétrica lineal y correlación paramétrica no lineal considerando las composiciones de los materiales (i.e. porcentaje del PP, fibra, nanopartículas y aditivos comerciales) y las propiedades antioxidantes de los materiales (i.e. IC_{50} y porcentaje máximo de inhibición de radicales).

Se empleó la correlación Producto-Momento de Pearson para determinar asociaciones lineales entre variables continuas, bajo el supuesto de la normalidad de los datos, y la correlación de Spearman Rank como alternativa no paramétrica, apta para datos ordinales, distribuciones no normales o datos a típicos. Para ambos análisis se estableció un nivel de significancia del 5% (i.e. valor de $p < 0.05$), y la fuerza de correlaciones se interpretó considerando la escala presentada en la Tabla 4.

Tabla 4. Interpretaciones para coeficientes de correlación. *Modificado de Papageorgiou, 2022.*

Valor positivo	Valor negativo	Interpretación
< 0.2	> -0.2	Correlación muy baja
0.2 a 0.39	-0.2 a -0.39	Correlación baja
0.4 a 0.5	-0.4 a -0.5	Correlación moderada
0.6 a 0.79	-0.6 a -0.79	Correlación alta
> 0.8	< -0.8	Correlación muy alta

Todos los análisis estadísticos se realizaron usando el software Statgraphics 19.

Ensayo de tracción
Para este ensayo se usaron 6 probetas tipo I de cada formulación. Las probetas se midieron en 3 secciones a lo ancho y grueso para determinar los valores promedio y asegurar que se encontraran dentro del rango estipulado en la Norma ASTM D638. Posteriormente, se realizaron las pruebas en una máquina de ensayo universal que se programó con un espacio entre mordazas de 105 mm y una velocidad de desplazamiento de 5 mm/min.

RESULTADOS

Para el presente trabajo se utilizaron nanopartículas de óxido de hierro sintetizadas por métodos biogénicos utilizando extracto de hoja de *Moringa oleifera,* cuya metodología y resultados han sido reportados por (Medina-Ganem et al., 2026).

Brevemente, de acuerdo con las caracterizaciones previas, el material resultante de esta síntesis consiste en una combinación de α-Fe_2O_3 y Fe_3O_4. Las partículas son de forma vesicular, tamaños polidispersos (i.e. 63.77± 21.98 nm), y presentan un recubrimiento biológico. Adicionalmente, los materiales cuentan con estabilidad térmica para soportar las temperaturas de procesamiento del polipropileno (i.e. 180-210°C) y capacidad antioxidante requerida para fungir como aditivos en el biocompuesto (i.e. IC_{50} de 5.97 y 6.27 $\mu g\ mL^{-1}$ y porcentajes de inhibición máxima de 88.85 y 92.7% en los ensayos de decoloración de radicales DPPH* y $ABTS^{+*}$, respectivamente).

Propiedades antioxidantes de Biocompuestos

Los valores promedio de las propiedades antioxidantes de los biocompuestos formulados se presentan en las Figuras 1 y 2. Inicialmente, pueden observar diferencias entre los resultados de ambas pruebas; ABTS generalmente presenta valores menores de IC_{50} y mayores valores de porcentaje máximo de inhibición (%Máx). Esto se suele atribuir a que dicho ensayo usa una molécula de estructura plana que puede reaccionar con una amplia diversidad de compuestos antioxidantes, mientras que la inhibición del radical DPPH* depende de la estructura de la molécula antioxidante (i.e. número de grupos hidroxilo y criterios de Bors) (Platzer et al., 2021).

En cuanto a las formulaciones elaboradas se puede observar que, en el caso de ambas pruebas, los valores de IC_{50} más altos y %Máx más bajo corresponden a compuestos que únicamente contienen fibra natural y resina sintética (i.e. M30 y M30C). La incorporación de 1% de Irganox 1076 (i.e. muestra M30CA1) disminuyó el IC_{50} en un 46.89% y 45.83% para la inhibición de radicales DPPH* y $ABTS^{+*}$ respectivamente, no obstante, se observaron resultados similares en la muestra M30N0.25C (i.e. disminuciones de 50.77% y 70.59% respectivamente) manteniendo el mismo porcentaje de fibra de muérdago e incorporando 0.25% de NPs. Por otra parte. los valores de %Máx en general son similares en todas las formulaciones, sin embargo, las muestras con NPs presentan valores ligeramente mayores (i.e. 87.80 a 91.56% y 93.05 a 94.42% para la inhibición de radicales DPPH* y $ABTS^{+*}$) en comparación a las muestras con Irganox (i.e. 87.56 a 87.98% y 93.76 a 94.34% respectivamente) y las muestras con pura resina sintética y fibra (i.e. 86.86% y ~93.3% respectivamente).

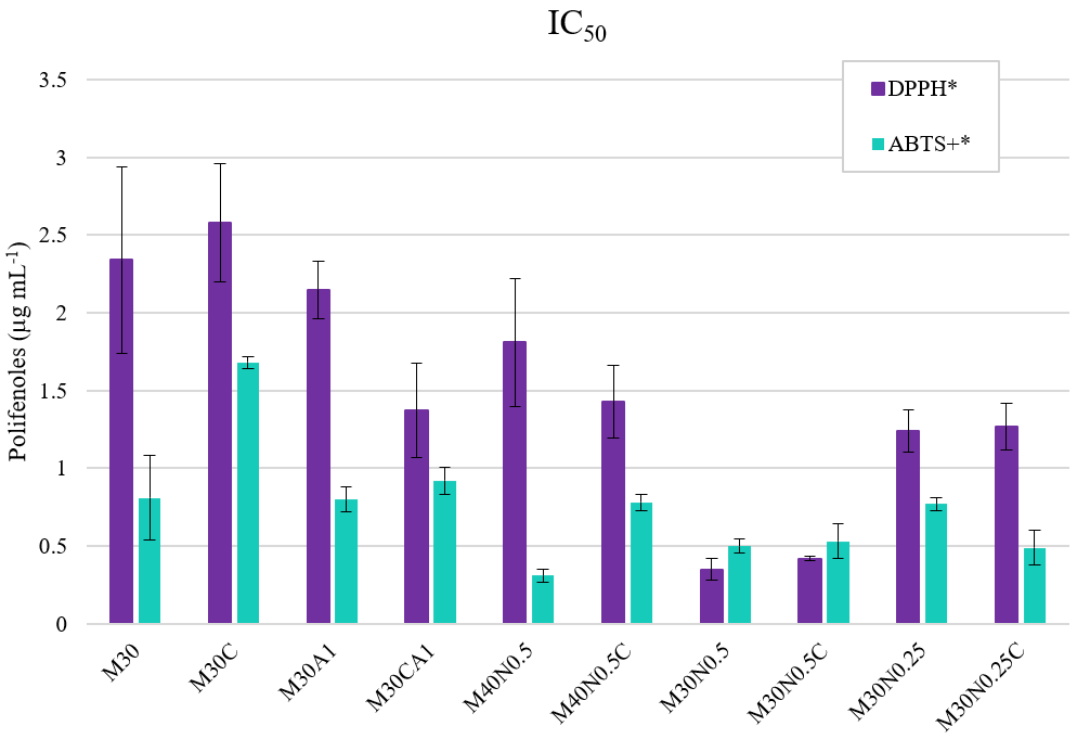


Figura 1. IC_{50} de biocompuestos (n = 4).



Figura 2. Porcentaje máximo de inhibición de biocompuestos (n = 4).

Para visualizar mejor la influencia que tienen ciertos componentes en las propiedades antioxidantes, la figura 3 muestra el análisis de correlación de Pearson de las formulaciones.

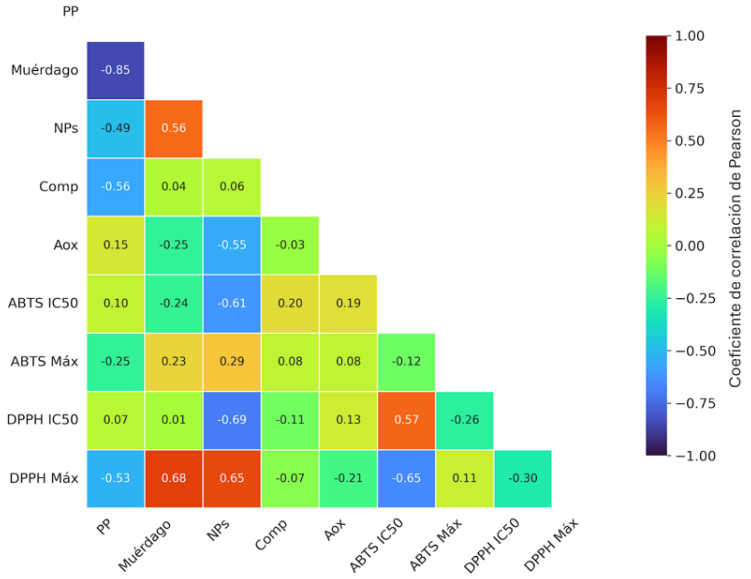


Figura 3. Correlación Spearman Rank de propiedades antioxidantes y componentes de las formulaciones. Valor $p < 0.05$, n = 4.

Los coeficientes mostrados entre los componentes corresponden a como la presencia de cada uno se ve modificada al añadir ciertos aditivos, por ejemplo, la fuerte correlación negativa entre “Muérdago” y “PP” se debe a que, al aumentar el porcentaje de fibra natural en el biocompuesto, se disminuye la cantidad de resina sintética.

No obstante, se puede observar que la concentración de nanopartículas en la formulación (i.e. la variable “NPs”) presenta una correlación lineal negativa alta con las variables “ABTS IC50” y “DPPH IC50” (i.e. < -0.6) lo indica que la incorporación de nanopartículas disminuye el IC_{50} de los

biocompuestos lo cual es indicativo de una mayor capacidad antioxidante. Adicionalmente, la variable “NPs” y “Muérdago” tienen una correlación positiva alta con la variable “DPPH Máx” (i.e. > 0.6), indicando que, a mayor incorporación de nanopartículas y fibra natural en el biocompuesto, aumenta el porcentaje de inhibición máxima del radical DPPH*.

Estos resultados fueron corroborados por el análisis de correlación Spearman Rank, donde se obtuvo que la variable “NPs” tiene correlaciones de -0.6603 y -0.6887 para las variables “ABTS IC50” y “DPPH IC50”, respectivamente, mientras que las variables de “Muérdago” y “NPs” presentaron correlaciones de 0.5357 y 0.7455 con la variable “DPPH Máx”, respectivamente.

En resumen, esto indica que tanto las NPs como el muérdago otorgan propiedades antioxidantes al biocompuesto. Sin embargo, el muérdago únicamente influyó en la mejoría de 1 de las 4 variables medidas (i.e. aumento de %Máx de DPPH*) mientras que las NPs contribuyen en aumento de %Máx de DPPH*, y disminución del IC_{50} de ambos ensayos, sugiriendo que estas son las principales responsables del incremento en propiedades antioxidantes del biocompuesto. Esto coincide con lo reportado por Abdullah et al., donde aumentar incorporación de nanopartículas biogénicas de Fe_xO_y de 0.25% a 1% en una película de gelatina, a su vez aumentaba la inhibición de radical DPPH* de 78 a 84.7%.

Propiedades Mecánicas de Biocompuestos

Los resultados de resistencia a la deformación (Rm), porcentaje de deformación (Def %) y módulo de Young (E) de los biocompuestos se presentan en la tabla 5.

La Rm de los biocompuestos disminuyó en comparación con el polipropileno vírgen (i.e. 28.40 MPa). No obstante, se puede observar que las formulaciones con un 30% de fibra de muérdago presentan un valor de Rm mayor (i.e. ~19 a 17 MPa), siendo las formulaciones M30, M30N0.25 y M30N0.5 las que tenían los valores promedio más elevados (i.e. 19.08, 18.73 y 18.53 MPa respectivamente), mientras que las formulaciones presentaron valores menores (i.e. ~16 a 15 MPa). La disminución de esta propiedad en biocompuestos con alto porcentaje de fibra ha sido previamente reportada en literatura y puede atribuirse a un ordenamiento aleatoria de la fibra en el material, así como la presencia de estructuras amorfas (i.e. hemicelulosa y lignina) (Muthu Kumar et al., 2020).

De forma similar, la mayoría de las muestras de biocompuestos muestran una disminución de Def % con respecto al PP (i.e. 36.84 %), a excepción de aquellas a las cuales se les incorporaron nanopartículas. Las muestras con 0.25% de nanopartículas, M30N0.25 y M30N0.25C, mantienen resultados similares entre ellos (i.e. 34.15 y 35.87 %) así como con el PP. No obstante, las muestras con M30N0.5 y M30N0.5C (i.e. 0.5% de nanopartículas) presentaron valores promedio de 24.18 y 34.15 %, lo cual sugiere que incrementar el porcentaje de nanopartículas, más allá de un cierto punto, resulta en afectaciones a dicha propiedad. Esta diferencia se debe a la concentración nanopartículas dado que, a una concentración adecuada, estas incrementan la interacción interfacial entre componentes, resultando en incrementos en %Def, mientras que un exceso de estos aditivos puede llevar a la aglomeración en el procesamiento o la formación de sitios vacíos, resultando en la disminución de dicha propiedad (Ali et al., 2025; Govinda et al., 2026).

Finalmente, todas las formulaciones presentaron una disminución de E a comparación con el PP. Sin embargo, entre biocompuestos, as formulaciones con 0.25% de nanopartículas y 30% de muérdago (M30N0.25 y M30N0.25C) presentan valores de E menor que formulaciones con 0.5% de nanopartículas o 40% de fibra de muérdago. Esto puede atribuirse a que una menor concentración de dichos aditivos permite mayor movilidad de cadenas mientras que un incremento del mismo favorece la rigidez del material.

Tabla 5. Propiedades mecánicas de biocompuesto.

Muestra	Rm (Mpa)	Def % (%)	E (MPa)
PP	28.40 ± 0.40	36.84 ± 1.62	622.94 ± 49.76
M30	19.08 ± 1.56	24.43 ± 4.43	428.467 ± 32.16
M30C	17.90 ± 0.34	27.80 ± 6.03	426.60 ± 29.98
M30A1	18.03 ± 0.19	30.95 ± 3.74	384.95 ± 9.34
M30CA1	17.03 ± 0.57	27.83 ± 5.51	373.58 ± 35.51
M30N0.25	18.73 ± 0.77	34.15 ± 3.29	411.98 ± 28.94
M30N0.25C	17.43 ± 0.58	35.87 ± 7.01	358.72 ± 34.58
M30N0.5	18.53 ± 1.05	24.18 ±6.05	445.36 ± 20.42
M30N0.5C	17.78 ± 0.44	33.62 ± 4.62	443.70 ± 49.76
M40N0.5	16.76 ± 0.83	25.03 ± 4.69	460.78 ± 38.17
M40N0.5C	15.10 ± 0.92	28.40 ± 5.42	418.65 ± 35.01

CONCLUSIONES

A partir de los resultados parciales presentados se pueden obtener las siguientes conclusiones:

- Los ensayos de inhibición de radicales y los análisis estadísticos multivariados, mostraron que al incrementar el porcentaje de NPs se incrementaban también las propiedades antioxidantes, aún después del envejecimiento acelerado.
- Las concentraciones óptimas que favorecen las propiedades mecánicas y antioxidantes son un 30% de muérdago y 0.25% de NPs.

BIBLIOGRAFÍA

1. Aguilar-Venegas, M., Quintana-Rodríguez, E., Aguilar-Hernández, V., López-García, C. M., Conejo-Dávila, E., Brito-Argáez, L., Loyola-Vargas, V. M., Vega-Arreguín, J., & Orona-Tamayo, D. (2023). Protein Profiling of Psittacanthus calyculatus during Mesquite Infection. *Plants*, *12*(3). https://doi.org/10.3390/plants12030464
2. Ali, H., Ali, S., Ali, K., Ullah, S., Ismail, P. M., Humayun, M., & Zeng, C. (2025). Impact of the nanoparticle incorporation in enhancing mechanical properties of polymers. In *Results in Engineering* (Vol. 27). Elsevier B.V. https://doi.org/10.1016/j.rineng.2025.106151
3. Bandala, E. R., Stanisic, D., & Tasic, L. (2020). Biogenic nanomaterials for photocatalytic degradation and water disinfection: A review. In *Environmental Science: Water Research and Technology* (Vol. 6, Number 12, pp. 3195–3213). Royal Society of Chemistry. https://doi.org/10.1039/d0ew00705f
4. Gallos, A., Paës, G., Allais, F., & Beaugrand, J. (2017). Lignocellulosic fibers: A critical review of the extrusion process for enhancement of the properties of natural fiber composites. In *RSC Advances* (Vol. 7, Number 55, pp. 34638–34654). Royal Society of Chemistry. https://doi.org/10.1039/c7ra05240e
5. Giacomin, H., Unno, M., Eichbauer, K., & Atkins, C. (2019). Automotive wastes. In *Water Environment Research* (Vol. 91, Number 10, pp. 1223–1228). John Wiley and Sons Inc. https://doi.org/10.1002/wer.1217
6. Govinda, Chinglenthoiba, C., Jagota, V., & Katiyar, J. K. (2026). Role of Nano Fillers on Mechanical Properties of Reinforced Natural Fibers Epoxy Composites: An Overview. In *Journal of Natural Fibers* (Vol. 23, Number 1). Taylor and Francis Ltd. https://doi.org/10.1080/15440478.2026.2619016
7. Guo, J., Cao, M., Ren, W., Wang, H., & Yu, Y. (2021). Mechanical, dynamic mechanical and thermal properties of TiO2 nanoparticles treatment bamboo fiber-reinforced polypropylene

composites. *Journal of Materials Science*, *56*(22), 12643–12659. https://doi.org/10.1007/s10853-021-06100-z

8. Ibrahim, I. D., Jamiru, T., Sadiku, E. R., Kupolati, W. K., & Agwuncha, S. C. (2016). Impact of Surface Modification and Nanoparticle on Sisal Fiber Reinforced Polypropylene Nanocomposites. *Journal of Nanotechnology*, *2016*. https://doi.org/10.1155/2016/4235975
9. Ismaeilimoghadam, S., Masoudifar, M., Nosrati, B., & Shamsian, M. (2016). Effects of inorganic nanoparticles on mechanical and morphological properties of wood flour-polypropylene nano composites. *Drewno* , *59*(196), 127–137. https://doi.org/10.12841/wood.1644-3985.127.09
10. Maddah, H. A. (2016). Polypropylene as a Promising Plastic: A Review. *American Journal of Polymer Science*, *6*(1), 1–11. https://doi.org/10.5923/j.ajps.20160601.01
11. Medina-Ganem, L. F., Valencia-Espinoza, N., Ayoko, G. A., Bandala, E., Conejo-Davila, A. S., Vega-Rios, A., Goonetilleke, A., & Rodriguez-Narvaez, O. M. (2026). The Influence of Moringa oleifera Biomass and Extraction Methods on Biogenic Synthesis of Iron Nanoparticles for Inhibition of Microbial Pollutants. *Sustainable Chemistry*, *7*(1), 4. https://doi.org/10.3390/suschem7010004
12. Muthu Kumar, T. S., Senthilkumar, K., Chandrasekar, M., Subramaniam, S., Rangappa, S. M., Siengchin, S., & Rajini, N. (2020). Influence of fillers on the thermal and mechanical properties of biocomposites: An overview. In *Biofibers and Biopolymers for Biocomposites: Synthesis, Characterization and Properties* (pp. 111–133). Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-030-40301-0_5
13. Ngo, T.-D., & Ho, T. (2016). Lignocellulosic biomasses, sustainable platform for bio-based materials with polypropylene. In P. Garcia (Ed.), *Polypropylene: Properties, Uses and Benefits* (pp. 175–210). Nova Science Piblishers, Inc.
14. Platzer, M., Kiese, S., Herfellner, T., Schweiggert-Weisz, U., Miesbauer, O., & Eisner, P. (2021). Common trends and differences in antioxidant activity analysis of phenolic substances using single electron transfer based assays. *Molecules*, *26*(5). https://doi.org/10.3390/molecules26051244
15. Sharma, P., Sharma, A., Sharma, A., & Srivastava, P. (2016). R RE EV VI IE EW W A AR RT TI IC CL LE E Automobile Waste and Its Management. In *RJCES* (Vol. 4, Number 2). www.aelsindia.com/rjces.htm

EL DESARROLLO DE UN MÉTODO RÁPIDO ESPECTROFOTOMÉTRICO POR UV-VIS PARA DETERMINACIÓN SEMICUANTITATIVA DE AMINOACIDOS (GLY, PHE, THR, TYR, NORV, NORL, LYS, GLU Y MIX 8AA) MEDIANTE REACCIÓN CON NINHIDRINA

Noemi Guadalupe Vazquez Navarro, Pedro Miguel Chávez Marín, Kazimierz Wrobel, Katarzyna Wrobel, Alma Rosa Corrales

Departamento de Química, División de Ciencias Naturales y exactas, Universidad de Guanajuato
ng.vazqueznavarro@ugto.mx

RESUMEN

La cuantificación y detección rápida de aminoácidos es fundamental en los procesos de purificación y separación, donde se requiere una herramienta de tamizaje que permita optimizar el flujo de trabajo previo al análisis por espectrometría de masas u otras técnicas analíticas. El presente estudio evaluó la viabilidad de la reacción con ninhidrina en microplaca como un método de identificación semicuantitativa y selección de fracciones. Para ello, se desarrolló una técnica colorimétrica utilizando una mezcla reactiva compuesta por ninhidrina al 0.4% (p/v) en etanol, buffer de acetato 2 M (pH 5.5) y ácido ascórbico al 1% (p/v) como agente reductor. Se prepararon curvas de calibración en un rango de 12.5 a 75 mg/L empleando estándares individuales de Gly, Phe, Thr, Tyr, NorV, NorL, Lys, Glu y una mezcla de estos (Mix 8AA). El procedimiento consistió en la incubación térmica de 100 µL de muestra y 100 µL de reactivo a una temperatura entre 65 °C - 75 °C durante 25 minutos, seguido de una lectura en el espectrofotómetro a una absorbancia a 570 nm, correspondiente a la formación de la púrpura de Ruhemann. Los resultados permitieron establecer un rango lineal de respuesta para todos los analitos evaluados, obteniendo coeficientes de determinación (R^2) superiores a 0.97, destacando la glicina (Gly) y la mezcla 8AA por presentar las pendientes de respuesta más altas. Se confirmó que la estabilización del pH y el control riguroso de la temperatura son factores críticos para la reproducibilidad del complejo coloreado. Si bien el método presenta limitaciones en cuanto a especificidad, dado que la intensidad de color varía según el tipo de aminoácido, su alta sensibilidad global a grupos amino y su bajo costo instrumental lo validan como una técnica de tamizaje eficiente. En conclusión, el método desarrollado es una herramienta auxiliar robusta para la preselección y priorización de muestras provenientes de columnas de intercambio iónico u otras técnicas permitiendo la selección rápida de las fracciones con mayor contenido de aminoácidos para su posterior caracterización analítica de alta resolución.

INTRODUCCIÓN

La caracterización y cuantificación precisa de aminoácidos (AAs) en matrices biológicas complejas constituye un desafío analítico fundamental para el desarrollo biotecnológico y para avanzar en el conocimiento de los distintos sistemas biológicos. Debido a la gran complejidad y diversidad estructural de las matrices biológicas, además de su amplio rango dinámico de concentraciones, el empleo de técnicas instrumentales como la cromatografía de líquidos o gases acoplada a espectrometría de masas (LC-MS o GC-MS), resulta indispensable para obtener resultados confiables. No obstante, en ocasiones estas técnicas requieren de la purificación previa de las muestras para eliminar interferencias de matriz, un proceso que se lleva a cabo comúnmente mediante columnas preparativas de intercambio iónico, empleando resinas como la Dowex 50WX4 (H^+).

En el contexto de la purificación por intercambio iónico, la muestra se hace pasar a través de una columna cargada con la resina de intercambio, la cual retiene selectivamente los aminoácidos mediante interacciones electrostáticas entre los grupos funcionales cargados de los analitos y los sitios activos de la resina (Alia et al., 2019). Este proceso de elución, diseñado para desplazar gradualmente los aminoácidos mediante cambios en la fuerza iónica o el pH del eluyente, genera un elevado número de fracciones individuales (Takano et al., 2010). La gestión y monitoreo de estas

fracciones plantean una limitación operativa significativa; caracterizar cada una de ellas mediante LC-MS o GC-MS no es solo tardado, si además es financieramente costoso. Para optimizar estos flujos de trabajo, es necesario implementar metodologías auxiliares de tamizaje (*preselección*) que permitan identificar aquellas fracciones con mayor contenido de analitos antes de someterlas a un análisis instrumental avanzado (Brunauer et al., 2014).

La reacción colorimétrica de aminoácidos con ninhidrina en microplaca de 96 pocillos es una opción adecuada para este propósito. Durante este proceso, se produce una desaminación oxidativa de los aminoácidos, seguida por la condensación de la ninhidrina reducida con el amoníaco liberado y una segunda molécula de ninhidrina, en el caso de aminas primarias forma el complejo púrpura de Ruhemann, cuya absorbancia máxima es a 570 nm y en el caso de aminas secundarias produce coloración amarilla con absorbancia máxima de 440 nm en ambos casos la coloración es proporcional a la concentración de aminoácidos en la muestra (Friedman, 2004).

En el método tradicional en tubo, esta reacción se lleva a cabo a altas temperaturas (100-120°C) y pH controlado (4-8). Sin embargo, estas condiciones de temperatura son incompatibles con el formato de microplaca, ya que las altas temperaturas deforman el material y generan evaporación. Por ello, en este estudio se evaluaron diferentes temperaturas (60-80°C) y tiempos de reacción (15-60 min) para determinar las mejores condiciones de reacción para distintos aminoácidos y la mezcla de ellos. Es importante señalar que este formato ofrece ventajas como distribución uniforme de temperatura, análisis simultáneo de muestras y bajo consumo de reactivos.

Por lo anterior, el objetivo del trabajo fue la estandarización de un método espectrofotométrico por UV-VIS en formato de microplaca, fundamentado en la reacción con ninhidrina con aminoácidos, para la determinación semicuantitativa de AAs (Gly, Phe, Thr, Tyr, NorV, NorL, Lys, Glu y mezcla 8AA). Al sistematizar esta reacción, el método propuesto no solo permitió una identificación rápida de las fracciones enriquecidas provenientes de la purificación con Dowex 50WX4, sino que actúa como una estrategia de priorización de muestras. De este modo, se asegura que únicamente las fracciones de mayor interés analítico procedan a la caracterización por técnicas de alta resolución.

PARTE EXPERIMENTAL

Reactivos y soluciones:
La mezcla reactiva estándar se preparó con ninhidrina al 0.2% o 0.4% (p/v) según el experimento (especificado en cada sección), disuelta en etanol, buffer de acetato 2 M (pH 5.5) y ácido ascórbico al 1% (p/v) como agente reductor. Los estándares de aminoácidos (Gly, Pro, Phe, Thr, Tyr, Nva, Nle, Lys, Glu) se disolvieron en buffer de acetato de sodio (pH 5.5). La prolina (Pro) se incluyó como representante de aminas secundarias.

Selección de condiciones inicial de reacción en tubo (temperatura y tiempo): Evaluación de temperatura (60°C y 80 °C) y tiempo de reacción (15, 30 y 60 min)
Se prepararon curvas de calibración por duplicado utilizando estándares individuales de Gly y Pro de 20 a 100 mg/L. La mezcla reactiva consistió en ninhidrina al 0.2% (p/v) en etanol, buffer de acetato 2 M (pH 5.5) y ácido ascórbico al 1% (p/v) como agente reductor. El procedimiento experimental consistió en la adición de 100 µL de estándar y 100 µL de la mezcla reactiva en tubos de 2mL (relación 1:1). Posteriormente, las muestras fueron sometidas a incubación térmica en parilla con placa de calentamiento en dos condiciones de temperatura, 60 °C y 80 °C, evaluando el progreso de la coloración en intervalos de tiempo de 15, 30 y 60 minutos. La lectura de la absorbancia se realizó en un lector de microplacas a 440 nm para Pro y 570 nm para Gly, analizando la evolución de la púrpura de Ruhemann.

Adaptación de formato de tubo a microplaca de 96 pocillos en estufa evaluando la temperatura y tiempo
Se prepararon estándares de Gly de 12.5 a 100 mg/L por duplicado, manteniendo un pH constante de 5.5 mediante el uso de buffer de acetato. Se añadió 100 µL de cada estándar y 100 µL de la

mezcla reactiva de ninhidrina (0.2% p/v en etanol, buffer de acetato 2 M pH 5.5 y ácido ascórbico 1% p/v) en una relación volumétrica de 1:1, tanto a la microplaca de 96 pocillos como a tubos de 2 Ml. La placa fue sometida a incubación térmica dentro de una estufa a un intervalo de temperatura de 65–70 °C, y los tubos se calentaron en parrilla con placa de calentamiento a la misma temperatura. Se evaluó la formación del complejo coloreado en tiempos de 10, 15, 20, 25 y 30 minutos. Finalmente, la intensidad de la coloración (Púrpura de Ruhemann) se cuantificó mediante un lector de microplacas a una longitud de onda de 570 nm.

Evaluación de respuesta de cada AA y determinación semicuantitativa
Se prepararon curvas de calibración en un rango de 12.5 a 75 mg/L empleando estándares individuales de Gly, Phe, Thr, Tyr, NorV, NorL, Lys, Glu y una mezcla de estos (Mix 8AA) por triplicado. Se utilizó una mezcla reactiva compuesta por ninhidrina al 0.4% (p/v) en etanol, buffer de acetato 2 M (pH 5.5) y ácido ascórbico al 1% (p/v) como agente reductor. El procedimiento consistió en la incubación térmica de 100 µL de cada estándar y 100 µL de reactivo en microplaca de 96 pocillos a una temperatura entre 65 °C - 75 °C en estufa durante 25 minutos, seguido de una lectura en el espectrofotómetro a una absorbancia a 570 nm, correspondiente a la formación de la púrpura de Ruhemann.

Análisis de muestra real de hidrolizado de levadura purificada con DOWEX 50WX4 (H^+)
Se preparó una curva de calibración en un rango de 12.5 a 100 mg/L empleando el estándar Mix 8AA (Gly, Phe, Thr, Tyr, NorV, NorL, Lys, Glu). Se utilizó una mezcla reactiva compuesta por ninhidrina al 0.4% (p/v) en etanol, buffer de acetato 2 M (pH 5.5) y ácido ascórbico al 1% (p/v) como agente reductor. El procedimiento consistió en la incubación térmica de 100 µL de cada estándar y 100 µL de reactivo en microplaca de 96 pocillos a una temperatura entre 70°C en agitador térmico para microplacas durante 25 minutos, seguido de una lectura en el espectrofotómetro a una absorbancia a 570 nm, correspondiente a la formación de la púrpura de Ruhemann. La purificación de la muestra se realizó de la siguiente manera se montó una columna preparativa de la resina, se acondicionó con lavados, NaOH 2M y HCl 2M y el hidrolizado se eluyó con NH_4OH 2 M, obteniéndose 10 fracciones de 1 mL (con diferente pH), se llevaron a sequedad y posteriormente se resuspendieron en cuanto volumen buffer de acetato de sodio diluyendo 1:5, para ser analizadas como muestras.

RESULTADOS

Selección de condiciones de reacción (temperatura y tiempo)
La evaluación del efecto de la temperatura y el tiempo permitió establecer las condiciones para la formación del complejo de Ruhemann. Se evaluó el comportamiento de la absorbancia a 570 nm para glicina y 440 nm para prolina frente a la temperatura (60 °C y 80 °C) inferiores a las empleadas en el método estándar (100-120 °C), y el tiempo (15, 30 y 60 min).

En las condiciones experimentales empleadas, con lectura únicamente a 570 nm, el método solo detecta aminas primarias, ya que el complejo formado con aminas secundarias absorbe a 440 nm y no contribuye significativamente a la señal a 570 nm. Para la prolina (amina secundaria), no se observó absorbancia significativa a 570 nm, aunque sí se reporta en literatura que forma un compuesto coloreado con λ max a 440 nm.

En la figura 1 se muestran las curvas de calibración de Gly obtenidas en tubo. A los 15 minutos de reacción, tanto a 60 °C como a 80 °C, los valores de R^2 reflejan una buena linealidad, acompañada de una coloración púrpura intensa. A partir de los 30 minutos de incubación, se observó una disminución tanto en los valores de absorbancia como en el coeficiente de determinación (R^2), asociado a la degradación del reactivo, que se manifiesta un viraje de color hacia tonos marrones. Con base en estos resultados, se selección un intervalo de 65-70 °C como la condición idónea para migrar el procedimiento a microplaca considerando las limitaciones térmicas.

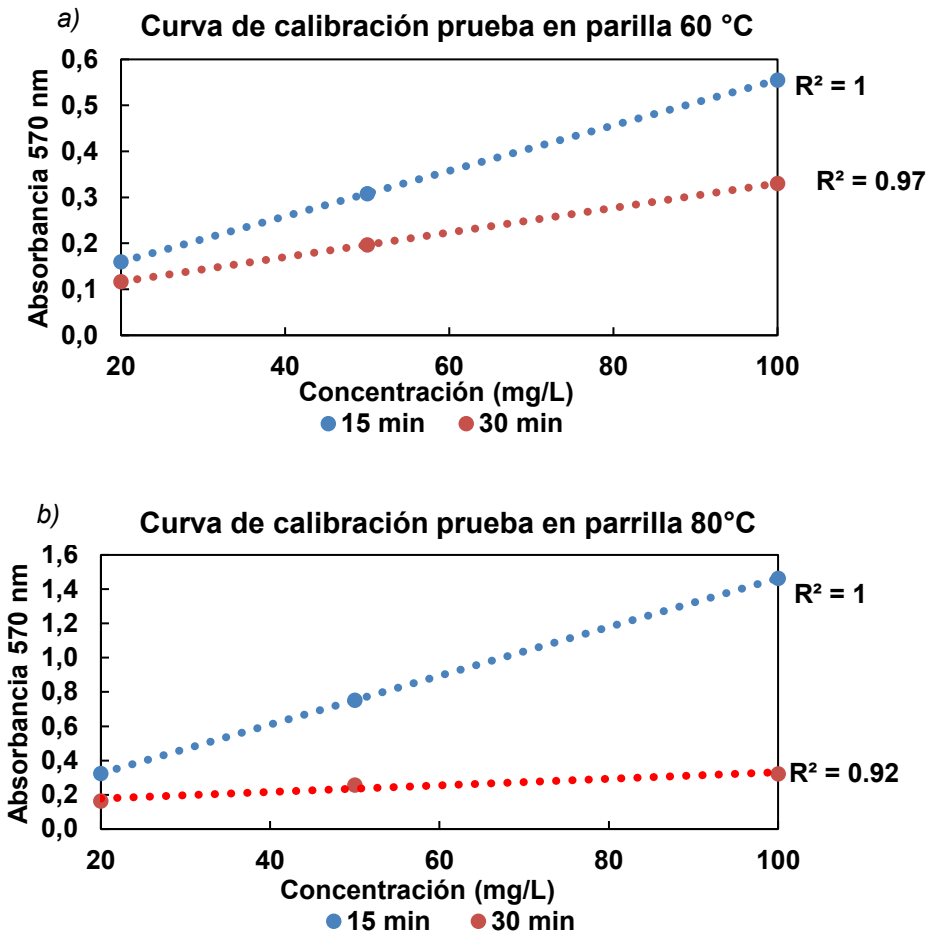


Figura 1. Curvas de calibración de Gly en tubo. Incubación en parrilla a) 60°C b) 80°C en 15 y 30 min de reacción por determinación espectrofotometrica a 570 nm

Comparación de formatos: tubo vs. microplaca

La transferencia del procedimiento analítico tradicional (tubos de 2 mL en parrilla) al formato de microplaca de 96 pocillos con incubación en estufa de convección permitió el procesamiento simultáneo de muestras Si bien en el formato de tubos se alcanzó una buena linealidad a los 15 minutos (Figuras 1 y 2b), en el formato de microplaca se observó que la reacción es más lenta, requiriendo un tiempo de incubación más prolongado. La máxima absorbancia y los mejores coeficientes de determinación ($R^2 > 0.99$) se obtuvieron entre los 25 y 30 minutos (Figura 2a). En contraste, el formato en tubos presentó una menor estabilidad térmica, mayor variabilidad y consumo de material en tiempos prolongados. La mejora en la linealidad y repetibilidad observada en la microplaca se debe a que el control térmico más constante (65–70 °C) en comparación con los experimentos en tubo (60–80 °C) ralentiza la formación del complejo coloreado, permitiendo un desarrollo más controlado de la coloración y evitando la degradación prematura del reactivo.

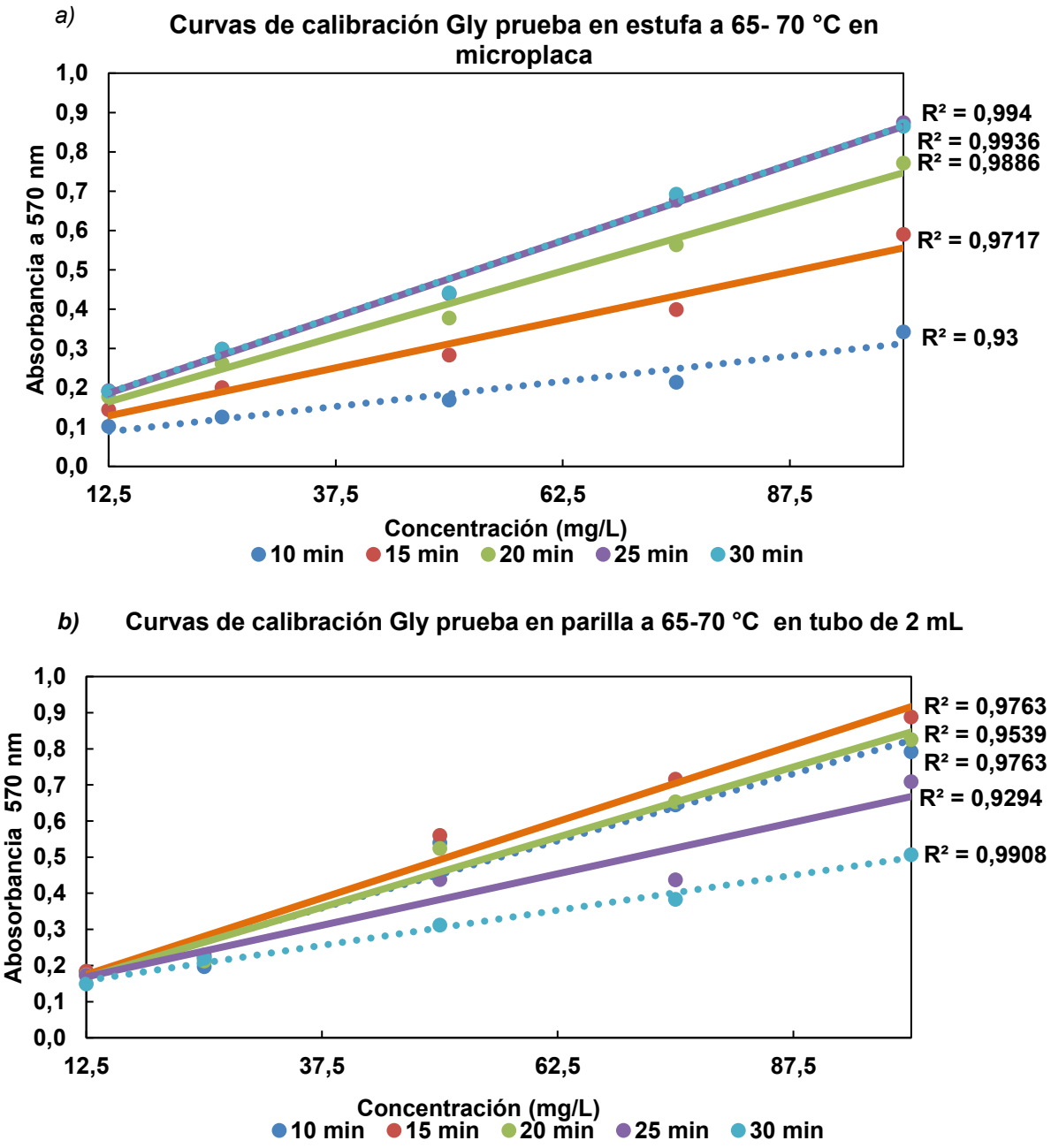


Figura 2. Curvas de calibración de Gly comparando dos formatos: a) microplaca y estufa; y b) tubos (2 mL) en Parrilla. Temperatura (65- /0 °C) y tiempo de reacción de 10, 15, 20, 25 y 30 min, lectura a 570 nm

Curvas de calibración de aminoácidos individuales y mezcla en placa de 96 pocillos
Se prepararon curvas de calibración en un rango de 12.5 a 75 mg/L empleando estándares individuales de Gly, Phe, Thr, Tyr, Nva, Nle, Lys, Glu y una mezcla de estos (Mix 8AA). Todos los analitos presentaron una respuesta lineal con coeficientes de determinación (R^2) superiores a 0.97, destacando la (Gly) y la mezcla 8AA por presentar las pendientes de respuesta más altas (Figura 3 y Tabla 1), lo que indica una mayor sensibilidad en las condiciones evaluadas. Una limitación del procedimiento en cuanto a especificidad, dado que la intensidad de color varía según el tipo de AA. Sin embargo, su alta sensibilidad global a grupos amino y su bajo costo lo perfilan como una herramienta de tamizaje.

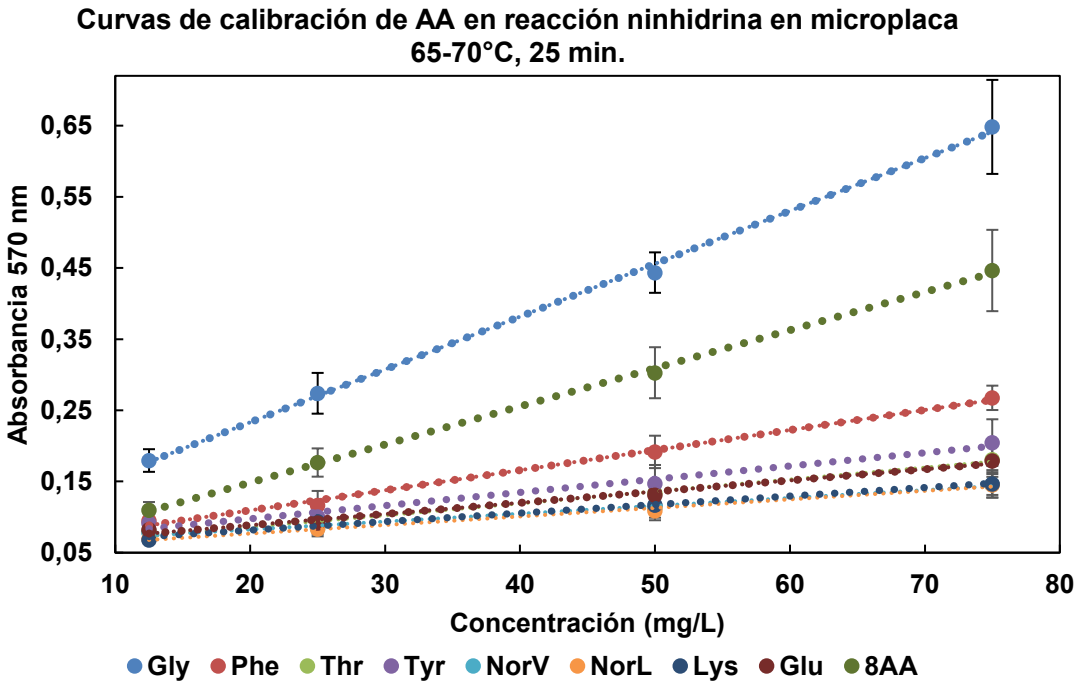


Figura 3. Curvas de calibración de Gly, Phe, Thr, Tyr, NorV, NorL, Lys, Glu y Mix 8AA a 65°C - 80°C en microplaca, temperatura: 65-75 °C, tiempo de reacción: 25 minutos y lectura a 570 nm

Tabla 1. Parametros de las curvas de calibración de aminoácidos dterminados por espectrofotometría con ninhidrina en microplaca

AA	Ecuación de la recta	R^2	LOD (mg/L)	LOQ (mg/L)
Gly	y = 0.0074x + 0.0847	0.998	2.07	6.92
Mix 8AA	y = 0.0054x + 0.0413	0.999	2.84	9.48
Phe	y = 0.0028x + 0.0531	0.994	5.48	18.28
Tyr	y= 0.0019x + 0.0605	0.979	8.08	26.94
Glu	y = 0.0016x + 0.0572	0.984	9.60	31.99
Thr	y = 0.0017x + 0.0526	0.982	9.03	30.11
Lys	y = 0.0012x + 0.0577	0.992	12.80	42.65
Nva	y = 0.0011x + 0.0604	0.982	13.96	46.53
Nle	y = 0.0012x + 0.0529	0.984	12.80	42.65

Análisis de fracciones

Una vez establecidas las condiciones óptimas de reacción (65–70 °C, 25 min) en estufa de convección y confirmada la respuesta lineal del Mix 8AA, se transfirió el método a una incubadora para microplacas con agitación (70 °C, 300 rpm) para el análisis de las fracciones reales, con el fin de mejorar la uniformidad térmica. En esta fase, se empleó exclusivamente el estándar Mix 8AA, por ser más representativo de las muestras provenientes de la columna de intercambio iónico.

La Figura 4 muestra la curva de calibración del Mix 8AA obtenida en la incubadora para microplacas ($y=0.0129x +0.0724$, $R^2 = 0.9997$) bajo estas condiciones, se observó un mayor pendiente ($m= 0.0129$) con respecto a la de la obtenida en la estufa ($m=0.0054$) (Tabla 1), debido al cambio en las condiciones de incubación (agitación y mayor uniformidad térmica), lo que se traduce en una mayor sensibilidad del método en su versión final. Por ello, la curva de la Figura 4, generada en las

condiciones finales del procedimiento, fue la empleada tanto para la cuantificación de las fracciones reales asi como para la determinación de los parámetros analíticos (LOD, LOQ y precisión).

El límite de detección (LOD) y el límite de cuantificación (LOQ) del método se calcularon a partir de la desviación estándar de 10 réplicas del blanco de reactivos, utilizando los criterios de 3σ/m y 10σ /m, respectivamente, obteniéndose valores de 0.48 mg/L y 1.6 mg/L. Adicionalmente, la precisión del método fue evaluada mediante el análisis de réplicas del estándar de 50 mg/L, obteniendo un coeficiente de variación (CV) de 4.86%, lo cual demuestra una adecuada repetibilidad.

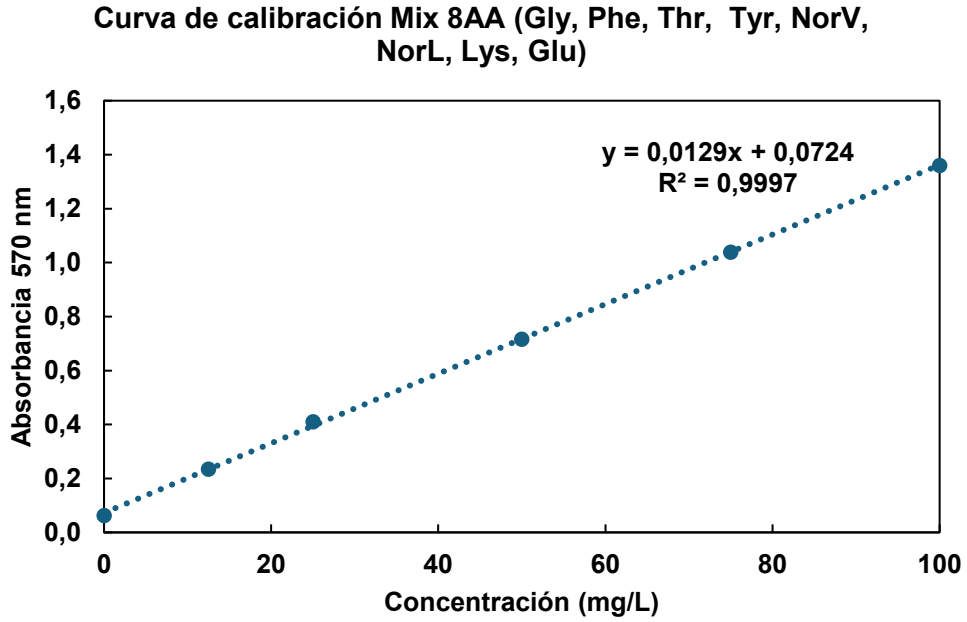


Figura 4. Curvas de calibración del Mix 8AA obtenida en incubadora para microplacas (70 °C, 25 min, agitación 300 rpm) Utilizada para la cuantificación semicuantitativa de las fracciones purificadas con la resina Dowex 50WX4. lectura a 570 nm

Se recolectaron 10 fracciones provenientes de la purificación con resina Dowex 50WX4. Las muestras se diluyeron 1:5 con buffer de acetato antes de su análisis. En la Tabla 2 se presentan las concentraciones de aminoácidos en las fracciones, expresadas como mg/L equivalentes de Mix 8AA y ya corregidas por el factor de dilución.

Las fracciones 2, 6, 7, 8, 9 y 10 presentaron concentraciones cuantificables de 14.0, 377.0, 370.8, 17.9, 27.6 y 73.3 mg/L, respectivamente. Las fracciones 6 y 7 destacan por su alto contenido de aminoácidos (~370 mg/L), seguidas por la fracción 10 (73.3 mg/L). Las fracciones 3, 4 y 5 mostraron concentraciones por debajo del LOQ y la fracción 1 por debajo del LOD, por lo que no se reportan valores numéricos

Tabla 2. Concentración de aminoácidos en las fracciones eluidas de Dowex 50WX4.

	Fracción									
	1	***2***	***3***	***4***	***5***	***6***	***7***	***8***	***9***	***10***
pH	**2.3-2.4**	***2.4-2.6***	***2.6-3.5***	***3.5-4.4***	***4.4-5.3***	***5.3-8.6***	***8.6-11.3***	***11.3-11.6***	***11.6-11.7***	***11.7-11.7***
[AA] (mg/L)	**< D**	14.0	**< LOQ**	**< LOQ**	**< LOQ**	377.0	370.8	17.9	27.6	73.3

Valores corregidos por el factor de dilución 1:5.
LOD = 0.48 mg/L (medido); LOQ = 1.6 mg/L (medido).

CONCLUSIONES

Se adoptó un método espectrofotométrico con ninhidrina en microplaca con incubación térmica en estufa para tamizaje de aminoácidos. Se obtuvieron curvas lineales con $R^2 > 0.97$ usando estándares. Los resultados demostraron que las condiciones óptimas de 65–70 °C durante 25 minutos no solo proporcionan la máxima repetibilidad y linealidad ($R^2 > 0.99$), sino que también permiten procesar una mayor densidad de muestras con una mayor eficiencia térmica.

La transferencia del método a una incubadora para microplacas con agitación (70 °C, 300 rpm) permitió mejorar la uniformidad térmica y procesar un mayor número de muestras con mayor eficiencia. La curva de calibración del Mix 8AA obtenida en incubadora ($y = 0.0129x + 0.0724$) presentó una mayor sensibilidad en comparación con la obtenida en estufa (0.0054), lo que refleja la influencia de las condiciones de incubación (agitación, uniformidad térmica y control riguroso del pH 5.5) en la cinética de formación de la púrpura de Ruhemann

El procedimiento adaptado constituye una herramienta de tamizaje robusta, económica y versátil para el monitoreo de fracciones provenientes de columnas de intercambio catiónico La implementación de este protocolo de preselección asegura una gestión más eficiente de los recursos, permitiendo la selección únicamente aquellas fracciones enriquecidas en aminoácidos para su caracterización mediante técnicas instrumentales (GC-MS/LC-MS).

BIBLIOGRAFÍA

1. Alia, K. B., Nadeem, H., Rasul, I., Azeem, F., Hussain, S., Siddique, M. H.,…Nasir, S. (2019). Applications of ion exchange materials in biomedical industries.
2. Brunauer, L. S., Caslavka, K. E., & Van Groningen, K. (2014). Ion exchange and thin layer hromatographic separation and identification of amino acids in a mixture: an experiment for general chemistry and biotechnology laboratories. *Journal of Chemical Education*, *91*(12), 2216-2220.
3. Friedman, M. (2004). Applications of the ninhydrin reaction for analysis of amino acids, peptides, and proteins to agricultural and biomedical sciences. *Journal of agricultural and food chemistry*, *52*(3), 385-406.
4. Takano, Y., Kashiyama, Y., Ogawa, N. O., Chikaraishi, Y., & Ohkouchi, N. (2010). Isolation and desalting with cation‐exchange chromatography for compound‐specific nitrogen isotope analysis of amino acids: application to biogeochemical samples. *Rapid Communications in Mass Spectrometry*, *24*(16), 2317-2323.

EVIDENCIA DE LA SÍNTESIS EN UNA SOLA ETAPA DE COMPLEJOS METÁLICOS DE BASES DE SCHIFF

Fabian Mendoza Hernández[1], Erasto Vergara Hernández[2], Carlos Alfonso Mendoza Basilio[3], Ana Karen Acero Gutiérrez[4], Keila Renata Carreón Alamilla[1], Fernanda Aryl Hernández Ramírez[1], Evelyn Mariana Gómez López[5]

[1]CECyT No 16 "Hidalgo" - IPN, [2]UPIIH – IPN, [3]UPIBI – IPN, [4]ESIME Zacatenco – IPN, [5]ESM - IPN.
fmendozah@ipn.mx

RESUMEN

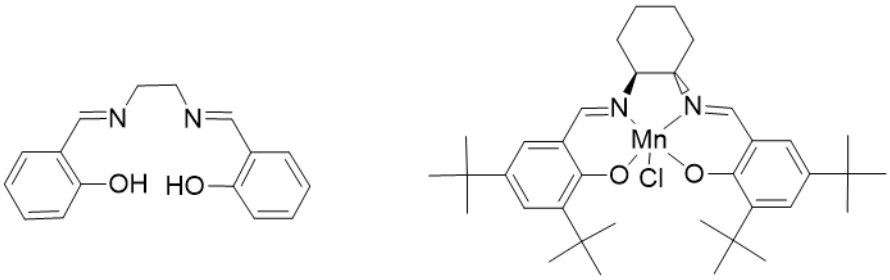
Las bases Schiff tienen importancia significativa tanto en Química como en diversos campos, como la catálisis, Química de Coordinación, investigación biomédica, etc., debido a su facilidad de síntesis, versatilidad estructural y fuerte capacidad para formar complejos estables con iones metálicos. Sus complejos metálicos, en particular, atraen la atención en aplicaciones médicas como estudios antimicrobianos, anticancerígenos e inhibidores enzimáticos debido a su notable aumento de las actividades biológicas. Tradicionalmente, los complejos metálicos de bases de Schiff se sintetizan empleando dos etapas de síntesis por medio de calentamiento a reflujo, llegando a necesitarse hasta 6 horas de síntesis y obteniéndose rendimientos promedios del 80%. En este trabajo se presenta la síntesis de un complejo metálico de bases de Schiff: saloph-Mn(III). La síntesis se llevó a cabo en una sola etapa bajo radiación por microondas a diferentes tiempos de reacción: 10, 20, 30, 40, 50 y 60 segundos. Los resultados de los análisis a los productos de reacción por cromatografía de gases acoplada a masas y por espectroscopía de infrarrojo sugieren que la formación del compuesto deseado se lleva a cabo desde los 10 segundos de síntesis, con rendimientos superiores al 95%. El método de síntesis empleado resultó ser eficiente en la formación del complejo metálico de base de Schiff a una sola etapa, con posibilidades de poder utilizarlo en la síntesis de complejos con diferentes grupos funcionales orgánicos, además de ser amigable con el medio ambiente al disminuir los tiempos de reacción habituales y la cantidad de reactivos empleados en la purificación de los productos.

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, la industria química contribuye con más de 1 billón de euros al producto interno bruto (PIB) mundial y emplea alrededor de 15 millones de personas en todo el mundo, lo que la convierte en el 5º sector manufacturero más grande a nivel mundial [1]. Su carácter facilitador se refleja en la estimación de que cada valor del euro generado conduce directamente a más del cuádruple de esta cantidad generada adicionalmente en otras partes de la economía global. Por otro lado, la industria química tiene una huella ambiental significativa y es responsable de la emisión anual de 3000 millones de toneladas de CO_2 global, lo que supone el 6% de todo el CO_2 liberado en la atmósfera por actividad humana en 2025 [2].

Por su parte, la creciente demanda de métodos limpios y sostenibles en la investigación y la industria química pone de manifiesto la creciente conciencia medioambiental que impulsa la innovación [3]. Una de las directrices más esenciales para las prácticas químicas sostenibles es la eliminación de disolventes orgánicos nocivos para el medio ambiente y la minimización de la producción de residuos durante la síntesis química [4]. En este sentido, numerosos procesos en síntesis química buscan llevar a cabo la obtención de los productos de reacción en un menor número de etapas, lo que representa un menor gasto energético y la reducción en la cantidad de residuos generados al final de la síntesis, así como el uso de "métodos verdes de síntesis", donde no se utiliza el habitual calentamiento a reflujo en el método de reacción [5]. Ejemplos de estos métodos alternos de síntesis que ya han sido reportados los encontramos en la obtención de ligandos orgánicos de bases de Schiff y de sus complejos metálicos [6,7].

Las bases de Schiff son un grupo de ligandos orgánicos que contienen el grupo imino (-C=N-), son una clase de ligandos particularmente importante en Química de Coordinación [8]. Son fáciles de sintetizar, muestran un comportamiento de enlace flexible y tienen numerosas aplicaciones catalíticas, biológicas, magnéticas, eléctricas, etc. [9]. La actividad de los ligandos aumenta cuando forman complejos con metales de transición, fenómeno explicado por la teoría de quelación [10]. Dentro del grupo de ligandos de bases de Schiff, tal vez el más conocido sea el ligando salen (*N,N'*-bis(salicilaldehído)etilendiamina), que resulta de la condensación de etilendiamina y salicilaldehído (Figura 1.a). A su vez, uno de los complejos metálicos de bases de Schiff más importantes y reconocidos es el conocido como catalizador de Jacobsen (*N,N'*-bis(3,5-di-tert-butilsaliciledeno)-1,2-ciclohexanandodiaminomanganeso(III)) (Figura 1.b), nombrado así en honor a su descubridor, Eric N. Jacobsen. El catalizador de Jacobsen es un reactivo popular para la epoxidación enantioselectiva de alquenos. Este reactivo se prepara con éxito en tres pasos. Una mezcla de isómeros *1,2*-diaminociclohexano se purifica y resuelve mediante cristalización (y recristalización) con ácido L-tartárico; se forma una diimina entre el trans-1,2-diaminociclohexano resuelto y el 3,5-di-*tert*-butil-2-hidroxibenzaldehído para producir el ligando de Jacobsen; y finalmente el catalizador de Jacobsen se prepara a partir del ligando mediante tratamiento con acetato de manganeso(II) seguido de oxidación con aire y la adición de una fuente de cloro (cloruro de sodio o de litio, preferentemente) [11]. La estructura del catalizador tiene al manganeso como catión metálico central.



a) b)

Figura 1. a) Ligando salen; b) catalizador de Jacobsen.

La síntesis tradicional de los ligandos tipo salen se lleva a cabo por calentamiento a reflujo, empleando tiempos de reacción de hasta 3 horas. Por su parte, los complejos metálicos de bases de Schiff se sintetizan habitualmente en dos etapas a calentamiento a reflujo: en la primera etapa (3 h) se sintetiza el ligando orgánico; en la segunda etapa (3-4 h) se obtiene el complejo tras la adición del catión metálico al ligando previamente formado.

En este trabajo se estudia la viabilidad de sintetizar los complejos metálicos de bases de Schiff con Mn(III) en una sola etapa y bajo radiación por microondas, con la finalidad de optimizar tiempos de reacción y disminuir el impacto de los procesos químicos en el medio ambiente.

PARTE EXPERIMENTAL

Para la síntesis de los complejos metálicos de bases de Schiff se utilizó salicilaldehído (Sigma Aldrich, 98% de pureza), *o*-fenilendiamina (Sigma Aldrich, 99% de pureza), acetato de manganeso (II) (Sigma Aldrich, 99% de pureza) y cloruro de sodio (Sigma Aldrich, 99% pureza). Como disolvente se empleó etanol puro (EtOH) por lo que no fue necesaria su purificación previa para su uso posterior. La síntesis se llevó a cabo por radiación por microondas (2.45 GHz, 600 W). Los productos de reacción se analizaron por espectroscopía de infrarrojo (Perkin Elmer, modelo), espectrometría de masas por ionización por electrospray (ESI) (TIMSTOF Pro).

En un matraz redondo de 100 ml, se colocaron 2 mmol de salicilaldehído disueltas en 20 ml de EtOH, las cuáles fueron agregadas mediante goteo lento a una solución de 1 mmol de *o*-fenilendiamina disuelta en 20 ml de EtOH. A la mezcla en agitación se agregó 1 mmol de acetato de manganeso (II)

disuelta en 20 ml de EtOH. Después de unos minutos la reacción se irradió con microondas durante 10 segundos y se dejó en agitación hasta alcanzar la temperatura ambiente. La reacción se enfrió y el producto se recuperó por filtración a vacío, dejándose secar en la campana de extracción, obteniéndose un polvo color café. De manera análoga, se realizó la síntesis del mismo complejo de Mn variando los tiempos de radiación por microondas: 20, 30, 40, 50 y 60 segundos. El esquema de la Figura 2 muestra la ruta de síntesis de los complejos de bases de Schiff con Mn.

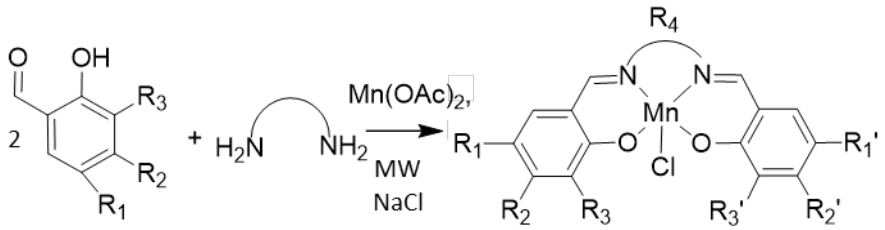


Figura 2. Ruta de síntesis de los complejos metálicos de bases de Schiff con Mn(III).

RESULTADOS

En la Figura 3 se presentan los análisis por espectrometría de masas del complejo saloph-Mn(III) sintetizado a diferentes tiempos de reacción.

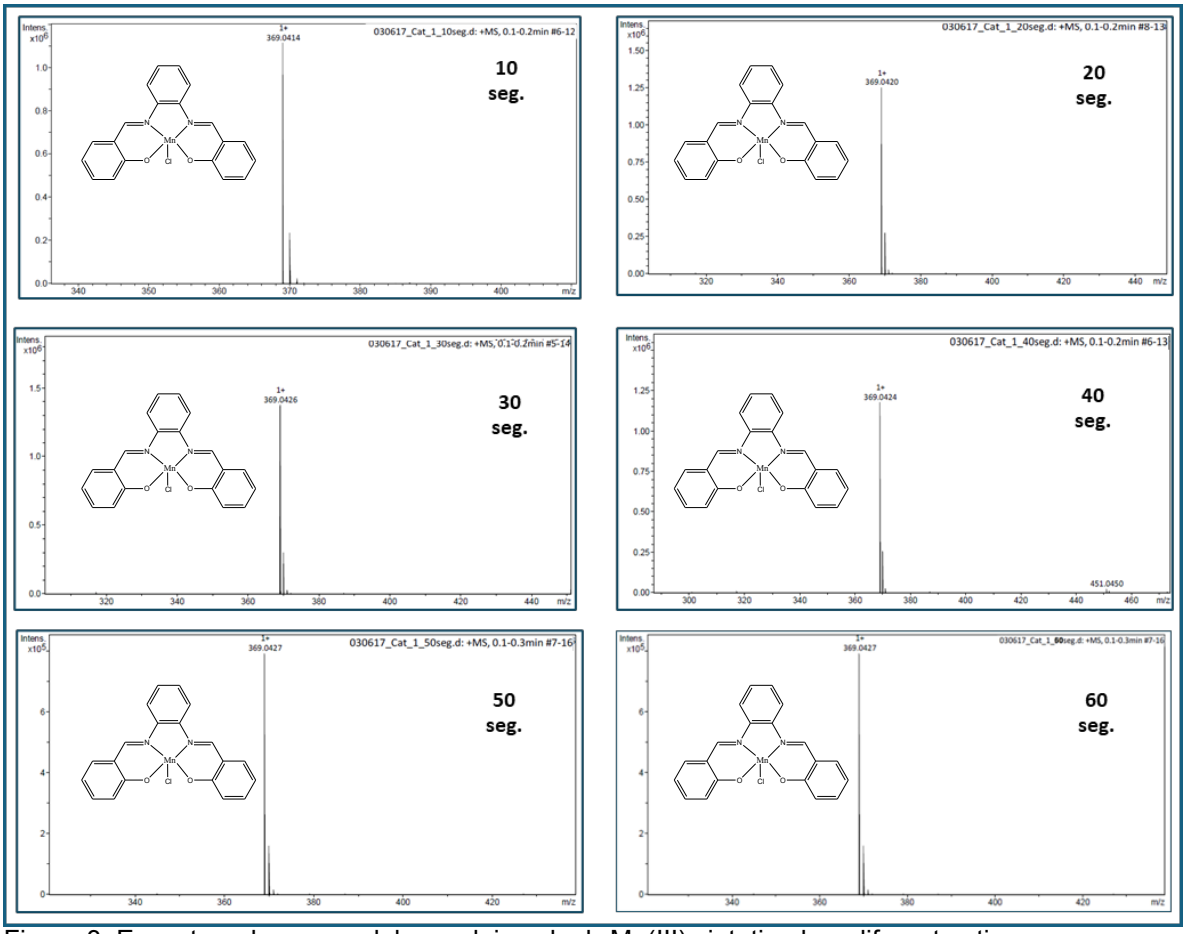


Figura 3. Espectros de masas del complejo saloph-Mn(III) sintetizado a diferentes tiempos.

Las imágenes para cada tiempo de síntesis del complejo muestran una única señal intensa acompañada de una señal pequeña debido a las isotopías propias del ion Mn^{+}. La señal m/z de 369.04 corresponde al peso molecular del complejo saloph-Mn(III), sin la presencia del átomo de Cl, el cuál por la propia técnica (ionización de especies atómicas) fue ionizada y separada del resto de la molécula. Por otra parte, dos aspectos importantes pueden determinarse a partir de los espectros obtenidos a cada tiempo de síntesis. El primero de ellos es que los espectros se aprecian muy puros, es decir, no hay evidencia de la formación de productos secundarios como parte de la síntesis o de residuos de reactivos, ya que no hay presencia de señales adicionales. La espectrometría de masas es una técnica muy potente que permite conocer todo lo que está presente en la muestra que se analiza con base en sus pesos moleculares. El segundo aspecto importante que arrojan los espectros de masas es la determinación del tiempo óptimo de síntesis del complejo saloph-Mn(III). Desde los 10 segundos de síntesis (radiación por microondas) se determinó la formación del complejo metálico. De igual manera, se determina que, pese a estar expuesto por más tiempo a la radiación por microondas, la estructura del complejo resulta ser altamente estable, por lo que a tiempos más altos de radiación sigue existiendo una única señal (saloph-Mn(III)) y siguen sin apreciarse la formación de subproductos de reacción.

En la Figura 4 se presentan los espectros de infrarrojo del complejo saloph-Mn(III) sintetizado a 10, 20, 30, 40, 50 y 60 segundos.

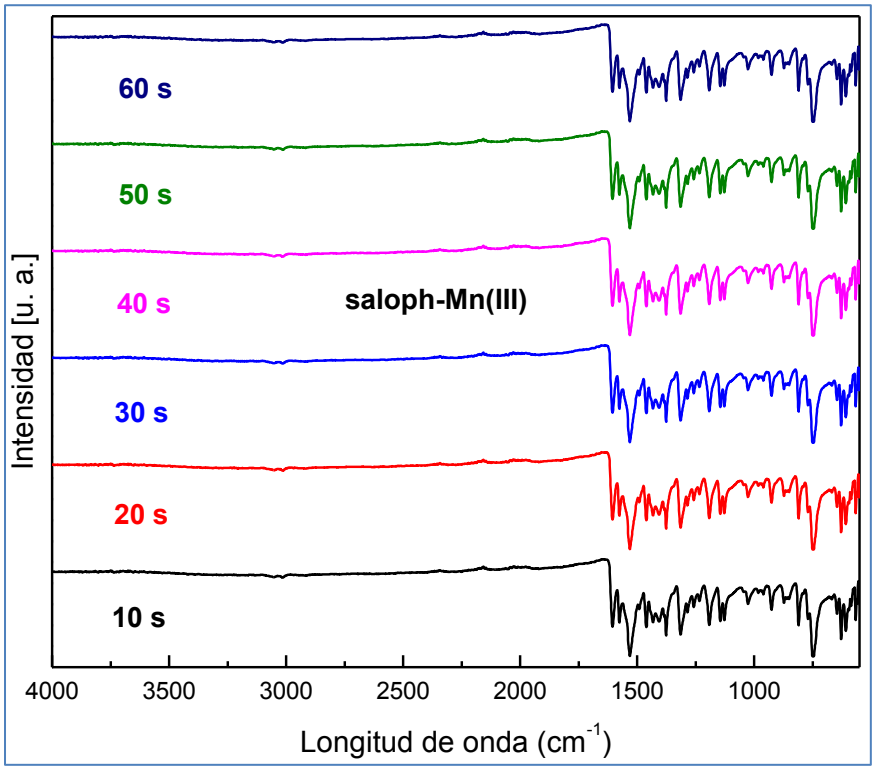


Figura 4. Espectros de infrarrojo del complejo saloph-Mn(III) a diferentes tiempos de síntesis.

Al igual que se observó en los espectros de masas, los espectros de infrarrojo indican que los productos de reacción obtenidos a los distintos tiempos de síntesis son el mismo compuesto: saloph-Mn(III). La señal ubicada alrededor de los 1620 cm^{-1} es debida a la vibración de tensión del enlace -C=N- correspondiente al grupo imino, característico de una base de Schiff. Otra señal importante es la que se encuentra a 1550 cm^{-1}, que corresponde a la vibración de tensión del enlace C-O presente en el anillo aromático y que inicialmente formaba el grupo -OH del saliciladehído. Estas señales se encuentran desplazadas a longitudes de onda más bajas comparadas con las mismas señales presentes en el ligando libre, esto es debido a la presencia del catión Mn^{+3}, el cual hace más pesados dichos enlaces y con ello varía la energía necesaria para hacerlos vibrar. La señal a los 550 cm^{-1} es

atribuida a la vibración de tensión del enlace M-O, confirmando de esta manera la coordinación del Mn^{3+} al ligando orgánico formado *insitu*.

Las reacciones multicomponente han ganado auge en los últimos tiempos debido a la reducción de etapas de síntesis. Por su parte, la búsqueda de métodos de síntesis alternos a los tradicionales está en constante aumento por la necesidad de hacer más eficiente el uso de la energía empleada en la obtención de diversos productos. Tanto la síntesis de ligandos orgánicos como de sus complejos metálicos en los métodos tradicionales a menudo requieren de ciertas condiciones para poder llevarse a cabo, entre ellas el uso de catalizadores, específicamente catalizadores ácidos. En la síntesis reportada en este trabajo hubo ausencia de algún ácido como catalizador, sin embargo, el posible mecanismo que explica la formación en una sola etapa del complejo saloph-Mn(III) indica que se forma inicialmente el ligando orgánico, lo que libera además moléculas de agua como producto secundario de la síntesis. Entonces, las moléculas de agua en combinación con el etanol de la síntesis y el acetato proveniente de la fuente del metal (acetato de manganeso) provocan la formación *insitu* de ácido acético, que finalmente hace posible la síntesis en una sola etapa de reacción. Los análisis de espectrometría de masas y de espectroscopía de IR fueron hechos sobre los productos de reacción recuperados por filtración a vacío, por lo que no fue posible la identificación del ácido acético formado. Sin embargo, tras la síntesis y previo a la purificación de los productos de reacción, fue posible percibir el aroma característico del ácido acético. La técnica de cromatografía en capa fina se realizó sobre las mezclas de reacción (antes de purificar el producto) y se confirmó de esta manera la presencia de ácido acético, lo que sustenta la formación *insitu* del ácido para ayudar a la síntesis en una sola etapa del complejo saloph-Mn(III). Por otro lado, la reducción significativa de los tiempos de síntesis comparados con los métodos tradicionales de calentamiento a reflujo (10 segundos contra 5 horas de reacción) se fundamentan con el principio de funcionamiento de las ondas electromagnéticas en el rango de las microondas. Las microondas interactúan con cada una de las moléculas con las que entran en contacto, siempre y cuando éstas tengan un momento dipolar significativo, como en el caso de los reactivos empleados y el medio de reacción (EtOH). Las moléculas polares tratan de alinearse con la parte positiva y la parte negativa de las ondas electromagnéticas, esta alineación ocurre durante milésimas de segundo, seguida de un relajamiento de las moléculas, repitiéndose durante todo el tiempo de exposición de los reactivos a las microondas. Las moléculas vibran miles de veces por segundo durante la interacción con las ondas electromagnéticas, provocando que absorban gran cantidad de energía cinética y, en consecuencia, la generación de calor. Si bien el calor es empleado como fuente para superar la barrera energética de reactivos a la formación de productos, en la síntesis por microondas es tan solo un efecto secundario de algo más importante que son las vibraciones de las moléculas de los reactivos, ya que con ellos se generan choques más eficientes de las moléculas de los reactivos con la consecuente ruptura de enlaces y formación de nuevos enlaces en los productos que se forman.

El método de síntesis empleado es, por lo tanto, un método eficiente, alterno a los tradicionales en la síntesis de complejos metálicos de bases de Schiff, con el que se logra la reducción drástica de los tiempos de síntesis y se evita la generación de subproductos de reacción y el desperdicio de reactivos empleados al dar preferencia a la formación de un único producto de reacción en rendimientos >99%. El método empleado puede ser escalable a ligandos orgánicos de bases de Schiff funcionalizados con diferentes grupos orgánicos, así como al uso de más cationes metálicos, preferentemente metales de transición.

CONCLUSIONES

En este trabajo se llevó a cabo la síntesis del complejo saloph-Mn(III) empleando radiación por microondas y en una sola etapa de reacción. El método de síntesis resultó ser altamente eficiente desde el punto de vista energético, de tiempos de reacción y ambiental ya que se redujeron los tiempos de reacción y el número de etapas necesarias para la síntesis del complejo metálico, con la consecuente disminución de la energía empleada habitualmente en este tipo de síntesis tradicional. Los análisis (espectrometría de masas y espectroscopía de infrarrojo) indican que existe solamente la formación del complejo saloph-Mn(III), por lo que no hay generación de residuos (subproductos o reactivos sin reaccionar) en el método de síntesis. La formación *insitu* de ácido acético sería la

responsable de llevar a cabo la síntesis en una sola etapa del complejo saloph-Mn(III). El método de síntesis reportado podría ampliarse utilizando ligandos orgánicos de bases de Schiff funcionalizados con diferentes grupos orgánicos y de otros cationes metálicos (metales de transición) y se esperaría tener los mismos resultados.

BIBLIOGRAFÍA

1. O. Economics, “The global chemical industry: Catalyzing growth and addressing our world’s sustainability challenges”. Report for ICCA, 2019.
2. C. Early, T. Slavin. “Chemicals industry struggles to kick its fossil fuel habit”, Reuters, 2025.
3. S. Gunasekaran, F.A. Nasr, M. F. Alotibi, R. Rajasekar, R. Srinivasan, M. Al-Zharani, F. I. Alghuraybi, T. Perumal, “Integrating green chemistry with biomedical innovation: the role of biocompatible ionic liquids and ionic liquid nanoparticles in therapeutic applications”, RSC Advances, Vol. 16, 8, 2026, pp. 6809-6843.
4. J. L. Shamshina, S. P. Kelley, G. Gurau, R.D. Rogers, “Chemistry: Develop ionic liquid drugs”, Nature, 528, 2015, pp. 188-189.
5. K. T. Nguyen, M. Sukwattanasinitt, S. Wacharasindhu, “One-pot synthesis of 2-aminoquinazolinones through sequential microwave irradiation and electrosynthesis”, Cur. Res. Green and Suit. Chem., Vol. 12, 100512, 2026, pp. 1-10.
6. F. Mendoza, E. Reguera, R. Ruíz, “Proceso para la obtención de catalizadores quirales de salen de Mn(III) asistida por microondas para la epoxidación asimétrica de alquenos”, Título de patente No. 407767, Instituto Mexicano de la Propiedad Industrial, 2023.
7. F. Mendoza, E. Reguera, R. Ruíz, “Proceso de obtención de ligandos orgánicos de bases de Schiff sintetizadas por microondas”, Título de patente No.413990, Instituto Mexicano de la Propiedad Industrial, 2024.
8. A. D. Garnovskii, I. S. Vasil’chenko, “Rational design of metal coordination compounds with azomethine ligands”, Russ. Chem. Rev., Vol. 71, 11, 2002, pp. 943-968.
9. P. Ghosh, S.K. Dey, M.H. Ara, K. Karim, A. Islam, “A review on synthesis and versatile applications of some selected Schiff bases with their transition metal complexes”, Egypt. J. Chem., 62 (Special Issue (Part 2), 2019, pp. 523-547.
10. R. Mladenova, M. Ignatova, N. Manolova, T. Petrova, I. Rashkov, “Preparation, characterization and biological activity of Schiff base compounds derived from 8-hydroxyquinoline-2-carboxaldehyde and Jeffamines ED”, Eur. Polym. J., Vol. 38, 5, 2002, pp. 989-999.
11. J. Hanson, “Synthesis and Use of Jacobsen's Catalyst: Enantioselective Epoxidation in the Introductory Organic Laboratory”, J. Chem. Educ., Vol. 78, 9, 2001, pp. 1266-1270.

EL SÍNDROME METABÓLICO INDUCIDO POR DIETAS HIPERGLUCÍDICAS ALTERA LA MICROBIOTA INTESTINAL DE LAS RATAS LONG-EVANS

Armando Cabrera Ronquillo[1], Dalia Molina Romero[1], Berenice Venegas Meneses[1], Lorena Milflores Flores[1], Israel Aguilar Ordoñez[2]

[1]Facultad de Ciencias Biológicas-Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
[2] instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey
lorena.milflores@correo.buap.mx

RESUMEN

El Síndrome Metabólico (SM) está estrechamente vinculado a factores extrínsecos como las dietas occidentales, las cuales pueden desencadenar disbiosis intestinal, alterando la producción de metabolitos protectores como los ácidos grasos de cadena corta (AGCC) para mantener la salud intestinal. Para estudiar este fenómeno, se evaluaron a 8 ratas hembra Long Evans divididas en dos grupos durante 3 meses: uno alimentado con dieta normoglúcida (DNG) y otro con dieta hiperglúcida (DHG). Los resultados indican que las evaluaciones zoométricas mostraron que la dieta hiperglúcida no indujo obesidad macroscópica significativa, pero el análisis de secuenciación del gen ARNr 16S de longitud completa de las heces fecales reveló alteraciones microbiológicas. El grupo con SM presentó un aumento drástico en la relación *Firmicutes*/*Bacteroidetes*, con una proliferación dominante de los géneros *Blautia* y *Allobaculum*, y la desaparición de *Anaerobiospirillum*, predominante en el grupo control. En conclusión, el síndrome metabólico inducido por dieta altera la microbiota intestinal hacia un perfil disbiótico, afectando la homeostasis del huésped independientemente del desarrollo de obesidad fenotípica.

INTRODUCCIÓN

El Síndrome Metabólico (SM) comprende un fenotipo multifactorial complejo que surge de la interacción dinámica entre factores intrínsecos del huésped, tales como la genética y la microbiota intestinal, y factores extrínsecos, entre los que destacan la dieta y el estilo de vida (Wang et al., 2020). Se caracteriza por la presencia de múltiples factores de riesgo, que incluyen la hipertensión, la dislipidemia, la intolerancia a la glucosa y la resistencia a la insulina, condiciones que se originan predominantemente por alteraciones en el metabolismo de carbohidratos y lípidos en correlación con la obesidad (Treviño et al., 2017; Ivanova et al., 2020). El síndrome metabólico se reconoce como un precursor significativo de la diabetes tipo 2 (DM2), así como de diversas enfermedades cardiovasculares y cerebrovasculares (Lin et al., 2014).

Los estilos de vida poco saludables son fundamentales en la etiología del síndrome metabólico, destacándose el consumo crónico de dietas occidentales altas en calorías, ricas en grasas saturadas y carbohidratos simples, junto con un estilo de vida sedentario como los factores de riesgo predominantes (Díaz et al., 2021).

Se ha evidenciado que el trastorno de la microbiota intestinal constituye un factor de riesgo importante en el desarrollo del síndrome metabólico. Los individuos que padecen esta condición presentan un desequilibrio en su microbiota, lo que desencadena una respuesta inflamatoria de bajo grado, que compromete la integridad de la barrera intestinal. La microbiota comprende la comunidad ecológica de microorganismos comensales, simbióticos y patógenos que comprenden el cuerpo humano (Sochocka et al., 2019). En el intestino principalmente, se compone de varias especies de microorganismos, incluidas bacterias, arqueas levaduras y virus (Laterza et al., 2016). Es importante destacar que la microbiota de humanos y modelos murinos comparten similitudes a nivel de Filos, en ambos organismos están presentes Firmicutes y Bacteroidetes, lo cual valida el uso de modelos murinos para el estudio de enfermedades metabólicas (Ley et al., 2005).

La composición y diversidad de la microbiota en estado de equilibrio (eubiosis) está determinada por una interacción compleja de factores. Entre los factores internos destacan las interacciones microbianas, la genética del huésped, la temperatura ambiental, el pH intestinal, los ácidos biliares, el peristaltismo, las secreciones del huésped y las respuestas inmunes. Por otro lado, los factores externos como la dieta, los hábitos alimentarios y la carga microbiana del entorno también modulan de forma decisiva la arquitectura de esta comunidad (Thakkar et al., 2023; Tyszkowski & Mehrzad, 2023).

La microbiota desempeña funciones fisiológicas como la producción de algunos metabolitos microbianos que generan un impacto positivo en el huésped, como la síntesis de vitaminas y la producción de reguladores que mantienen la integridad y función de la barrera intestinal, sin embargo, el potencial metabólico es dual, ya que alteraciones en su función pueden generar citotoxinas, genotoxinas e inmunotoxinas (Wang et al., 2020).

La disbiosis se define como una alteración en la composición y función de la microbiota, donde la comunidad de microorganismos comensales y simbióticos es reemplazada por una variedad disfuncional que puede promover estados patológicos (Tyszkowski & Mehrzad, 2023).

La etiología de la disbiosis es multifactorial, entre los determinantes principales se encuentran factores intrínsecos del huésped, como la genética y la edad, y factores extrínsecos modificables, como el estilo de vida occidental y la exposición a fármacos (Hasan & Yang, 2017). Específicamente, los hábitos alimentarios y la ingesta calórica actúan como moduladores rápidos de la composición microbiana (Thakkar et al., 2023; Turnbaugh et al., 2006).

La función metabólica de la microbiota se ejerce principalmente a través de la fermentación de carbohidratos no digeribles generando metabolitos bioactivos conocidos como Ácidos Grasos de Cadena Corta (AGCC). Los tres principales AGCC son el acetato, el propionato y el butirato (Ríos-Covián et al., 2016).

Estos metabolitos actúan como moléculas de señalización y sustratos energéticos. El acetato y el propionato son absorbidos hacia la circulación portal para ser metabolizados en tejidos periféricos y en el hígado, mientras que, el butirato desempeña un rol local crítico como la principal fuente de energía para los colonocitos aportando hasta el 70% de sus requerimientos energéticos, el butirato promueve la integridad epitelial y la expresión de proteínas como la ocludina y la zonulina que regulan la permeabilidad (Roediger, 1980; Peng et al., 2009).

TEORÍA

El reconocimiento de la microbiota intestinal como un factor determinante en la homeostasis energética comenzó con los estudios Bäckhed et al. (2004), quienes demostraron que los ratones libres de gérmenes (*germ-free*) estaban protegidos contra la obesidad inducida por la dieta, sugiriendo que la microbiota es un factor ambiental indispensable para el almacenamiento eficiente de energía en el huésped.

Se ha postulado que la microbiota actúa como un "segundo genoma", y su alteración constituye un factor de riesgo directo para el desarrollo de trastornos metabólicos, impulsando la búsqueda de nuevas estrategias terapéuticas basadas en la modulación bacteriana (Rinninella et al., 2019).

En cuanto a taxones específicos, estudios de asociación metagenómica han identificado que, en condiciones de Síndrome Metabólico y Diabetes Tipo 2, existe una reducción consistente de bacterias productoras de ácidos grasos de cadena corta. La disminución de estas poblaciones indica una alteración en la integridad de la barrera intestinal y una pérdida de la protección antiinflamatoria natural del intestino (Qin et al., 2012; Unger et al., 2016).

Se ha reportado que, en modelos murinos la alteración de la relación Firmicutes y Bacteroidetes permite estudiar cómo la ausencia de una microbiota funcional impacta la fisiología del huésped,

diferenciando los efectos microbianos de los puramente dietéticos en la patogénesis del síndrome metabólico (Reikvam et al., 2011).

PARTE EXPERIMENTAL

Se utilizó un total de 8 ratas hembra de la cepa Long Evans recién destetadas, provenientes del Bioterio Claude Bernard quienes fueron mantenidas en condiciones controladas de iluminación (ciclos 12/12 h luz/oscuridad) y temperatura (22 ± 2 °C). El manejo de los animales se realizó siguiendo estrictamente las normas establecidas por la Ley Mexicana de Protección Animal y la NOM-062-ZOO-1999 (Especificaciones Técnicas para la Producción, Cuidado y Uso de los Animales de Laboratorio).

Los individuos fueron alojados en cajas de acrílico con acceso a agua y alimento *ad libitum*. Fueron asignados aleatoriamente a uno de los dos grupos experimentales.

Ratas hembra con dieta normoglúcida: Individuos alimentados durante 3 meses con una dieta estándar balanceada (LabDiet 5001) con un aporte energético normoglúcido (4.87 g de carbohidratos.

Ratas hembra con dieta hiperglúcida: Individuos alimentados durante 3 meses con una Dieta Hiperglúcida (DHG) con aporte energético de 7.14g de carbohidrato (LabDiet 5053), que es el tiempo necesario para inducir el síndrome metabólico (Treviño *et al.* 2015).

Se realizó una evaluación zoométrica una vez por semana para determinar los siguientes parámetros en cada individuo: peso corporal, talla y perímetro abdominal.

Talla (Longitud total): Se utilizó una cinta métrica antropométrica, siguiendo las recomendaciones de Cossio – Bolaños y colaboradores, tomando como puntos de referencia la base de la cola a la punta de la nariz (Cossio-Bolaños *et al*., 2010).

Perímetro abdominal: Se utilizó una cinta métrica antropométrica, para la medición, el individuo fue sujetado y posteriormente se colocó la cinta métrica en la parte media del abdomen o en su defecto la más voluminosa del animal y se tomaron como límites de referencia la zona del diafragma (límite superior) y el pliegue de las piernas (límite inferior).

Con los parámetros zoométricos obtenidos se estimó la composición corporal de un modelo bicompartimental mediante:

Índice de masa corporal (IMC): Se calculó mediante el índice de Lee para modelos murinos (Rogers & Webb, 1980):

$$IMC = \frac{peso(g)}{talla^2\ (cm^2\ )}$$

$$IMC = \frac{peso(g)}{talla^2\ (cm^2\ )}$$

Porcentaje de grasa corporal: Se calculó de acuerdo con el índice de Lee para modelos murinos (Rogers & Webb, 1980):

$$\text{Índice de Lee} = \frac{\sqrt[3]{peso\ (g)}}{talla\ (cm)}\ x\ 100$$

Masa libre de grasa: Se realizó una estimación de los componentes músculo y hueso. Se determinó mediante la fórmula sugerida por Cossio-Bolaños y colaboradores (Cossio-Bolaños et al., 2010):

MLG = 19.9 + (0.453 × peso corporal (g)) + (0.114 × $edad(días)$)

Masa grasa: Se realizó una estimación del tejido adiposo. Se determinó mediante la fórmula sugerida por Cossio-Bolaños y colaboradores (Cossio-Bolaños et al., 2010):

$$MG = -31.6 + (0.361 \times peso\ corporal\ (g)) - (0.345 \times edad\ (días))$$

Al finalizar el tratamiento dietético, se procedió a la eutanasia por decapitación e, inmediatamente, se extrajo sangre terminal mediante punción cardíaca para la obtención de suero. Posteriormente, se realizó una laparotomía para exponer el tracto gastrointestinal y recolectar el contenido luminal (heces) directamente del colon distal. Las muestras se almacenaron a -20 °C hasta su procesamiento.

La extracción de ADN total a partir de las heces se llevó a cabo con el kit comercial Quick-DNA™ Fecal/Soil Microbe Miniprep Kit (Zymo Research, CA, EUA), siguiendo las instrucciones del fabricante con modificaciones para optimizar la lisis. La empresa SeqCenter realizó la secuenciación del gen ARNr 16S en su longitud completa (V1-V9). Finalmente, el análisis de las secuencias de amplicones se ejecutó mediante el flujo de trabajo *nf-core/ampliseq*.

RESULTADOS

Se observó que el grupo alimentado con dieta hiperglúcida (DHG) durante 3 meses desarrollo Síndrome metabólico, sin embargo, no indujo un incremento en el Índice de Lee, IMC, ni en la acumulación de masa grasa o magra respecto al grupo control (DNG). De hecho, los individuos del grupo DHG presentaron una tendencia hacia valores ligeramente menores respecto al grupo control DNG, a pesar de que el fenotipo del Síndrome Metabólico en humanos se asocia de forma directa con la obesidad macroscópica.

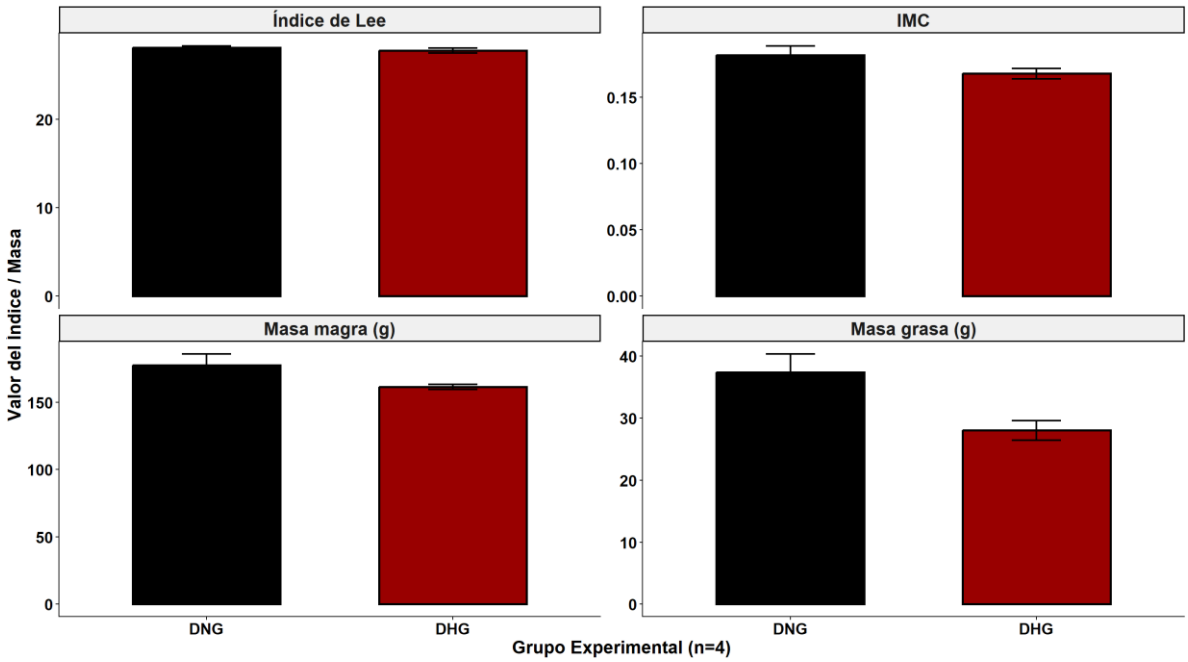


Figura 1. Evaluación de parámetros zoométricos y de composición corporal en ratas Long Evans. Se compara el grupo control alimentado con Dieta Normoglúcida (DNG, barras negras) frente al grupo Síndrome Metabólico (SM) con Dieta Hiperglúcida (DHG, barras rojas).

Abundancia relativa a nivel de filo

La asignación taxonómica a nivel de filo reveló una estructura comunitaria dominada por cuatro taxones principales en ambos grupos experimentales, grupo Control y síndrome metabólico:

Firmicutes (ahora denominado Bacillota), Bacteroidota, Pseudomonadota (antes Proteobacteria) y Actinomycetota. (Figura 2).

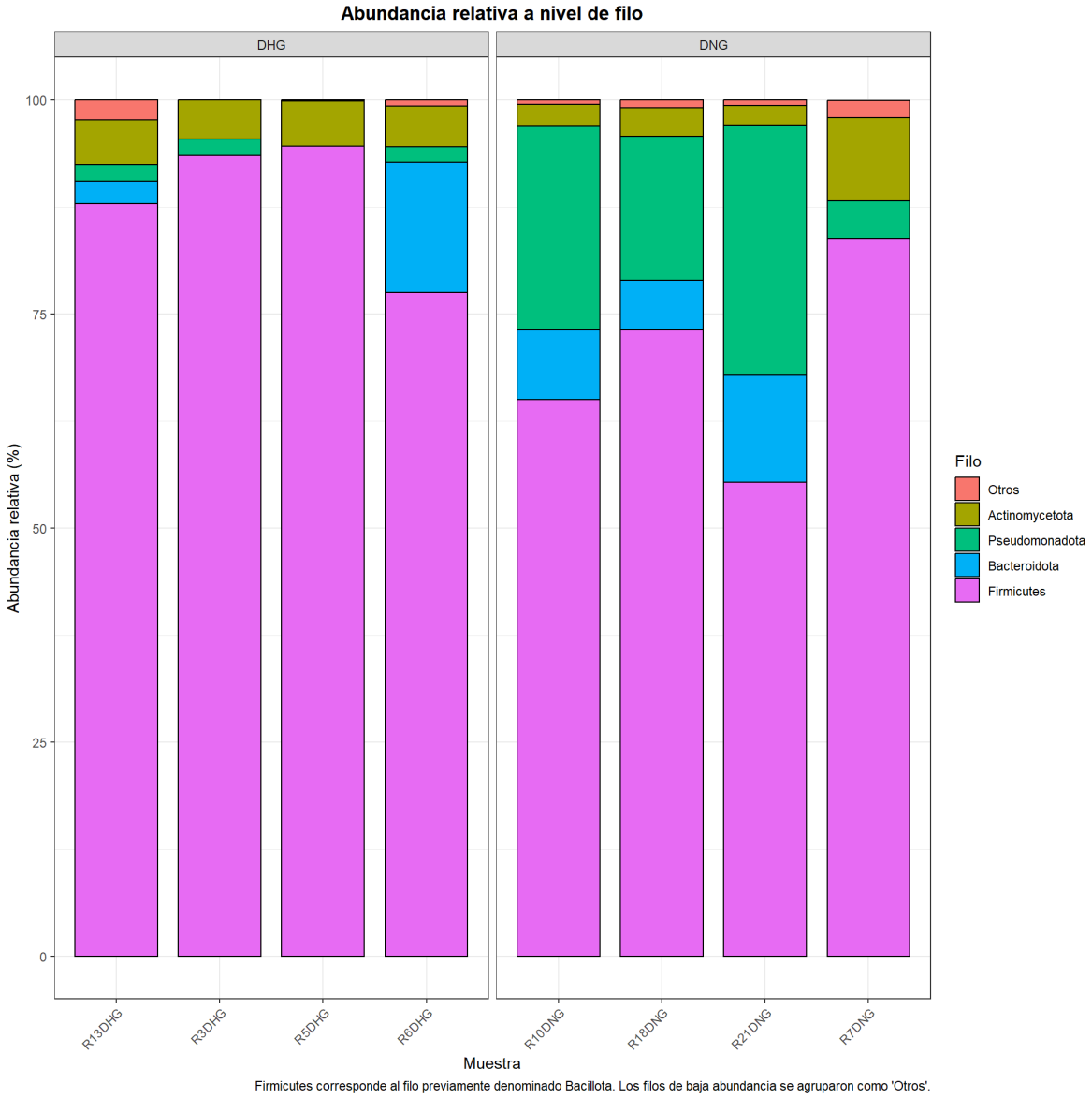


Figura 2. Abundancia relativa a nivel de filo en ratas hembra control (DNG) y ratas hembra con Síndrome metabólico (DHG). Se muestran los cuatro filos más abundantes, aquellos de abundancia menor fueron clasificados en la categoría “otros”.

En el grupo con síndrome metabólico (DHG), se observó una dominancia exacerbada del filo Firmicutes (barras violetas), el cual representó la vasta mayoría de las lecturas en todas las muestras, superando visualmente el 80-90% de la abundancia relativa en muestras como R3DHG y R5DHG.

En contraste, el grupo control (DNG) presentó un perfil más equitativo y diverso. Un hallazgo notable es la presencia significativa del filo Pseudomonadota (antes Proteobacterias, barras verdes) en los animales sanos (especialmente en R10, R18 y R21), en contraste, este filo fue reducido en el grupo de síndrome metabólico (SM o DHG). Del mismo modo, el filo Bacteroidota (barras azules) mostró una presencia constante en el grupo sano, sin embargo; en el grupo SM (DHG), aunque persiste (ej. R13DHG y R6DHG), su abundancia relativa se ve comprimida por la expansión de Firmicutes.

Abundancia relativa a nivel de género

A nivel de género también se destacó una alteración en la microbiota de las ratas del grupo control (DNG), se observó que el género *Anaerobiospirillum* (perteneciente a la familia Succinivibrionaceae) es el más abundante, que se observa como el bloque predominante en color naranja (especialmente en R10, R18 y R21). En contraste, en el grupo Síndrome Metabólico (DHG), este género sufrió una reducción severa, volviéndose prácticamente indetectable.

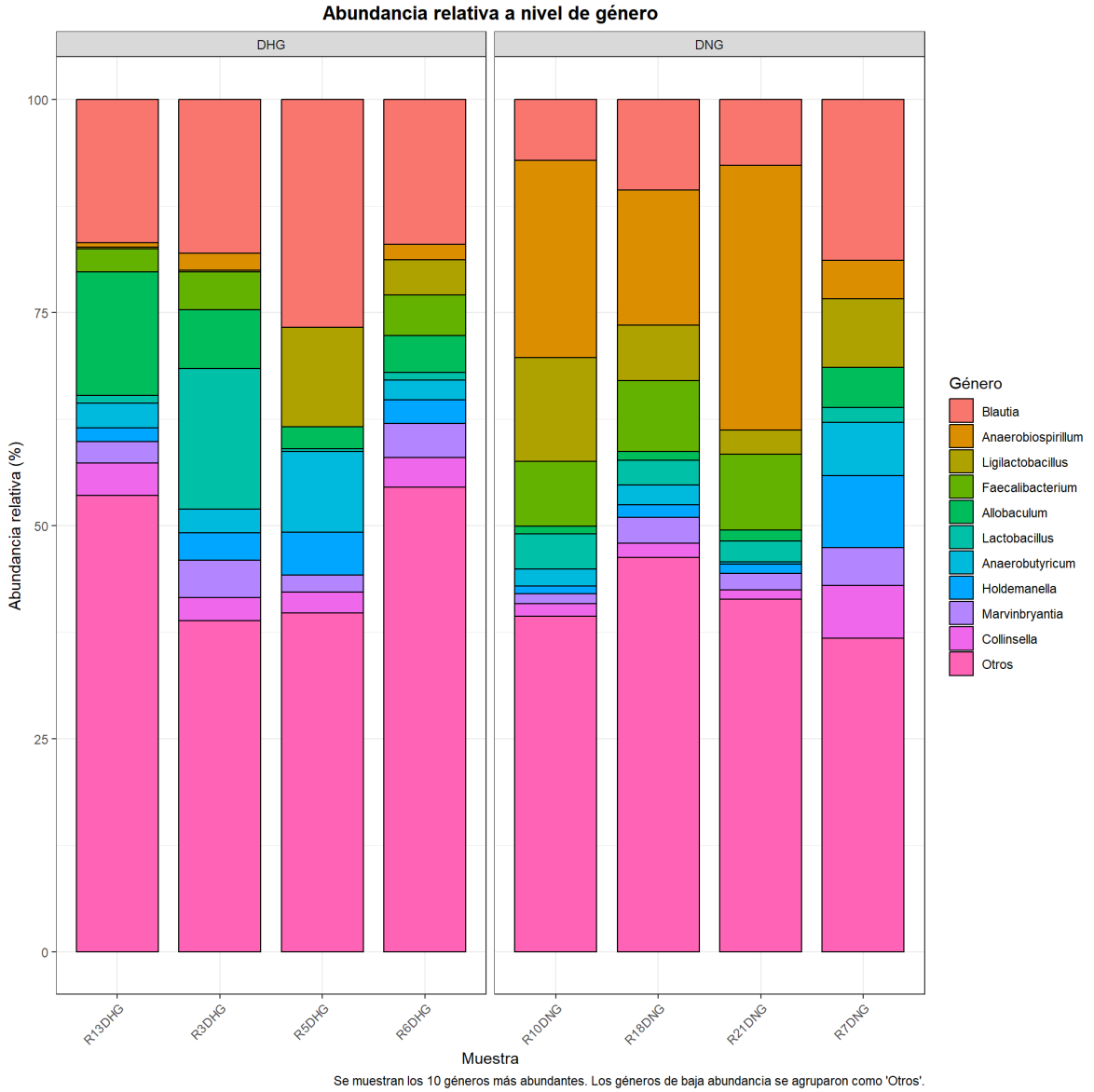


Figura 3. Abundancia relativa a nivel de género en ratas hembra control (DNG) y ratas hembra con Síndrome metabólico (DHG). Se muestran los diez géneros más abundantes, aquellos de abundancia menor fueron clasificados en la categoría “otros”.

En el grupo Síndrome metabólico (DHG), el nicho ecológico vacante fue ocupado principalmente por el género *Blautia* (barras color salmón). Mientras que en los animales controles su presencia es moderada, el género *Blautia* es dominante en la mayoría de los individuos con SM (ej. R13DHG, R5DHG).

También, se identificó un incremento notable del género *Allobaculum* (familia Erysipelotrichaceae, barras verdes oscuro) en el grupo SM (DHG), particularmente visible en las muestras R13DHG y

R3DHG. Este género es poco abundante en las ratas sanas de este estudio, consolidándose como un segundo marcador distintivo de la disbiosis inducida por la dieta.

Los resultados obtenidos demuestran que el síndrome metabólico ejerce un efecto determinante sobre la composición de la microbiota intestinal. Específicamente, se observó que los animales con SM presentaron un incremento marcado en la relación Firmicutes/Bacteroidetes, en comparación con los animales control que recibieron una dieta normoglucídica. Este aumento indica un estado de disbiosis intestinal, caracterizado por la expansión de Firmicutes y la reducción de Bacteroidetes, un patrón comúnmente asociado con alteraciones metabólicas como resistencia a la insulina y desarrollo de síndrome metabólico. En contraste, las muestras provenientes de animales control con dieta normoglucídica mantuvieron proporciones equilibradas entre ambos filos bacterianos, lo que sugiere un microbioma más estable y compatible con un metabolismo saludable.

CONCLUSIONES

El síndrome metabólico altera la microbiota intestinal de ratas hembra. En animales con esta condición, se evidenció una disbiosis caracterizada por un marcado incremento en la relación Firmicutes/Bacteroidetes, patrón asociado a resistencia a la insulina. En contraste, los animales control alimentados con dieta normoglucídica mantuvieron proporciones bacterianas equilibradas, indicando un microbioma estable y un metabolismo saludable.

BIBLIOGRAFÍA

1. Diaz, A., Muñoz-Arenas, G., Venegas, B., Vázquez-Roque, R., Flores, G., Guevara, J., & Treviño, S. (2021). Metforminium decavanadate (MetfDeca) treatment ameliorates hippocampal neurodegeneration and recognition memory in a metabolic syndrome model. Neurochemical Research, 46, 1151-1165.
2. Ivanova, N., Liu, Q., Agca, C., Agca, Y., Noble, E. G., Whitehead, S. N., & Cechetto, D. F. (2020). White matter inflammation and cognitive function in a co-morbid metabolic syndrome and prodromal Alzheimer's disease rat model. Journal of neuroinflammation, 17, 1-18.
3. Laterza, L., Rizzatti, G., Gaetani, E., Chiusolo, P., & Gasbarrini, A. (2016). The gut microbiota and immune system relationship in human graft-versus-host disease. *Mediterranean journal of hematology and infectious diseases*, *8*(1).
4. Ley, R. E., Bäckhed, F., Turnbaugh, P., Lozupone, C. A., Knight, R. D., & Gordon, J. I. (2005). Obesity alters gut microbial ecology. *Proceedings of the national academy of sciences*, *102*(31), 11070-11075.
5. Lin, C. H., Chiang, S. L., Tzeng, W. C., & Chiang, L. C. (2014). Systematic review of impact of lifestyle-modification programs on metabolic risks and patient-reported outcomes in adults with metabolic syndrome. Worldviews on Evidence-Based Nursing, 11(6), 361-368.
6. Peng, L., Li, Z. R., Green, R. S., Holzman, I. R., & Lin, J. (2009). Butyrate enhances the intestinal barrier by facilitating tight junction assembly via activation of AMP-activated protein kinase in Caco-2 cell monolayers. *The Journal of Nutrition*, 139(9), 1619-1625.
7. Qin, J., Li, Y., Cai, Z., Li, S., Zhu, J., Zhang, F., ... & Wang, J. (2012). A metagenome-wide association study of gut microbiota in type 2 diabetes. *Nature*, 490(7418), 55-60.
8. Reikvam, D. H., Erofeev, A., Sandvik, A., Grcic, V., Jahnsen, F. L., Gaustad, P., ... & Skanland, S. S. (2011). Depletion of murine intestinal microbiota: effects on gut mucosa and epithelial gene expression. *PLoS One*, 6(3), e17996.
9. Rinninella, E., Raoul, P., Cintoni, M., Franceschi, F., Miggiano, G. A. D., Gasbarrini, A., & Mele, M. C. (2019). What is the healthy gut microbiota composition? A changing ecosystem across age, environment, diet, and diseases. *Microorganisms*, *7*(1), 14.

10. Ríos-Covián, D., Ruas-Madiedo, P., Margolles, A., Gueimonde, M., de Los Reyes-Gavilán, C. G., & Salazar, N. (2016). Intestinal short chain fatty acids and their link with diet and human health. *Frontiers in Microbiology*, 7, 185.
11. Roediger, W. E. (1980). Role of anaerobic bacteria in the metabolic welfare of the colonic mucosa in man. *Gut*, 21(9), 793-798.
12. Sochocka, M., Donskow-Łysoniewska, K., Diniz, B. S., Kurpas, D., Brzozowska, E., & Leszek, J. (2019). The gut microbiome alterations and inflammation-driven pathogenesis of Alzheimer's disease - a critical review. *Molecular neurobiology*, *56*, 1841-1851
13. Thakkar, A., Vora, A., Kaur, G., & Akhtar, J. (2023). Dysbiosis and Alzheimer's disease: role of probiotics, prebiotics and synbiotics. *Naunyn-Schmiedeberg's Archives of Pharmacology*, *396*(11), 2911-2923
14. Treviño, S., Vázquez-Roque, R. A., López-López, G., Perez-Cruz, C., Moran, C., Handal-Silva, A., & Díaz, A. (2017). Metabolic syndrome causes recognition impairments and reduced hippocampal neuronal plasticity in rats. *Journal of chemical neuroanatomy*, *82*, 65-75.
15. Turnbaugh, P. J., Ley, R. E., Mahowald, M. A., Magrini, V., Mardis, E. R., & Gordon, J. I. (2006). An obesity-associated gut microbiome with increased capacity for energy harvest. *Nature*, 444(7122), 1027-1031.
16. Tyszkowski, R., & Mehrzad, R. (2023). Inflammation: a multifaceted and omnipresent phenomenon. In *Inflammation and Obesity* (pp. 19-30). Academic Press.
17. Unger, M. M., Spiegel, J., Dillmann, K. U., Grundmann, D., Philippeit, H., Bürmann, J., & Schäfer, K. H. (2016). Short chain fatty acids and gut microbiota differ between patients with Parkinson's disease and age-matched controls. *Parkinsonism & related disorders*, *32*, 66-72.
18. Wang, P. X., Deng, X. R., Zhang, C. H., & Yuan, H. J. (2020). Gut microbiota and metabolic syndrome. *Chinese Medical Journal*, *133*(7), 808-816.Wang, PX, Deng, XR, Zhang, CH y Yuan, HJ (2020).

ESTIMACIÓN DE LA DL_{50} PARA CÉLULAS HaCaT EXPUESTAS A RADIACIONES UV TIPO

Consuelo Letechipía de León[1], Claudia Erika Pro-Martínez[1], José Arturo Enríquez Aragón[2], Luis Martín García Ortíz[1], Sergio Hugo Sánchez Hernández[2], Erika Patricia Azorín Vega[3]

[1]Universidad Autónoma de Zacatecas, Unidad, Académica de Estudios Nucleares, [2]Universidad Autónoma de Zacatecas, Unidad Académica de Ciencias Biológicas, [3]Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares.

cldeleon@uaz.edu.mx

RESUMEN

El Sol es la fuente de emisión natural de radiación Ultravioleta (UVA, UVB, UVC), este tipo de radiación electromagnética está comprendida entre una longitud de onda de 100 y 400 nm. Los rayos UVC no logran llegar a la superficie terrestre ya que no son absorbidos en la atmósfera, sin embargo, la exposición a esta puede darse por fuentes artificiales como lámparas germicidas, arcos de soldadura autógena entre otras. Además, son capaces de inducir daño celular al ADN, a las proteínas y a los lípidos en consecuencia se originan efectos nocivos en la piel con la presencia de eritemas, quemaduras y eventualmente cáncer en piel. El objetivo fue estimar la DL_{50} de la línea celular HaCaT expuesta a radiación UVC empleando una lámpara germicida (Steril-aire/serie DE, 400MM). Para la metodología se utilizó como modelo biológico la línea celular HaCaT, la cual fue expuesta a diferentes dosis (95.6, 191.2, 286.8 y 382.4 mJ/cm^2), se determinó la viabilidad celular mediante la técnica de azul de tripán para cada muestra y se calculó la $LD_{50,}$ las muestras fueron evaluadas por triplicado. Los resultados obtenidos se encontraron que la viabilidad celular disminuyó con el tiempo de exposición y su correspondiente dosis respectiva, el valor de la DL_{50} fue de 222.88 mJ/cm^2, este valor establece que a mayor la exposición de la radiación UVC causa el 50% de la mortalidad en células HaCaT (queratinocitos humanos) por lo que se considera importante para evaluaciones de problemas de salud en piel ocacionada por posibles fuentes de exposición laboral artificial.

INTRODUCCIÓN

La radiación electromagnética es una combinación de campos eléctricos y magnéticos oscilantes, que se propagan a través del espacio transportando energía de un lugar a otro (Cameron, 2009; González *et al*., 2011), ya sea en forma de ondas continuas o en forma de series de paquetes de energía llamados fotones (Hussein, 2005). Así mismo, al rango completo de longitudes de onda se denomina el espectro electromagnético, el cual está compuesto por radiaciones de menor longitud de onda, como los rayos gamma y los rayos X, pasando por la radiación ultravioleta, la luz visible y los rayos infrarrojos, hasta las ondas electromagnéticas de mayor longitud de onda, como son los microondas y las ondas de radio (Ghetti *et al*., 2006).

Para el caso de la radiación ultravioleta no ionizante ésta induce reacciones fotoquímicas sobre compuestos que absorben los fotones (Hussein, 2005; González et al., 2009), llamados cromóforos, los cuales pueden ser tanto los ácidos nucleicos como las proteínas (González et al., 2009). Aunque, la radiación UV al llegar a la piel, no solo es sometida a procesos de absorción sino también de dispersión.

La radiación UV puede ocasionar daño al ADN por diferentes mecanismos, ya sea por absorción directa o mediante lesiones indirectas las cuales provocan modificaciones al ADN que pueden tener consecuencias dañinas como la carcinogénesis (Ding, 2006; Wischermann et al., 2008; González et al., 2009; Ridley et al., 2009). La banda UVC puede causar eritema (quemadura solar), cataratas, cambios en la respuesta inmune, mutaciones y cáncer de piel (Mulero, 2004; Erofeev, 2006).

También, la radiación UV modifica las formas de vida terrestre y acuática, así como produce efectos negativos en materiales sintéticos y naturales. Sin embargo, en la actualidad existe una creciente

preocupación respecto las radiaciones UVC y UVB, ya que debido a la persistente y continua degradación de la capa de ozono de la estratosfera (Amron y Moy, 1991).Cconsiderar las fuentes sintéticas de radiación UVC antes mencionadas, sería interesante su estudio desde el punto de vista biológico. Es por eso que en este trabajo se cuantificó el daño producido por la exposición a radiación UVC en células de queratinocitos HaCaT, con el objeto de analizar a que dosis se produce una muerte celular considerable o total, mediante la determinación de la viabilidad. Todo esto como un comienzo para que en trabajos posteriores se continúe con la búsqueda de las aberraciones cromosómicas producidas por esta radiación, las cuales pueden llevar a mutaciones en las células germinales relacionadas con la aparición de enfermedades hereditarias o con enfermedades degenerativas y procesos carcinogénicos (Gutiérrez, 2003), en el personal ocupacional o accidentalmente expuesto a la radiación. En base a los hechos científicos conocidos sobre los usos de dichas fuentes antropogénicas en el ambiente laboral y sus problemas de salud.

TEORÍA

Radiación ultravioleta (UV)

La radiación UV es parte del espectro electromagnético con una longitud de onda comprendida aproximadamente entre los 400 a 10 nm, de los cuales se les considera como ionizantes al rango comprendido entre los 100 a 10 nm y como no ionizantes al rango comprendido entre los 400 a 100 nm (IARC, 2005). Su longitud de onda es más corta y es más energética que la radiación visible e infrarroja (Parisi et al.,2004). Según la Comisión Internacional del Alumbrado (CIE)1, se divide en tres regiones o bandas energéticas, la radiación UVA con una longitud de onda de 400 a 320 nm, la radiación UVB de 320 a 280 nm y la radiación UVC de 280 a 100 nm (CIE, 1987). Sin embargo, otros autores mencionan que el rango de UVC es de 280 a 200 nm (Fencl, 2007; Ridley et al., 2008; Wischermann et al., 2008). Sin embargo, de la radiación UV solar que logra penetrar a la superficie terrestre solo llega el 95% de los rayos UVA y el 5% de los rayos UVB, y en el caso de los rayos UVC éstos no logran penetrar a la superficie terrestre, ya que son absorbidos en su totalidad por el oxígeno molecular y las moléculas de ozono encontrados en la estratosfera (Hussein, 2005; Ghetti et al., 2006; Wischermann et al., 2008). También, la radiación UV contribuye a mantener la capa de ozono de la Tierra dado que es formada por la fotodisociación de las moléculas de oxígeno, dividiéndola en átomos de oxígeno individuales que se combinan con el oxígeno molecular (O_2) para crear ozono (O_3). De igual manera, la fotodisociación ocurre cuando se rompen, desarman o disocian las moléculas por medio de los fotones (Fencl, 2007).

Además del Sol, la radiación UV también es producida antropogénicamente, ya que cualquier material a una temperatura por encima de los 2,000ºC emite en el dominio del UV, como las lámparas de mercurio, los arcos de soldadura autógena, las lámparas halógenas con filamento de wolframio, las lámparas de gases nobles y los tubos fluorescentes. Igualmente, hay fuentes antropogénicas que están destinadas a emitir solo en el rango UVC tales como las lámparas de mediana o baja presión de mercurio, conocidas como lámparas germicidas (González et al., 2009). Asimismo, la radiación UV tiene utilidad en espectroscopia UV/Vis, en medicina como tratamiento de algunas enfermedades (Martí, 2002), en procesos de esterilización del aire, agua o equipo (Fencl, 2007), entre otros usos. Se ha comprobado que, el pico máximo de emisión de radiación UVC es a los 254 nm por tanto a esta longitud de onda presenta su mayor acción germicida, por lo que ha sido ampliamente estudiada en varios tejidos vegetales (Artes y Allende, 2005).

Mecanismos de interacción de la radiación UV con la materia.

Las partículas neutras presentan la propiedad de interactuar con los electrones atómicos (fotones) y con los núcleos (fotones y neutrones) en un solo proceso, desapareciendo luego el haz original. Las partículas cargadas, en cambio, lo hacen básicamente vía interacción Coulombiana tanto con electrones como con núcleos atómicos, en procesos de múltiples etapas. Por consiguiente, la radiación al atravesar la materia interactúa con ésta perdiendo energía en cada proceso de interacción (absorción, reflexión y/o transmisión). El número necesario de interacciones para detener las partículas depende, en una sustancia dada, de la energía inicial. Además, cuando la radiación

(onda o fotón) arranca uno o más electrones orbitales de los átomos de la sustancia que atraviesa, se produce la ionización. Si la transferencia de energía es pequeña, esta no es suficiente para expulsar electrones, por lo que no puede causar ionización que es lo que sucede con las radiaciones no ionizantes (Tubiana et al., 1990; Mozumder, 1999; González et al., 2009).

Para el caso de la radiación ultravioleta (no ionizante de 400-100 nm) ésta induce reacciones fotoquímicas en las moléculas biológicas principalmente sobre compuestos que absorben directamente los fotones (Hussein, 2005; González et al., 2009). La energía que éstos portan, es transferida a los compuestos denominados cromóforos (ácidos nucleicos y proteínas), siendo el triptófano y la tirosina los aminoácidos que absorben especialmente a la radiación UV. Existen otras biomoléculas cromóforas como son NADH, quinonas, flavinas, porfirinas, 7-dehidrocolesterol, y el ácido urocánico, además de la melanina, pequeños péptidos, hemoglobina y carotenos (González et al., 2009).

Por otro lado, la radiación UV al llegar a la piel es sometida a procesos de absorción y dispersión. La absorción es la pérdida de fotones cuando la energía es transformada dentro de la molécula biológica. La dispersión es la alteración de la dirección de la luz. El estrato corneo y la epidermis, absorben la luz en sus capas las cuales están bien equipadas con pigmentos para la protección de la radiación UV por absorción. La dermis en contraste tiene predominantemente la función de dispersar la radiación UV. El estrato corneo y la epidermis, también absorben la radiación UVB y UVC en la región cercana a los 275 nm, debido a la presencia de aminoácidos aromáticos. La dispersión en la dermis humana es debida a la presencia de las fibras de colágeno y varía en gran medida con la longitud de onda (Hussein, 2005).

Además, para poder producir efectos fisiológicos causados por radiación UV es necesario saber que éstos dependen tanto de la fuente emisora de radiación UV como de las características de la piel como son, el espesor de la epidermis, la concentración y distribución de los cromóforos (los cuales incluyen la melanina), el ADN, los aminoácidos, caroteno y ácidos urocánicos (Hussein, 2005; Cameron, 2009).

Efectos biológicos de la radiación UV

La radiación UV puede ocasionar daño al ADN por diferentes mecanismos, ya sea por absorción directa de la energía de los fotones o mediante lesiones indirectas donde los cromóforos endógenos transfieren la carga a otras moléculas (proteínas, lípidos, entre otras) las cuales provocan las modificaciones al ADN que pueden tener consecuencias dañinas como la carcinogénesis (Ding, 2006; Wischermann et al., 2008; González et al., 2009; Ridley et al., 2009).

Por otra parte, la radiación UV en general, es capaz de inducir varios tipos de daño al ADN, a las proteínas y a los lípidos, acompañado de consecuencias nocivas como eritemas, quemaduras y eventualmente cáncer de piel (Wischermann et al., 2008; Ravanat et al., 2001). Sin embargo, algunos efectos biológicos que se originen, dependerán de la banda energética de radiación UV de la que se trate.
Así para determinar este tóxico genético es necesario utilizar la dosis letal media o DL50 (Dosis Letal Media), la cual también es utilizada en fármacos y otros productos químicos en relación al porcentaje de una población afectada conforme aumenta la dosis, por eso se define por medio de la evaluación de la dosis-respuesta (Klaassen, 2003). Asimismo, indica la dosis que mata a un 50% de una población de animales (Sazonovas et al., 2010).

Igualmente, el daño causado por esta este tipo de radiación se puede determinar en base a la viabilidad. La viabilidad es la capacidad que tiene una célula para realizar sus procesos fisiológicos y bioquímicos especialmente en lo que respecta a su metabolismo y su capacidad de división. Sin embargo, existen numerosos ensayos de viabilidad de los cuales uno de los más usados es el Azul de Tripán o Azul de Tripano (Ramos et al., 2008), el cual es un colorante de exclusión (Figura 2.4), esto significa que es un colorante soluble en agua cuyos grupos cargados amino y sulfato le impiden

atravesar las membranas celulares; por tanto, tiñe solo las células muertas o dañadas (Luque y Herráez, 2006; Bergstrom et al., 2011).

PARTE EXPERIMENTAL

Cultivo y mantenimiento de la línea celular HaCaT

Fue utilizada la línea celular HaCaT de queratinocitos Humanos donada por la Escuela Nacional de Ciencias Químicas del IPN-México. Las células cultivadas en monocapa se pasaron por tripsinización a otro frasco de cultivo, con el objetivo de fraccionar la línea celular (Boukamp et al., 1988). Alcanzada la confluencia del 90%, se realizaron cultivos secundarios.

Proceso de Tripsinización: Se extrajo el medio de cultivo con una pipeta y se lavó dos veces con 4 ml de PBS 1X (PH 7.2) atemperado, se adicionaron 2 ml de Tripsina-Verseno (Tripsina al 0.05% y Verseno al 0.05% en solución salina de fosfatos sin Ca++ y Mg++) y se incubó a 37°C por 3-5 min. Fueron agregados 3 ml de medio D-MEM preparado con 10% de FBS para inactivar a la tripsina y detener la reacción. La suspensión celular fue transferida a un tubo cónico estéril de 14 ml con tapa y se centrifugó (centrifuga HERMELE Z300) a 1,200 rpm durante 5 min. Se decantó el sobrenadante, el pellet celular se resuspendió con 5ml de medio D-MEM preparado y se colocó en un frasco de cultivo de 25 cm^2 (Costar). Se incubó a 37ºC en una atmosfera con 95% aire / 5% CO^2 en una incubadora humidificada (Forma Specific Modelo 3110) (Ramos et al., 2008). Por otra parte, se sembraron 27 placas de cultivo de 60x15 mm (Costar), calculando una densidad de 10^7 células por placa y se adicionaron a cada un 3 ml de medio D-MEM preparado.

Protocolo de Irradiación

Estimación de la Dosis de UVC

Para el cálculo de la intensidad y dosis fue necesario estimar el ancho de banda que causa muerte celular. Para obtener estos datos se realizaron dos experimentos previos con linfocitos humanos, variando el tiempo y distancia de exposición, tomando como base los datos reportados en el trabajo de Cripps et al., 1978. Por tanto, esta información sirvió para estimar la intensidad y dosis de exposición a los que se sometieron las células HaCaT con la lámpara germicida utilizada (Steril-aire/serie DE, 400 mm). Los efectos en la viabilidad celular en el reporte de Cripps y los encontrados fueron semejantes pero los tiempos de exposición diferentes por este motivo se concluye que:

Si Da = $Ia\ ta$ y Dc = $Ic\ tc$ entonces:

$$Ia\ ta = Ic\ tc$$

Donde:
Da, Dc = Dosis (mJ/cm^2).
Ia = Intensidad de la lámpara germicida (Steril-aire/serie DE, 400 mm) (mW/cm2).

Ic = Intensidad de la lámpara reportada por Cripps (mW/cm^2).
ta, tc = Tiempo en el que la viabilidad de los linfocitos fue aproximadamente del 15% (min).

Por consiguiente, comparando las intensidades y tiempos para ambos experimentos la Intensidad se calculó de la siguiente manera:

$$\frac{\boldsymbol{Ia}}{\boldsymbol{Ic}} = \frac{\boldsymbol{tc}}{\boldsymbol{ta}}$$

$$\frac{\boldsymbol{Ia}}{\boldsymbol{Ic}} = \frac{\boldsymbol{10min}}{\boldsymbol{120min}} = \boldsymbol{0.083}$$

$$\boldsymbol{Ia = (0.083)Ic}$$

Sustituyendo el valor Ic = 1.6 mW/cm^2, se obtiene:

$$\boldsymbol{Ia = (0.083)\left(1.6\frac{mW}{cm^2}\right) = 0.1328\frac{mW}{cm^2}}$$

Por lo que, Ia es el valor de la intensidad a 4 cm de distancia del foco.
Así mismo para 20 cm, considerando la lámpara como una fuente puntual la intensidad queda como:

$$\boldsymbol{1 \propto \frac{1}{4\pi\, rl}}$$

$\boldsymbol{Si\ I1 = \frac{k}{4\pi\, r1\, l}\ y\ I2 = \frac{k}{4\pi\, r2\, l}}$ entonces:

$$\boldsymbol{\frac{k}{4\pi\, l} = I1r1 = I2r2}$$

Como $\frac{k}{4\pi\, l}$ es constante, de obtiene que:

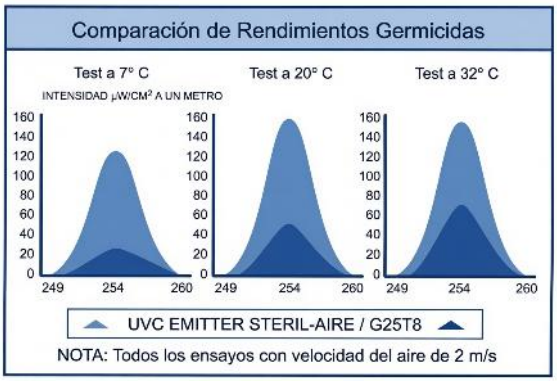
$$\boldsymbol{I1r1 = I2r2}$$

$$\boldsymbol{I2 = \frac{I1r1}{r2}}$$

Donde:
$I1$ = (Ia), Intensidad a 4 cm (mW/cm2).
$I2$ = Intensidad a 20 cm (mW/cm2).
$r1$, $r2$ = Distancia de lámpara a la muestra (cm). Al sustituir los valores, se obtiene:

$$\boldsymbol{I2 = \frac{(0.1328\frac{mW}{cm^2})(4cm)}{20cm} = 0.02656\frac{mW}{cm^2}}$$

Cálculo del ancho de banda
Fue tomado el pico máximo de 254 nm (mostrado en la figura 3.2) a una temperatura de 32ºC.



Por lo tanto:

$E\ d\lambda = I2$

Donde:
E = Pico máximo en 254 nm (mW/cm^2· nm).
$d\lambda$ = Banda de longitud de onda que causa muerte celular (nm).
$I2$ = Intensidad (mW/cm^2).
Se despeja $d\lambda$:

$$\boldsymbol{d\lambda = \frac{I2}{E} = \frac{0.02656\frac{Mw}{cm2}}{0.158\frac{mW}{cm2 \cdot nm}} = 0.168nm}$$

Dosis:
Con los cálculos anteriores la dosis se calcula con la siguiente ecuación:

$$D = I2\ t$$

Donde:
D = Dosis de radiación UVC para la lámpara (Steril-aire/serie DE, 400 mm) (mJ/cm2).
$I2$ = Intensidad a 20 cm (mW/cm2).
t = Tiempo de exposición (seg).

Por otra parte, el proceso de irradiación con UVC se realizó por triplicado para cada tiempo de exposición, a una distancia de 20 cm y una temperatura de 25-32ºC, utilizando una lámpara germicida de baja presión de mercurio de 40 W (Steril- aire/serie DE, 400 mm) con una longitud de onda máxima de 254 nm (Johnson, 2002; Mulero, 2004).

En la siguiente figura se muestra el arreglo geométrico para el proceso de irradiación, consta de una caja de acrílico negro con soportes de aluminio y separadores cada 5 cm con una base de vidrio.

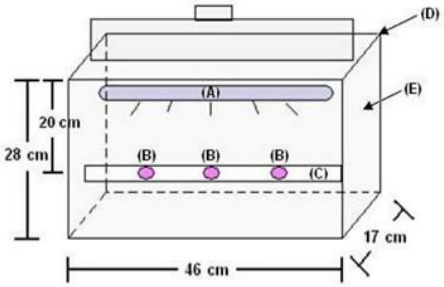


Figura 1 Arreglo geométrico para la irradiación con la lámpara germicida UVC. (A) Lámpara germicida UVC, (B) células HaCaT en cultivo, (C) soporte de muestras fabricado de vidrio, (D) soporte de aluminio y (E) acrílico negro.

Se propusieron los siguientes tiempos de exposición que equivale a un tratamiento para evaluar la respuesta de la viabilidad de las células HaCaT a la radiación UVC, tal como se muestra a continuación en la tabla 1.

Tabla1 Protocolo de irradiación UVC

MUESTRA	TIEMPO EXPOSICIÓN (min)	DOSIS (mJ/cm^2)
0 (Control)	0	0
1	60	96.616
2	120	191.232
3	180	286.848
4	240	382.464

Se estableció un control cero para todo el proceso de exposición y controles individuales para cada tiempo de exposición (60, 120, 180, 240 min).

Viabilidad celular

La cuantificación de la viabilidad se realizó mediante la técnica de exclusión de Azul de Tripán (Sigma, 2000-2001). Se colocaron en un tubo eppendorf de 1.5 ml (Costar Cambridge MA.), 500 □l de la solución azul de Tripán al 0.4% (p/v) (Sigma No. Cat. B1131, 2001), 300 □l de PBS 1X pH de 7.2 (atemperados a 37ºC) y 200 □l de la suspensión celular con una confluencia del 80%. La suspensión se mezcló suavemente con una pipeta y reposó durante 3-5 min (Campos et al., 2004). Fueron colocados por capilaridad en la cámara del hematocímetro (cámara de Neubauer, Spencer Bright-line Buffalo N.Y.) de 10-15 □l de la suspensión celular y contadas en un microscopio óptico (Axiovert 25 - ZEIZZ) con objetivo de 40X, iluminación y transmisión de luz directa, e iniciando con el cuadrado milimétrico central y siguiendo con los cuadros de cada esquina. Cada cuadro del hematocímetro represento un volumen total de 0.1 mm^3, para determinar la concentración de las células/ml de la suspensión celular se realizaron los cálculos considerando un factor de dilución de 5 (Sigma, 2000-2001).

Estimación de la DL50

Los datos obtenidos del experimento se grafican como porcentaje de mortalidad contra dosis, y los puntos obtenidos se ajustan a una regresión lineal y se interpola el valor relacionado al 50%.

RESULTADOS

Se evaluó la viabilidad celular de las células HaCaT en confluencia de la cual fue del 100% como se observa en la Fig.

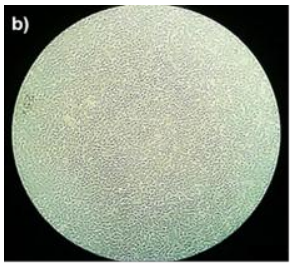


Figura. Proliferación de las células HaCaT confluencia del 100%

La viabilidad celular del grupo control fue de 89.1 ± 1.0%. En las células expuestas a radiación UVC se observó una disminución progresiva de la viabilidad conforme aumentaba la dosis. Los porcentajes de viabilidad fueron: 70.3 ± 4.6% a 95.62 mJ/cm², 49.9 ± 5.1% a 191.23 mJ/cm², 39.9 ± 9.8% a 286.85 mJ/cm² y 31.1 ± 8.5% a 382.46 mJ/cm²

Cajas de Cultivo	Control		UVC	
Muestra	**Células totales**	**% Viabilidad**	**Células totales**	**% Viabilidad**
0 (Control)	**$1.48x10^7$**	**89.1% ±1.0**	**----**	**----**
1	**$6.58x10^6$**	**81.3% ±4.7**	**$8.08x10^6$**	**70.3% ±4.6**
2	**$1x10^7$**	**83.2% ±3.0**	**$8.70x10^6$**	**49.9% ±5.1**
3	**$9x10^6$**	**77.4% ±1.0**	**$1.15x10^7$**	**39.9% ±9.8**
4	$8.41x10^6$	70.3% ±4.4	$9.16x10^6$	31.1% ±8.5

La tendencia de disminución de la viabilidad celular fue estadísticamente significativa con el incremento de la dosis de radiación UVC.

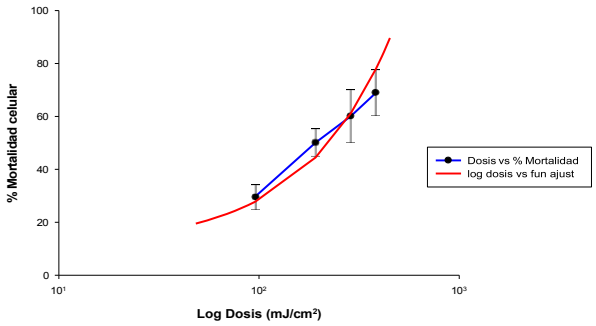


Figura 4.5 Gráfica de mortalidad celular.

Estimación de la DL50

A partir de los datos de mortalidad celular versus dosis, se realizó un ajuste mediante regresión lineal. La dosis letal media (DL50) estimada para las células HaCaT expuestas a radiación UVC fue de 222.88 mJ/cm².

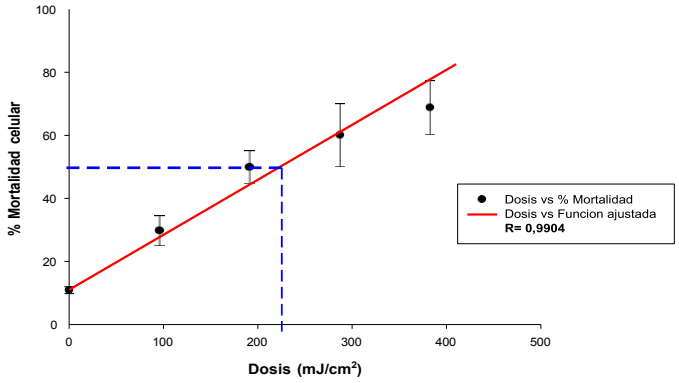


Figura 4.4 Gráfica de la estimación de la DL_{50}

CONCLUSIONES

La exposición a la radiación UVC a dosis mayores de 222.88 mJ/cm^2 causan el 50% de la mortalidad en la línea celular de queratinocitos (HACAT), por lo que se considera importante para evaluaciones de riesgos ambientales en personal ocupacionalmente expuestas a fuentes antropogénicas, los cuales pueden ocasionar efectos biológicos en la piel de los mismos**.**

BIBLIOGRAFÍA

1. Amron, D.M. and Moy, R.L. (1991) 'Stratospheric ozone depletion and its relationship to skin cancer', *Journal of Dermatologic Surgery and Oncology*, 17(4), pp. 370–372.
2. Artes F, Allende A. Processing lines and alternative preservation techniques to prolong the shelf-life of minimally fresh processed leafy vegetables. Eur. J. Hort. Sci. 2005; 70:231-45.
3. Bennett, D.C. (2008) 'Ultraviolet wavebands and melanoma initiation', *Pigment Cell & Melanoma Research*, 21(5), pp. 520–524.
4. Bergstrom, T., Bergman, J. and Moller, L. (2011) 'Vitamin A and C compounds permitted in supplements differ in their abilities to affect cell viability, DNA and the DNA nucleoside deoxyguanosine', *Mutagenesis*, 26(6), pp. 735–744.
5. Boukamp, P. et al. (1988) 'Normal keratinization in a spontaneously immortalized aneuploid human keratinocyte cell line', *Journal of Cell Biology*, 106(3), pp. 761–771.
6. Boukamp, P. (2005) 'UV-induced skin cancer: similarities-variations', *Journal der Deutschen Dermatologischen Gesellschaft*, 3(7), pp. 493–503.
7. Cameron, M.H. (2009) *Agentes físicos en rehabilitación: de la investigación a la práctica*. 3a ed. Barcelona: Elsevier.
8. CIE (Commission Internationale de l'Éclairage) (1987) *International Lighting Vocabulary*. 4th ed. Vienna: CIE.
9. Ding, W. (2006) *Mechanisms of arsenic toxicity and carcinogenesis in UVR-induced human skin cancer*. PhD Thesis. University of New Mexico.
10. Erofeev, A. (2006) *The effect of ultraviolet radiation on the skin*. Thesis. University of New South Wales.
11. Fencl, F.B. (2007) 'UVC Energy: How does it work?', *Heating/Piping/Air Conditioning Engineering*, 79(10), pp. 42–45.
12. Ghetti, F. et al. (2006) *Environmental UV Radiation: Impact on Ecosystems and Human Health and Predictive Models*. Dordrecht: Springer.

13. González-Pumariega, M., Vernhes Tamayo, M. and Sánchez-Lamar, A. (2009) 'La radiación ultravioleta. Su efecto dañino y consecuencias para la salud humana', *Theoria*, 18(2), pp. 69–80.
14. Gutiérrez, R.M. (2003) 'Cáncer de piel', *Revista de la Facultad de Medicina (UNAM)*, 46(4), pp. 166–171.
15. Hussein, M.R. (2005) 'Ultraviolet radiation and skin cancer: molecular mechanisms', *Journal of Cutaneous Pathology*, 32(3), pp. 191–205.
16. IARC (International Agency for Research on Cancer) (2005) *Exposure to Artificial UV Radiation and Skin Cancer*. Lyon: IARC.
17. Jemal, A. et al. (2006) 'Cancer statistics, 2006', *CA: A Cancer Journal for Clinicians*, 56(2), pp. 106–130.
18. Johnson, K.L. et al. (2002) 'Frequency, distribution and clonality of chromosome damage in human lymphocytes by multi-color FISH', *Mutagenesis*, 17(3), pp. 217–222.
19. Klaassen, C.D. (2003) 'Principios de toxicología y tratamiento de la intoxicación', in Hardman, J.G. and Limbird, L.E. (eds.) *Goodman & Gilman's: Las bases farmacológicas de la terapéutica*. 10a ed. México: McGraw-Hill, pp. 73–86.
20. Luque, J. and Herráez, A. (2006) *Texto ilustrado de Biología Molecular e Ingeniería Genética*. Madrid: Elsevier.
21. Mozumder, A. (1999) *Fundamentals of Radiation Chemistry*. San Diego: Academic Press.
22. Mulero, M. (2004) *Efecto de la radiación ultravioleta (RUV) sobre los procesos de estrés oxidativo e inmunodepresión cutánea*. Tesis Doctoral. Universitat Rovira i Virgili.
23. Parisi, A.V., Sabburg, J. and Kimlin, M.G. (2004) *Scattered and Filtered Solar UV Measurements*. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers.
24. Ramos Gómez, M. et al. (2008) *Curso de Cultivos Celulares*. Madrid: Universidad Autónoma de Madrid.
25. Ridley, A.J. et al. (2009) 'Cellular and sub-cellular responses to UVA in relation to carcinogenesis', *International Journal of Radiation Biology*, 85(3), pp. 177–195.
26. Sazonovas, A., Japertas, P. and Didziapetris, R. (2010) 'Estimation of reliability of predictions and model applicability domain evaluation in the analysis of acute toxicity (LD50)', *SAR and QSAR in Environmental Research*, 21(1-2), pp. 127–148.
27. Tubiana, M. et al. (1990) *Introduction to Radiobiology*. London: Taylor & Francis.
28. Wischermann, K. et al. (2008) 'UVA radiation causes DNA strand breaks, chromosomal aberrations and tumorigenic transformation in HaCaT skin keratinocytes', *Oncogene*, 27(31), pp. 4269–4280.

DESARROLLO DE COMPUESTOS DE GdVO4: Dy^{3+} + Tm^{3+} PARA SU APLICACIÓN COMO BIOMARCADORES

Carlos Felipe Hernández Fuentes [1], María Luz Carrera Jota[2], Teresita del Refugio Jiménez Romero[2], Ciro Falcony Guajardo[1], Ángel de Jesús Morales Ramírez [2], Bruno Munguia Utrilla[3] y María José Soto Miranda[2].

[1]Cinvestav Zacatenco, [2] Escuela Superior de Ingeniería Química e Industrias Extractivas (ESIQIE), IPN, [3] Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica del IPN.
carlosfhef@gmail.com

RESUMEN

Los materiales luminiscentes basados en matrices inorgánicas dopadas con lantánidos han despertado un creciente interés debido a sus aplicaciones potenciales en bioimagen, sensores ópticos y biomarcadores. En este trabajo se sintetizaron cinco compuestos de vanadato de gadolinio ($GdVO_4$) codopados con tulio (Tm^{3+}) y disprosio (Dy^{3+}), manteniendo constante la concentración de Tm^{3+} en 2.5 % atómico y variando la concentración de Dy^{3+}. El objetivo fue evaluar la influencia del dopaje sobre las propiedades estructurales y luminiscentes del sistema, así como explorar su posible aplicación como biomarcador.

Los materiales fueron obtenidos mediante el método sol-gel, seguido de tratamientos térmicos para favorecer la cristalización de la fase deseada. La caracterización estructural se realizó mediante Difracción de Rayos X (DRX), mientras que la identificación de grupos funcionales y enlaces químicos se llevó a cabo mediante Espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier (FTIR). Las propiedades ópticas fueron estudiadas mediante espectroscopía de luminiscencia.

Los resultados mostraron la formación exitosa de la fase cristalina tetragonal característica del $GdVO_4$, con una mayor cristalinidad a 1000 °C. Los espectros FTIR confirmaron la presencia de enlaces V–O y Gd–O asociados a la matriz anfitriona. Los espectros de excitación presentaron una longitud de onda óptima alrededor de 310 nm, mientras que los espectros de emisión revelaron bandas predominantes cercanas a 475 nm y 572 nm, asociadas a las emisiones características de Tm^{3+} y Dy^{3+}, respectivamente. El análisis cromático CIE 1931 evidenció variaciones de tonalidad entre azul y amarillo conforme aumentó la concentración de disprosio.

INTRODUCCIÓN

El desarrollo de biomarcadores luminiscentes constituye una de las áreas de mayor crecimiento dentro de la biofotónica moderna. Estos materiales permiten la detección, identificación y seguimiento de procesos biológicos mediante señales ópticas altamente sensibles. Entre los materiales más prometedores se encuentran los compuestos inorgánicos dopados con tierras raras, debido a su elevada estabilidad química, resistencia térmica y excelentes propiedades de emisión luminosa.

El vanadato de gadolinio ($GdVO_4$) representa una matriz particularmente atractiva para aplicaciones luminiscentes. Su estructura cristalina admite la incorporación de diversos iones lantánidos sin alterar significativamente la estabilidad estructural del material. Esta característica permite modificar y optimizar sus propiedades ópticas mediante estrategias de dopaje controlado.

En este contexto, el empleo simultáneo de tulio y disprosio resulta especialmente interesante. El ion Tm^{3+} se caracteriza por generar emisiones intensas en la región azul del espectro visible, mientras que el ion Dy^{3+} produce emisiones dominantes en la región amarilla. La combinación de ambas emisiones permite obtener diferentes tonalidades visibles mediante el ajuste de las concentraciones relativas de los dopantes.

La investigación tuvo como objetivo desarrollar materiales luminiscentes basados en $GdVO_4$ codopado con Tm^{3+} y Dy^{3+}, determinar la influencia de la concentración de los dopantes sobre las propiedades ópticas y establecer una base experimental para futuras aplicaciones como biomarcadores.

TEORÍA

La luminiscencia es un fenómeno óptico mediante el cual ciertos materiales emiten radiación electromagnética después de absorber energía. Este proceso involucra transiciones electrónicas entre distintos niveles energéticos y puede manifestarse como fluorescencia o fosforescencia dependiendo de la naturaleza de dichas transiciones.

La fluorescencia corresponde a una transición radiativa rápida entre estados electrónicos de igual multiplicidad de espín, con tiempos de vida típicamente del orden de nanosegundos. Por otro lado, la fosforescencia involucra estados triplete y presenta tiempos de emisión considerablemente mayores.

Los lantánidos poseen configuraciones electrónicas que favorecen transiciones ópticas altamente definidas. Debido al apantallamiento de los orbitales 4f por los orbitales externos, las emisiones presentan bandas estrechas y colores característicos. Estas propiedades han impulsado su aplicación en láseres, LEDs, dispositivos fotónicos y biomarcadores.

El tulio (Tm^{3+}) presenta una emisión dominante en la región azul, alrededor de 450–475 nm, asociada principalmente a transiciones electrónicas internas 4f–4f. Por su parte, el disprosio (Dy^{3+}) muestra emisiones características cercanas a 480 nm y 570 nm, correspondientes a regiones azul y amarilla del espectro visible.

El material anfitrión utilizado en este estudio fue el $GdVO_4$, una oxisal inorgánica que cristaliza en una estructura tetragonal tipo zircón (Figura 1). Esta estructura proporciona una adecuada estabilidad química y permite la sustitución parcial de los iones Gd^{3+} por otros lantánidos debido a sus radios iónicos similares.

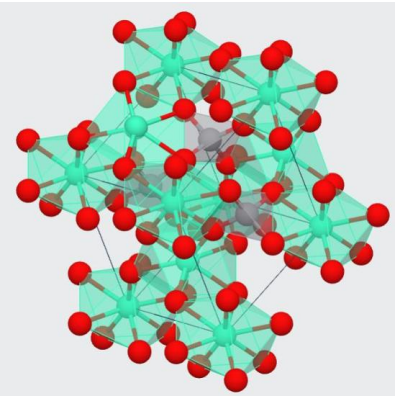


Figura 1. Estructura cristalina tetragonal tipo zircón del vanadato de gadolinio ($GdVO_4$), utilizada como matriz anfitriona para los iones Tm^{3+} y Dy^{3+}.

Además de sus propiedades estructurales, el $GdVO_4$ ha demostrado ser un excelente anfitrión luminiscente cuando se dopa con tierras raras, convirtiéndose en un candidato atractivo para aplicaciones biofotónicas y de bioimagen.

PARTE EXPERIMENTAL

La síntesis de los compuestos se realizó mediante el método sol-gel, técnica ampliamente utilizada en la preparación de materiales cerámicos y luminiscentes debido a la excelente homogeneidad química que proporciona. Este método consiste en la transformación progresiva de una suspensión coloidal líquida (sol) hacia una red sólida tridimensional (gel), seguida de procesos de secado y tratamiento térmico (Figura 2).

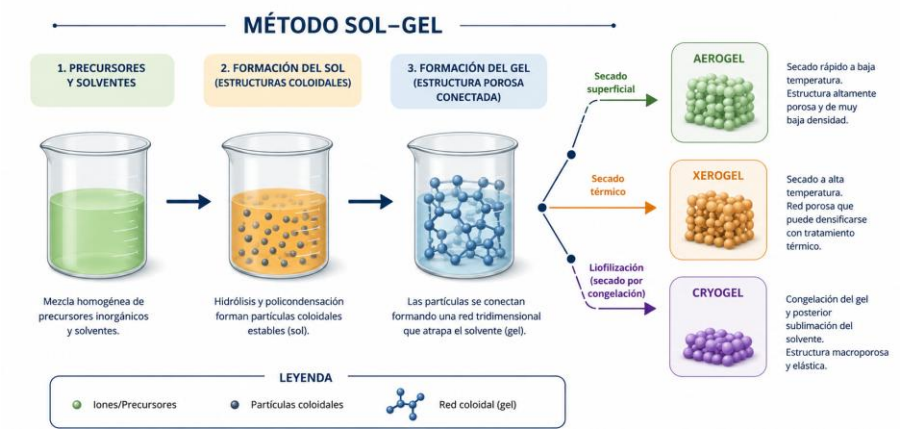


Figura 1. Representación esquemática del método sol-gel

Se prepararon cinco composiciones distintas de $GdVO_4$:Tm^{3+},Dy^{3+}. La concentración de Tm^{3+} se mantuvo constante en 2.5 % atómico, mientras que la concentración de Dy^{3+} se modificó gradualmente hasta 2 % atómico.

Después de la obtención de los soles, éstos fueron sometidos a procesos de envejecimiento y secado para obtener xerogeles. Posteriormente se realizaron tratamientos térmicos a distintas temperaturas con el objetivo de eliminar residuos orgánicos, inducir la cristalización y mejorar la pureza estructural del material.

Las muestras obtenidas fueron caracterizadas mediante:

Difracción de Rayos X (DRX), para determinar la estructura cristalina, espectroscopía FTIR, para identificar grupos funcionales y enlaces químicos y espectroscopía de fluorescencia, para evaluar los espectros de excitación y emisión luminiscente.

RESULTADOS

Los análisis de DRX mostraron la formación de la estructura cristalina característica del $GdVO_4$. La intensidad y definición de los picos aumentaron conforme se incrementó la temperatura de tratamiento térmico, alcanzando la mejor cristalinidad a 1000 °C. Estos resultados indican la consolidación de la fase tetragonal tipo zircón y la correcta incorporación de los dopantes dentro de la red cristalina.

Los espectros FTIR (Figura 3) permitieron identificar los enlaces característicos del sistema, particularmente las vibraciones asociadas a los grupos vanadato (V–O) y a los enlaces Gd–O. Asimismo, se observó la desaparición progresiva de señales relacionadas con residuos orgánicos provenientes de los precursores, fenómeno asociado al aumento de la temperatura de tratamiento.

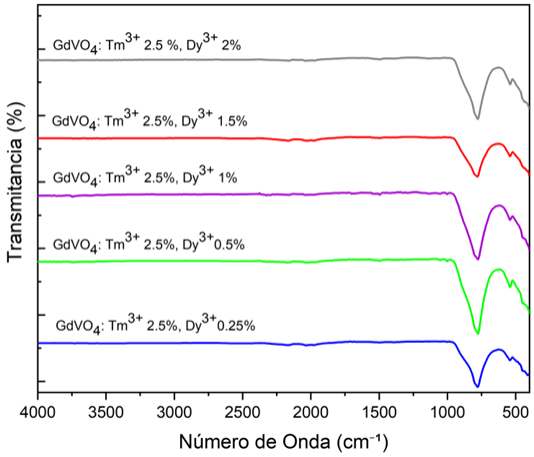


Figura 3. Espectros de FTIR de los compuestos $GdVO_4$:Tm^{3+},Dy^{3+} tratados a 1000 °C.

Los espectros de excitación revelaron una banda principal alrededor de 310 nm, atribuida a la absorción característica de la matriz $GdVO_4$. Esta longitud de onda fue utilizada para obtener los espectros de emisión de todas las muestras.

En los espectros de emisión se identificaron dos bandas predominantes. La primera, alrededor de 475 nm, se asoció a las transiciones características del Tm^{3+}, responsables de la emisión azul. La segunda, localizada cerca de 572 nm, correspondió a las emisiones amarillas del Dy^{3+}.

A medida que aumentó la concentración de Dy^{3+}, la intensidad relativa de la emisión amarilla se incrementó respecto a la emisión azul. Este comportamiento demuestra que la composición química permite modular las propiedades ópticas del sistema mediante el control de la concentración de los dopantes.

Finalmente, las coordenadas cromáticas obtenidas mediante el diagrama CIE 1931 confirmaron la evolución del color emitido (Figura 4). Las muestras con menor contenido de Dy^{3+} mostraron tonalidades predominantemente azules, mientras que aquellas con mayor concentración de disprosio presentaron una contribución amarilla más importante.

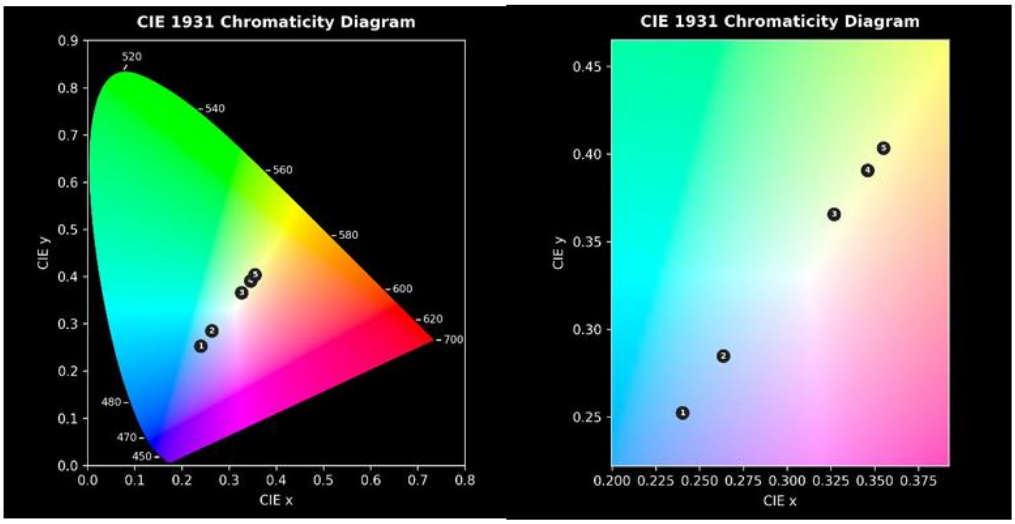


Figura 4: Diagrama CIE de los complejos sintetizados. Evolución de color desde tonos azules a tonos amarillos.

CONCLUSIONES

Se logró sintetizar exitosamente una serie de compuestos de $GdVO_4$ codopados con Tm^{3+} y Dy^{3+} mediante el método sol-gel. La estrategia experimental permitió obtener materiales cristalinos con buena pureza estructural después de tratamientos térmicos adecuados.

Los resultados de DRX confirmaron la formación de la fase tetragonal característica del $GdVO_4$, mientras que los análisis FTIR verificaron la presencia de los enlaces químicos propios de la matriz anfitriona y la eliminación de residuos orgánicos.

La caracterización luminiscente evidenció una excitación eficiente alrededor de 310 nm y emisiones dominantes en las regiones azul y amarilla del espectro visible. La intensidad relativa de estas emisiones dependió directamente de la concentración de disprosio incorporada al sistema.

Los diagramas de cromaticidad demostraron que es posible modificar la tonalidad emitida mediante el control del porcentaje atómico de Dy^{3+}, obteniéndose emisiones comprendidas entre azul y amarillo. Esta versatilidad óptica convierte al sistema $GdVO_4$:Tm^{3+},Dy^{3+} en un material prometedor para futuras aplicaciones en biomarcadores y dispositivos biofotónicos.

BIBLIOGRAFÍA

[1] Henriquez, B. (s. f.). La luz sin llamas: breve historia de la luminiscencia. https://www.criminalistica.mx/areas-forenses/hematologia-y-serologia/929-la-luz-sin-llamas-breve-historia-de-la-luminiscencia

[2] Everything You Should Know About the History of Lanthanide. (2022, 28 abril). Unacademy. https://unacademy.com/content/neet-ug/study-material/chemistry/everything-you-should-know-about-the-history-of-lanthanide

[3] Gomez, P. (2019). Z = 64, Gadolinio,Gd [Tesis]. Anales de Quimica. Recuperado 28 de abril de 2025, de https://www.criminalistica.mx/areas-forenses/hematologia-yserologia/929-la-luz-sin-llamas-breve-historia-de-la-luminiscencia

[4]Univision. (s. f.). Características del disprosio. Univision. https://www.univision.com/explora/caracteristicas-del-disprosio

[5] Tulio (Tm) Propiedades químicas y efectos sobre la salud y el medio ambiente. (s. f.). https://www.lenntech.es/periodica/elementos/tm.htm

[6] Hsu, C., & Powell, R. C. (1975). Energy transfer in europium doped yttrium vanadate crystals. Journal Of Luminescence, 10(5), 273-293. https://doi.org/10.1016/00222313(75)90051-4

[7] Romero Arellano, V. H. (2012). Estudio de las propiedades luminiscentes de óxidos nanocristalinos dopados con europio (Eu^{3+}), terbio (Tb^{3+}) y tulio (Tm^{3+}) (Tesis doctoral). Centro de Investigaciones en Óptica A.C. https://cio.repositorioinstitucional.mx/jspui/bitstream/1002/345/1/15467.pdf

[8] Kumari, P., & Manam, J. (2015). Structural, optical and special spectral changes of Dy3+ emissions in orthovanadates. RSC Advances, 5(130), 107575107584. https://doi.org/10.1039/c5ra18982amue

[9] Dwivedi, A., Roy, A., & Rai, S. B. (2023). Photoluminescence behavior of rare earth doped self-activated phosphors (i.e. niobate and vanadate) and their applications. RSC Advances, 13(24), 16260-16271. https://doi.org/10.1039/d3ra00629h

[10] Nuñez, N. O., Rivera, S., Alcantara, D., De la Fuente, J. M., García-Sevillano, J., & Ocaña, M. (2013). Surface modified Eu:GdVO4 nanocrystals for optical and MRI imaging. Dalton Transactions, 42(30), 10725. https://doi.org/10.1039/c3dt50676b

FLUORESCENCIA DEL EXOESQUELETO Y EXTRACTOS ETANÓLICOS DE ARÁCNIDOS *Arachnopulmonata*: COINCIDENCIAS ESPECTRALES CON NORHARMANO Y 7-HIDROXI-4-METILCUMARINA

Montserrat G. Rivera-Ortiz[1], Eliu Barocio-Padilla[1,2], Gabriel Ramos-Ortiz[1,*], Daniel Lopez-Cabrera[1], Edmundo González-Santillán[3].

[1]Centro de Investigaciones en Óptica, [2]Universidad de Guanajuato. División de Ciencias e Ingenierías, [3]Colección Nacional de Arácnidos, Instituto de Biología, Universidad Nacional Autónoma de México.
garamoso@cio.mx

RESUMEN

La fluorescencia en arácnidos ha sido asociada a la presencia de compuestos aromáticos conjugados, particularmente fluoróforos del tipo β-carbolina y cumarina. En este trabajo se estudió la fluorescencia del exoesqueleto y de extractos de exoesqueleto obtenidos en etanol al 80 % de 12 arácnidos, la mayoría pertenecientes al clado Arachnopulmonata, con el objetivo de evaluar coincidencias espectrales con norharmano (β-carbolina) y 7-hidroxi-4-metilcumarina.

Se realizaron mediciones de fluorescencia directamente sobre el exoesqueleto de los organismos, así como análisis espectroscópicos de los extractos etanólicos obtenidos a partir de sus exoesqueletos. Las muestras fueron excitadas en el rango UV–visible y se registraron los espectros de emisión correspondientes. Los espectros de los extractos fueron comparados con espectros de referencia de norharmano y 7-hidroxi-4-metilcumarina sintéticos medidos en condiciones experimentales equivalentes.

Los extractos etanólicos mostraron bandas de emisión bien definidas, cuyos máximos y perfiles espectrales presentan coincidencias claras con los fluoróforos de referencia, lo que sugiere la presencia de compuestos del tipo norharmano y cumarina en la fracción soluble de los organismos analizados. Estas coincidencias espectrales apoyan la hipótesis de que dichos metabolitos contribuyen de manera significativa a la fluorescencia observada en solución.

Por otro lado, la fluorescencia medida directamente en el exoesqueleto presentó características espectrales propias, sin una correspondencia directa con los espectros de norharmano y 7-hidroxi-4-metilcumarina en solución. Esta diferencia puede atribuirse a efectos de matriz, cambios en el entorno químico, interacciones con la estructura del exoesqueleto o a la presencia de otros compuestos fluorescentes en estado sólido que modulan la emisión observada.

En conjunto, los resultados indican que los extractos etanólicos permiten identificar coincidencias espectrales claras con fluoróforos específicos, mientras que la fluorescencia del exoesqueleto refleja un fenómeno más complejo, influenciado por el estado sólido y la organización estructural del material biológico. Este estudio aporta evidencia experimental de la presencia de norharmano y compuestos tipo cumarina en arácnidos Arachnopulmonata y contribuye a la comprensión de los mecanismos ópticos asociados a la fluorescencia en estos organismos, sentando bases para futuros estudios de identificación química y análisis funcional.

INTRODUCCIÓN

La fluorescencia en arácnidos ha sido reportada principalmente en escorpiones, donde se han identificado compuestos como β-carbolinas (norharmano) y cumarinas asociados a la emisión observada bajo radiación ultravioleta. Sin embargo, la información disponible para otros órdenes de Arachnopulmonata que exhiben fluorescencia en su exosqueleto o en su hemolinfa es todavía limitada y, en muchos casos, se restringe a descripciones cualitativas.

El presente trabajo tiene como objetivo comparar las características espectrales de la fluorescencia emitida por el exoesqueleto y por los extractos etanólicos de distintos representantes de Arachnopulmonata, así como evaluar posibles coincidencias o divergencias con los fluoróforos previamente identificados en escorpiones, específicamente norharmano y 7-hidroxi-4-metilcumarina. La comparación entre ambas aproximaciones permite explorar el efecto del entorno del solvente para el caso de los extractos, y del tejido (exosqueleto) sobre los mecanismos de emisión de cada fluoroforo identificado y aportar evidencia sobre la distribución de estos compuestos en el exoesqueleto de diferentes grupos de arácnidos.

TEORÍA

Arachnopulmonata es el nombre que se le dio en 2014 al clado al que, según estudios filogenéticos recientes, pertenecen todos los arácnidos con pulmones en forma de libro [1-3]. A este clado pertenecen los órdenes Pseudoscorpionida, Scorpiones, Araneae, Amblypygi, Uropygi y Schizomida [4].

Algunos órdenes de arácnidos arriba mencionados, en particular Scorpiones, Uropygi, Amblypygi y Araneae, comparten entre sí las siguientes características en el sistema vascular de la hemolinfa. En los miembros de los órdenes Amblypygi y Uropygi, la hemolinfa se transporta desde los pulmones en libro hasta el corazón a través de dos senos pulmo-pericárdicos, que discurren a lo largo de la cutícula lateral del opistosoma desde los pulmones en libro hasta el seno pericárdico [5]. La composición lipídica y proteica de la hemolinfa depende en gran medida de la especie, la edad y la nutrición [6], pero generalmente contiene algunas proteínas ya descritas, como hemocianinas, hexamerinas, lipoproteínas, ferritinas y hormonas [7].

El fenómeno de la fluorescencia en los órdenes Scorpiones, Uropygi, Amblypygi y Araneae se describió por primera vez en 1954. Este estudio señala que el entrecruzamiento molecular es responsable de la esclerotización del exoesqueleto, y que la fluorescencia aparece como un subproducto de dicha esclerotización [8], lo que se evidencia en el hecho de que los escorpiones recién nacidos y recién mudados no son fluorescentes.

Hasta la fecha, la fluorescencia en el exoesqueleto de los escorpiones se ha estudiado con relativa profundidad y detalle de manera que se han identificado y caracterizado espectroscópicamente al menos tres compuestos responsables de esta fluorescencia: el norharmano, la 7-hidroxi-4-metilcumarina y el éster de diftalato macrocíclico [9-11]. La Figura 1 presenta la estructura molecular de estos fluoroforos. Debe mencionarse, sin embargo, algunos autores apenas han descrito la fluorescencia en otros órdenes y los fluoroforos que la originan.

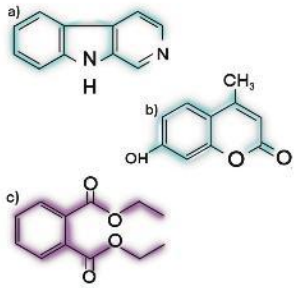


Fig. 1. Compuestos encontrados en el exoesqueleto de los escorpiones. a) Norharmano, b) 7-hidroxi-4-metilcumarina, c) Éster de diftalato macrocíclico.

PARTE EXPERIMENTAL

Los especímenes de estudio en este trabajo fueron donados por la Colección Nacional de Arácnidos y se enlistan en la Tabla 1.

Muestra	Orden	Especie
1	Araneae	*Brachypelma sp*
2	Uropygi	*Mastigoproctus sp*
3	Scorpiones	*Diplocentrus sp*
4	Opiliones	*Desconocido*
5	Uropygi	*Mastigoproctus sp*
6	Araneae	*Brachypelma sp*
7	Araneae	*Desconocido*
8	Araneae	*Rabidosa rabida*
9	Araneae	*Latrodectus sp*
10	Araneae	*Desconocido*
11	Amblypygi	*Desconocido*
12	Solifugae	*Eremobates aztecus*

Tabla 1. Lista y clasificación de los especímenes utilizados para este trabajo.

Cada espécimen cedido por la Colección Nacional de Arácnidos se conserva en etanol al 80 % y 20% agua. Esto se debe a que esta proporción retiene suficiente agua para garantizar una deshidratación más equilibrada, lo que permite conservar mejor la morfología externa y evita una fragilidad excesiva. Además, el etanol al 80 % es más eficaz como antiséptico, ya que se necesita una cierta cantidad de agua para penetrar mejor en las membranas celulares de las bacterias y los hongos y desnaturalizar sus proteínas.

Los pigmentos y fluoroforos que se han aislado hasta ahora del exoesqueleto del escorpión pueden extraerse con etanol. De este modo, el líquido de conservación emite fluorescencia de forma diferente al exoesqueleto, en primer lugar porque el entorno físico en el que emiten los fluoroforos es diferente, en fase líquida en el caso de extracto y, y en fase sólida en el caso del exoesqueleto; por otra parte, es posible que el exoesqueleto contenga una cantidad desconocida de fluoróforos que no han sido aislados ni descritos. Del mismo modo, los compuestos fluorescentes de otros órdenes de arácnidos se extraen del líquido de conservación mediante etanol. Los extractos etanólicos también exhiben fluorescencia bajo luz ultravioleta, como se muestra en la Figura 2.



Fig. 2. Fluorescencia del extracto etanólico de *Diplocentrus sp*.

Al desconocer la concentración de pigmentos y fluoróforos en cada extracto etanólico, se optó por diluir cada muestra con etanol al 80% hasta que mostrara una absorbancia aproximada de 0.2 para poder hacer comparaciones objetivas entre el comportamiento de los extractos. Cada muestra se colocó en una celda de cuarzo de 1 mm y se tomó su mapa de emisión.

Por otro lado, para la caracterización de la fluorescencia emitida por el exoesqueleto de los 12 arácnidos bajo estudio se realizó colocando cada espécimen seco sobre un portaobjetos e irradiando con LEDs de emisión a 380 nm y 405 nm, como se muestra en la Figura 3. La emisión se recolectó y la imagen del punto de excitación sobre el exoesqueleto se reprodujo sobre la rendija de entrada de un monocromador para registrar su contenido espectral.

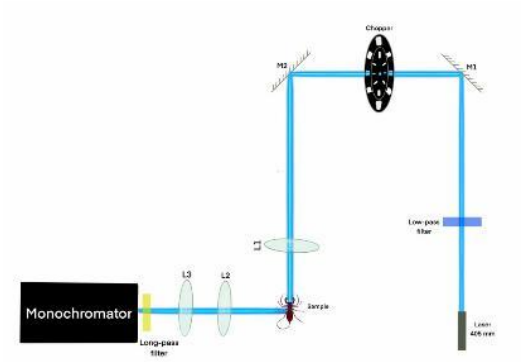


Fig. 3. Montaje experimental para la medición de la fluorescencia en el exoesqueleto de los especímenes.

RESULTADOS

Los espectros obtenidos muestran diferencias notables entre la emisión registrada directamente en el exoesqueleto y aquella observada en los extractos etanólicos. Mientras que los extractos presentan bandas relativamente definidas y perfiles espectrales comparables entre especies, la fluorescencia del exoesqueleto exhibe espectros más anchos y, en algunos casos, desplazamientos espectrales atribuibles a la influencia del entorno en fase solida (tejido biológico). Estas diferencias sugieren que la respuesta fluorescente observada en los organismos estudiados no depende exclusivamente de la presencia de fluoróforos individuales, sino también de interacciones con la matriz biológica donde se encuentran incorporados.

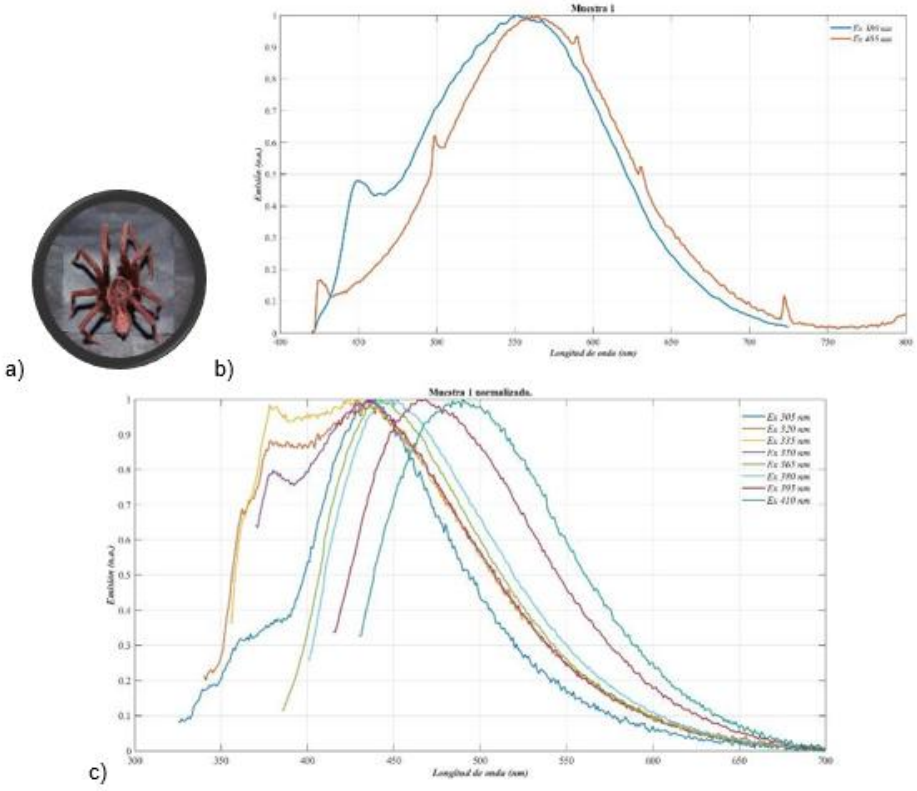


Fig.4. Muestra 1 de la Tabla 1: a) Fotografia bajo luz blanca de *Brachypelma sp.* b) Emisión normalizada del exoesqueleto excitando a 380 nm y 405 nm. c) Mapa de emisión del extracto etanólico excitando en 305 nm, 320 nm, 350 nm, 365 nm, 380 nm, 395 nm y 410 nm.

Como ejemplo de lo arriba descrito, la Figura 4 presenta los espectros de emisión del exoesqueleto y extractos de *Brachypelma sp* a diferentes longitudes de onda de excitación. Como se puede observar, al excitar las regiones fluorescentes del exoesqueleto, éste exhibe fluorescencia levemente sintonizable, presentando un pico de emisión en 550 nm al excitar con 380 nm y uno a 560 nm al excitar con 405 nm (Figure 4b). Esta sintonizabilidad también se presenta en el extracto etanólico, pero las longitudes de onda de emisión no son las mismas que en el caso de fase sólida. Para la excitación a 380 nm se tiene un pico de emisión en 450 nm, es decir, desplazado 100 nm a la izquierda de lo que se obtuvo en el exoesqueleto. Mientras que para la excitación a 410 nm se tiene un máximo de emisión en 500 nm (Figure 4c).

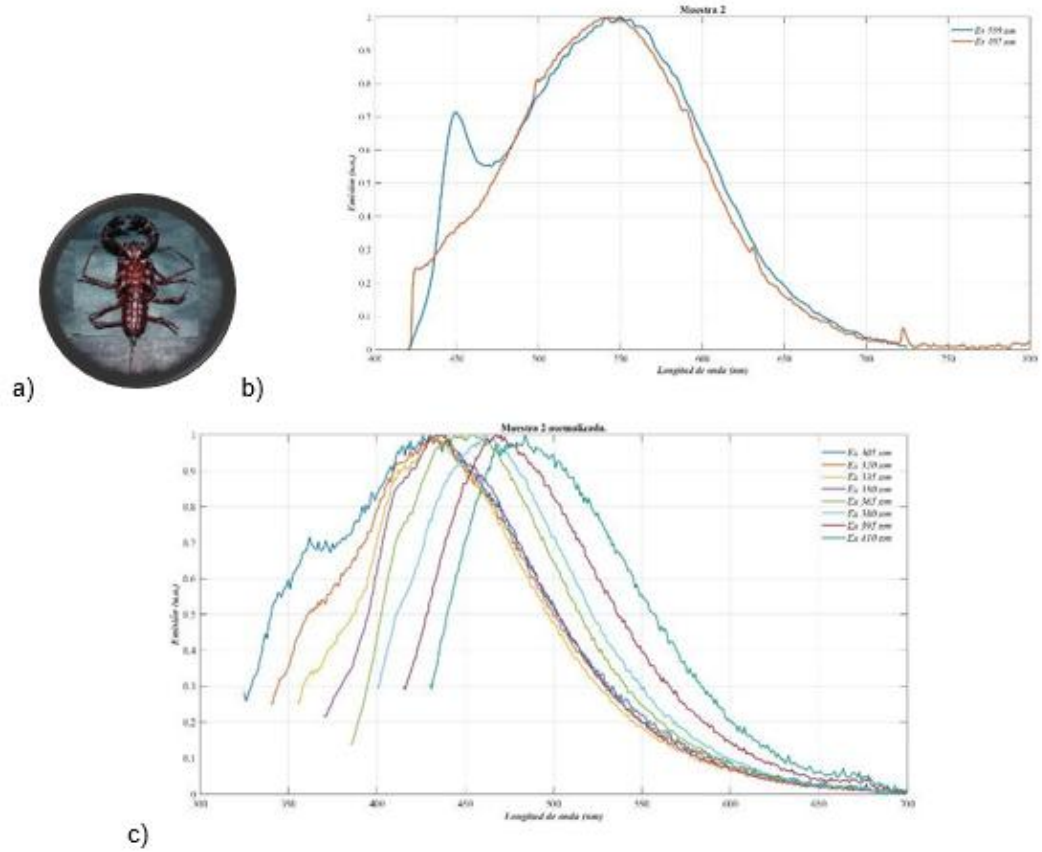


Fig. 5. Muestra 2 de la Tabla 1: a) Fotografia bajo luz blanca de *Mastigoproctus sp.* b) Emisión normalizada del exoesqueleto excitando a 380 nm y 405 nm. c) Mapa de emisión del extracto etanólico excitando en 305 nm, 320 nm, 350 nm, 365 nm, 380 nm, 395 nm y 410 nm.

Como segundo ejemplo, se presenta el caso de *Mastigoproctus sp.* En la Figura 5 se muestra que, al excitar las regiones fluorescentes del exoesqueleto, éste exhibe fluorescencia que no es sintonizable presentando el mismo máximo de emisión en 550 nm al excitar con 380 nm y con 405 nm. Debe mencionarse que estos dos ejemplos, *Brachypelma sp* (muestra 1) y *Mastigoproctus sp* (muestra 2), comparten la característica de que la fluorescencia solo sucede en las articulaciones y no en todo el exoesqueleto. Sin embargo, la sintonizabilidad sí se presenta en el extracto etanólico, pero las longitudes de onda de emisión no son las mismas pues para la excitación a 380 nm se tiene un pico de emisión en 450 nm, es decir, desplazado 100 nm a la izquierda de lo que se obtuvo en el exoesqueleto. Mientras que para la excitación a 410 nm se tiene un máximo de emisión en 500 nm.

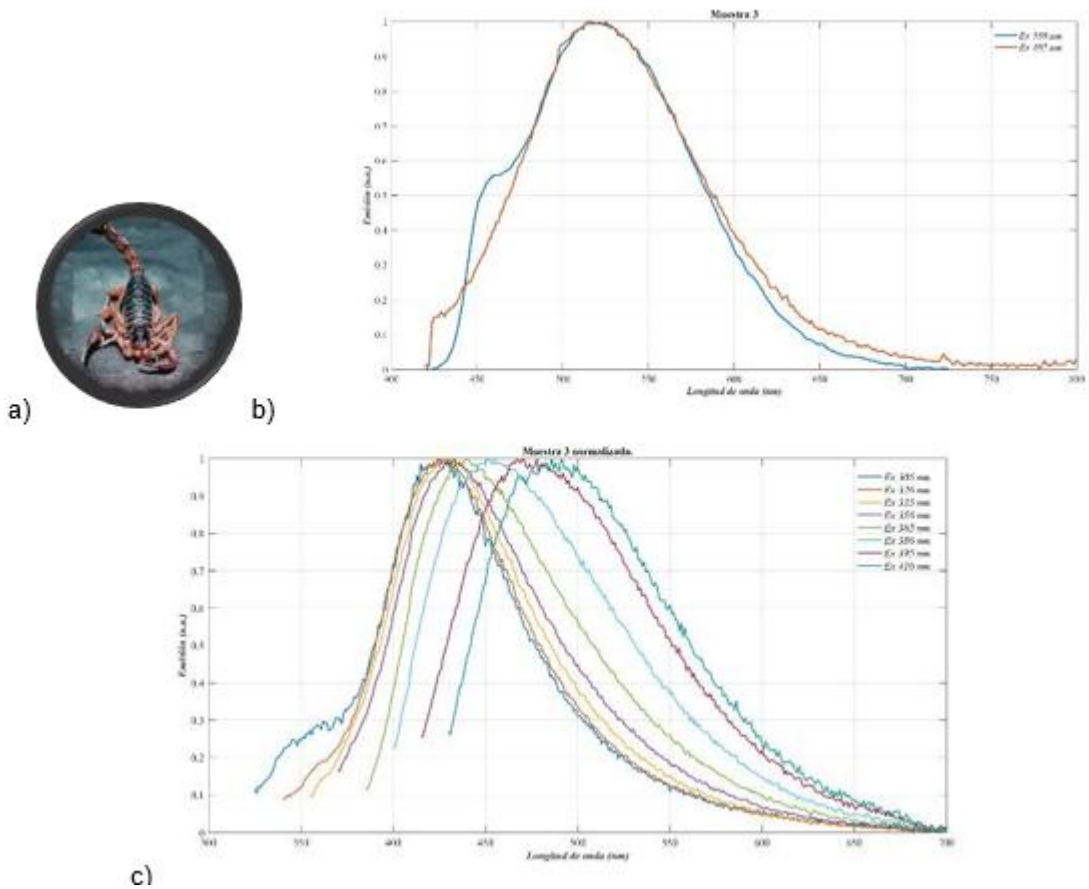


Fig. 6. Muestra 3 de la Tabla 1: a) Fotografia bajo luz blanca de *Diplocentrus sp.* b) Emisión normalizada del exoesqueleto excitando a 380 nm y 405 nm. c) Mapa de emisión del extracto etanólico excitando en 305 nm, 320 nm, 350 nm, 365 nm, 380 nm, 395 nm y 410 nm.

Como tercer ejemplo se presenta el caso de los escorpiones. Como se muestra en la Figura 6, el ejemplar del orden Scorpiones muestra un comportamiento similar al del ejemplar del orden Uropygi, pues al excitar las regiones fluorescentes del exoesqueleto, éste exhibe fluorescencia que no es sintonizable, pero en esta ocasión presentando el mismo máximo de emisión en 530 nm al excitar con 380 nm y con 405 nm. De la misma forma, el extracto etanólico exhibe sintonizabilidad, pero las longitudes de onda de emisión no son las mismas que se mostraban en el exoesqueleto. Para la excitación a 380 nm se tiene un pico de emisión en 455 nm, mientras que para la excitación a 410 nm se tiene un máximo de emisión en 500 nm.

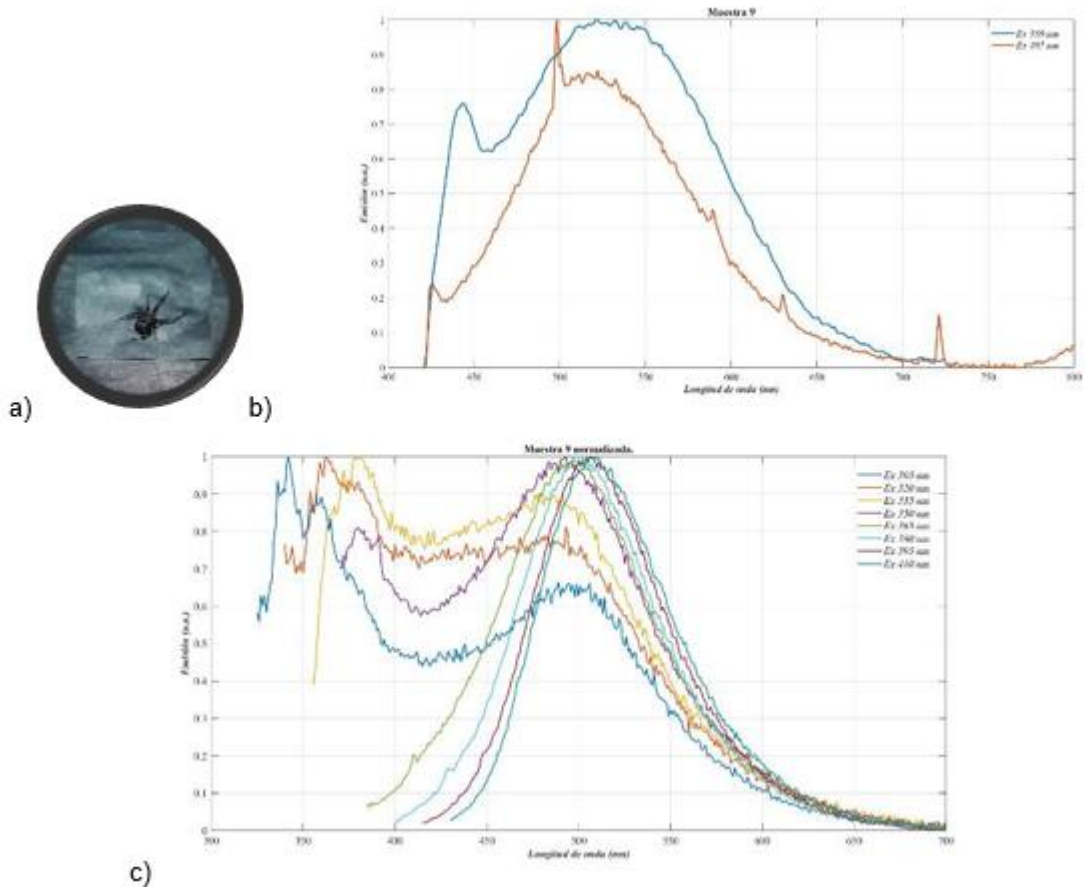


Fig.7. Muestra 9 de la Tabla 1: a) Fotografia bajo luz blanca de *Latrodectus sp.* b) Emisión normalizada del exoesqueleto excitando a 380 nm y 405 nm. c) Mapa de emisión del extracto etanólico excitando en 305 nm, 320 nm, 350 nm, 365 nm, 380 nm, 395 nm y 410 nm.

Finalmente, se describe el caso de *Latrodectus sp* en la Figura 7. En este caso se trata de un ejemplar del orden Araneae identificado como Muestra 9, y presenta un comportamiento muy similar al de la Muestra 1 que también es del del orden Araneae, como era de esperarse. Estos dos ejemplares presentan emisión levemente sintonizable en el exoesqueleto y una emisión sintonizable en el extracto etanólico consistente con el resto de ejemplares. Este extracto etanólico presenta una emisión menos sintonizable que las otras muestras, lo que puede ser indicativo de una menor variedad de fluoroforos solubles en etanol presentes en el cuerpo del arácnido.

CONCLUSIONES

El análisis comparativo de la fluorescencia en exoesqueletos y extractos etanólicos de diferentes arácnidos *Arachnopulmonata* permitió identificar comportamientos espectrales claramente diferenciados entre especímenes. Los extractos etanólicos muestran bandas de emisión muy parecidas para todos los ejemplares, presentando fluorescencia entre el azul y el cyan independientemente del orden al cual pertenezcan.

En contraste, la fluorescencia registrada directamente en el exoesqueleto mostró características espectrales distintas a las observadas en solución, pues la emisión en exoesqueleto tiende a ser de color verde y ligeramente sintonizable en algunos ejemplares. Con este comportamiento, podemos inferir que algunos fluoróforos y pigmentos son solubles en etanol, además de comportarse de forma distinta dependiendo del medio en que se encuentran. Se teoriza que en el exoesqueleto se encuentran anclados a proteínas que modifican las bandas de emisión.

Los resultados sugieren que la fluorescencia en Arachnopulmonata es un fenómeno complejo que no puede explicarse únicamente mediante la presencia de fluoróforos individuales aislados. Asimismo, apoyan la hipótesis de que compuestos similares a los descritos previamente en escorpiones podrían estar distribuidos en otros órdenes del clado. Este trabajo proporciona una base experimental para futuros estudios orientados a la identificación química de los fluoróforos presentes, la cuantificación de sus contribuciones relativas y la comprensión de su posible papel biológico y evolutivo en los arácnidos fluorescentes.

BIBLIOGRAFÍA

[1] Dunlop JA. Spider Origins: a Palaeontological Perspective. Arachnology [Internet]. 2022 Jun 27 [cited 2025 Jul 8];19(sp1). Available from: https://bioone.org/journals/arachnology/volume-19/issue-sp1/arac.2022.19.sp1.182/Spider-Origins-a-Palaeontological-Perspective/10.13156/arac.2022.19.sp1.182.full

[2] Giribet G. Current views on chelicerate phylogeny—A tribute to Peter Weygoldt. Zoologischer Anzeiger. 2018 Mar;273:7–13.

[3] Sharma PP, Kaluziak ST, Pérez-Porro AR, González VL, Hormiga G, Wheeler WC, et al. Phylogenomic Interrogation of Arachnida Reveals Systemic Conflicts in Phylogenetic Signal. Molecular Biology and Evolution. 2014 Nov;31(11):2963–84.

[4] Ontano AZ, Gainett G, Aharon S, Ballesteros JA, Benavides LR, Corbett KF, et al. Taxonomic Sampling and Rare Genomic Changes Overcome Long-Branch Attraction in the Phylogenetic Placement of Pseudoscorpions. Pupko T, editor. Molecular Biology and Evolution. 2021 May 19;38(6):2446–67.

[5] Klußmann-Fricke B -J., Wirkner CS. Comparative morphology of the hemolymph vascular system in Uropygi and Amblypygi (Arachnida): Complex correspondences support Arachnopulmonata. Journal of Morphology. 2016 Aug;277(8):1084–103.

[6] Cappelari FA, Turcatto AP, Morais MM, De Jong D. Africanized honey bees more efficiently convert protein diets into hemolymph protein than do Carniolan bees (Apis mellifera carnica) [Internet]. Genetics and Molecular Research. 2009 ; 8(4): 1245-1249.[citado 2025 set. 01] Available from: https://doi.org/10.4238/vol8-4gmr628

[7] Trabalon, Marie et al. “Differences in Brachypelma albopilosa (Theraphosidae) hemolymph proteome between subadult and adult females.” Journal of experimental zoology. Part A, Ecological genetics and physiology vol. 313,10 (2010): 651-9. doi:10.1002/jez.636

[8] Lawrence RF. Fluorescence in Arthropoda. 2009.

[9] Frost, L. M.; Butler, D. R.; O’Dell, B.; Fet, V. Scorpions 2001: In memoriam Gary A. Polis; Fet, V.; Selden, P. A., Eds.; British Arachnological Society, 2001; pp 365−368.

[10] Stachel, S. J.; Stockwell, S. A.; Van Vranken, D. L. Chem. Biol. 1999, 6, 531−539.

[11] Yoshimoto Y, Tanaka M, Miyashita M, Abdel-Wahab M, Megaly AMA, Nakagawa Y, et al. A Fluorescent Compound from the Exuviae of the Scorpion, *Liocheles australasiae*. J Nat Prod. 28 de febrero de 2020;83(2):542-6.

OBTENCIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE ÓXIDO DE ZINC Y SU CARACTERIZACIÓN MEDIANTE DIFRACCIÓN DE RAYOS X Y EVALUACIÓN DE SU ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA

María Teresa Fuentes Romero[1], Raquel Eunice Hernández Ramírez[2], Manuel Medina Mendoza[3], Jesús Nicolás Bermúdez[4] y Mitca Vasti Juárez Heredia[5]

[1]Universidad Tecnológica Fidel Velázquez, [2]Tecnológico de Estudios Superiores de Coacalco, [3]Universidad Tecnológica Fidel Velázquez, [4] Universidad Tecnológica Fidel Velázquez y [5] Universidad Tecnológica Fidel Velázquez
24313023@utfv.edu.mx

RESUMEN

Las nanopartículas de óxido de zinc (ZnO) han despertado gran interés en el ámbito biomédico debido a su biocompatibilidad, estabilidad química y notable actividad antimicrobiana, características que las posicionan como materiales prometedores para aplicaciones en desinfección, recubrimientos protectores y dispositivos médicos. En este trabajo se sintetizaron nanopartículas de ZnO mediante un método hidrotermal, el cual tiene como precursores al nitrato de zinc y hexametilentetramina (HMTA), las cuales fueron caracterizadas mediante la microscopia de difracción de rayos X. Las muestras obtenidas fueron caracterizadas estructuralmente mediante difracción de rayos X (DRX) empleando radiación Cu-$K\alpha_1$ (λ = 1.54060 Å) en un rango de 2θ de 20 a 80° y un paso de 0.02°. El patrón de difracción mostró picos característicos en 2θ = 31.8°, 34.4°, 36.3°, 47.5°, 56.6°, 62.9°, 66.4°, 67.9°, 69.1°, 72.6°, 77.0° y 89.6°, correspondientes a los planos cristalográficos (100), (002), (101), (102), (110), (103), (200), (112), (201), (004), (202) y (203), confirmando la formación de ZnO en fase zincita con sistema cristalino hexagonal y grupo espacial $P6_3mc$, en concordancia con la carta cristalográfica ICDD 01-079-0206. No fue posible indexar los picos observados en 39.5° y 45.9°, lo que sugiere la posible presencia de contribuciones secundarias de baja intensidad o defectos estructurales asociados al proceso térmico. La actividad antimicrobiana se evaluó frente a cepas bacterianas representativas mediante ensayos de inhibición de crecimiento con la técnica turbidimétrica reportando los resultados en densidad óptica, observándose una disminución significativa de la viabilidad celular en presencia de las nanopartículas sintetizadas. Este comportamiento se atribuye principalmente a la generación de especies reactivas de oxígeno, la liberación de iones Zn^{2+} y la interacción directa de las nanopartículas con la membrana celular bacteriana, mecanismos que en conjunto inducen daño estructural, alteraciones metabólicas y pérdida de integridad celular. Asimismo, se identificó que la disminución del tamaño de partícula y el aumento del área superficial favorecen la eficiencia antimicrobiana, evidenciando la importancia del control de los parámetros de síntesis sobre el desempeño biológico del material. Los resultados demuestran que las nanopartículas de ZnO obtenidas presentan propiedades antimicrobianas relevantes y potencial de aplicación en materiales con función biológica, particularmente en recubrimientos protectores, superficies de contacto sanitario y sistemas con requerimientos de desinfección. En conclusión, el control preciso de las condiciones de síntesis y tratamiento térmico permite optimizar la estructura cristalina y, en consecuencia, el desempeño antimicrobiano del ZnO nanométrico, posicionándolo como una alternativa viable, accesible y de interés para el desarrollo de tecnologías biomédicas y de salud pública.

INTRODUCCIÓN

La nanotecnología ha experimentado un crecimiento significativo en las últimas décadas debido al desarrollo de materiales con propiedades físicas, químicas y biológicas diferentes a las observadas en sus contrapartes macroscópicas. Entre estos materiales, las nanopartículas de óxido de zinc (ZnO) han despertado gran interés debido a su estabilidad química, biocompatibilidad, bajo costo de producción y amplio espectro de aplicaciones en campos como la biomedicina, la electrónica, la catálisis y la remediación ambiental [1,2].

Las nanopartículas de ZnO poseen propiedades antimicrobianas que las convierten en materiales prometedores para el desarrollo de recubrimientos protectores, superficies sanitarias y sistemas de desinfección. Diversos estudios han demostrado que su actividad antimicrobiana se relaciona con la generación de especies reactivas de oxígeno (ROS), la liberación de iones Zn^{2+} y la interacción directa con las membranas celulares de microorganismos, provocando alteraciones estructurales y metabólicas que pueden conducir a la muerte celular [3,4].

Las características estructurales del ZnO, como el tamaño de cristalito, la morfología, el área superficial y la presencia de defectos cristalinos, influyen directamente en su desempeño biológico. Por ello, el control de las condiciones de síntesis resulta fundamental para optimizar sus propiedades funcionales [5]. Entre los diferentes métodos empleados para la obtención de nanopartículas de ZnO, el método hidrotermal destaca por su simplicidad, reproducibilidad y capacidad para producir materiales con elevada pureza y cristalinidad mediante condiciones relativamente suaves de operación [6].

Para determinar las propiedades estructurales de las nanopartículas obtenidas, la difracción de rayos X (DRX) constituye una de las técnicas de caracterización más utilizadas, ya que permite identificar fases cristalinas, determinar parámetros estructurales y evaluar el grado de cristalinidad del material [7]. Asimismo, la evaluación de la actividad antimicrobiana proporciona información relevante sobre el potencial de aplicación de las nanopartículas en el desarrollo de materiales con funciones biológicas y sanitarias.

Por lo anterior, el presente trabajo tiene como objetivo obtener nanopartículas de óxido de zinc mediante síntesis hidrotermal, caracterizarlas estructuralmente mediante difracción de rayos X y evaluar su actividad antimicrobiana, con la finalidad de analizar la relación entre las características cristalinas del material y su desempeño biológico.

TEORÍA

El óxido de zinc (ZnO) es un semiconductor de tipo II-VI que cristaliza principalmente en la estructura hexagonal tipo zincita, caracterizada por una elevada estabilidad térmica y química. Este material presenta un ancho de banda prohibida de aproximadamente 3.37 eV y una alta energía de enlace excitónico, propiedades que favorecen aplicaciones en dispositivos electrónicos, fotocatalizadores y materiales con actividad biológica [1,5].

Cuando el ZnO se obtiene en dimensiones nanométricas, sus propiedades pueden diferir significativamente de las observadas en el material masivo debido al incremento de la relación área superficial/volumen y a los efectos de confinamiento cuántico. Estas características permiten una mayor interacción con microorganismos y favorecen la generación de especies químicas reactivas responsables de su actividad antimicrobiana [2].

La síntesis hidrotermal es una técnica ampliamente utilizada para la obtención de nanopartículas de ZnO debido a que permite controlar parámetros como la temperatura, el tiempo de reacción y la concentración de los precursores. Generalmente se emplean sales de zinc, como el nitrato de zinc, y agentes complejantes o estabilizantes, como la hexametilentetramina (HMTA), para promover el crecimiento controlado de estructuras cristalinas con alta pureza y cristalinidad [6].

La caracterización estructural mediante difracción de rayos X (DRX) permite identificar las fases cristalinas presentes en el material a partir de la posición e intensidad de los picos de difracción. En el caso del ZnO, los principales planos cristalográficos asociados a la estructura hexagonal zincita corresponden a las reflexiones (100), (002), (101), (102), (110) y (103), entre otras. La comparación de los patrones experimentales con bases de datos cristalográficas permite confirmar la formación de la fase deseada y detectar posibles impurezas o fases secundarias [7].
La actividad antimicrobiana de las nanopartículas de ZnO se atribuye a diversos mecanismos de acción. Entre los más aceptados se encuentran la generación de especies reactivas de oxígeno

(ROS), la liberación de iones Zn^{2+} y la interacción electrostática con la superficie celular de los microorganismos. Estos procesos pueden ocasionar daño en la membrana celular, alteraciones metabólicas, estrés oxidativo y, finalmente, la inhibición del crecimiento o la muerte celular [3,4]. La eficiencia de estos mecanismos depende de factores como el tamaño de partícula, la morfología, la concentración empleada y las características del microorganismo evaluado.

PARTE EXPERIMENTAL

Materiales

Para la síntesis de las nanopartículas de óxido de zinc se empleó nitrato de zinc hexahidratado [$Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$] como precursor de zinc y hexametilentetramina (HMTA) como agente auxiliar de crecimiento. Asimismo, se utilizaron agua destilada y etanol para las etapas de lavado y purificación del material obtenido.

Síntesis de nanopartículas de ZnO

Las nanopartículas de óxido de zinc fueron obtenidas mediante el método hidrotermal. Inicialmente, los precursores fueron disueltos en medio acuoso y sometidos a agitación constante durante 30 minutos con el propósito de obtener una solución homogénea y favorecer la interacción entre las especies químicas presentes.

Posteriormente, la solución preparada fue transferida a un reactor hidrotermal y sometida a un tratamiento térmico a 120 °C durante 6 horas. Durante este proceso se promovió la nucleación y el crecimiento controlado de las nanopartículas de ZnO.

Una vez concluida la reacción, el sistema se dejó enfriar hasta alcanzar temperatura ambiente. El producto obtenido fue recuperado mediante centrifugación y lavado sucesivo con agua destilada y etanol para eliminar impurezas y residuos de reactivos no reaccionados.

Finalmente, el material recuperado fue secado en estufa a 60 °C durante 12 horas, obteniéndose un polvo blanco correspondiente a las nanopartículas de óxido de zinc. La metodología general empleada para la síntesis se muestra en la Figura 1.



Fig. 1. Diagrama metodológico para la obtención de nanopartículas de ZnO mediante síntesis hidrotermal.

Caracterización estructural

La caracterización estructural de las nanopartículas sintetizadas se realizó mediante difracción de rayos X (DRX). Los análisis se llevaron a cabo empleando radiación Cu-Kα_1 con una longitud de onda de λ = 1.54060 Å. Los patrones de difracción fueron registrados en un intervalo angular de 2θ comprendido entre 20° y 80°, utilizando un tamaño de paso de 0.02°.

Los difractogramas obtenidos fueron comparados con patrones cristalográficos reportados en la base de datos del International Centre for Diffraction Data (ICDD), con el fin de identificar las fases cristalinas presentes y confirmar la formación de la estructura característica del ZnO.

Evaluación de la actividad antimicrobiana

La actividad antimicrobiana de las nanopartículas de ZnO fue evaluada mediante la técnica turbidimétrica utilizando cultivos bacterianos representativos. Las nanopartículas fueron puestas en contacto con las suspensiones bacterianas bajo condiciones controladas de incubación.

El crecimiento microbiano fue monitoreado mediante la medición de la densidad óptica a 600 nm (OD600), empleando un lector de microplacas. Los valores obtenidos fueron comparados con los correspondientes a los grupos control para determinar el efecto inhibitorio de las nanopartículas sobre el crecimiento bacteriano.

Tratamiento de los datos
Los resultados experimentales obtenidos mediante DRX y los ensayos de actividad antimicrobiana fueron analizados de forma comparativa para establecer la relación entre las características estructurales de las nanopartículas sintetizadas y su desempeño biológico. La interpretación de los resultados se realizó considerando la estructura cristalina obtenida, así como el comportamiento observado frente a los microorganismos evaluados.

RESULTADOS

Caracterización estructural mediante difracción de rayos X
La Figura 2 muestra el patrón de difracción de rayos X correspondiente a las nanopartículas de ZnO obtenidas mediante síntesis hidrotermal. Se observaron picos de difracción localizados en valores de 2θ de 31.8°, 34.4°, 36.3°, 47.5°, 56.6°, 62.9°, 66.4°, 67.9°, 69.1°, 72.6° y 77.0°, los cuales fueron indexados a los planos cristalográficos (100), (002), (101), (102), (110), (103), (200), (112), (201), (004) y (202), respectivamente.

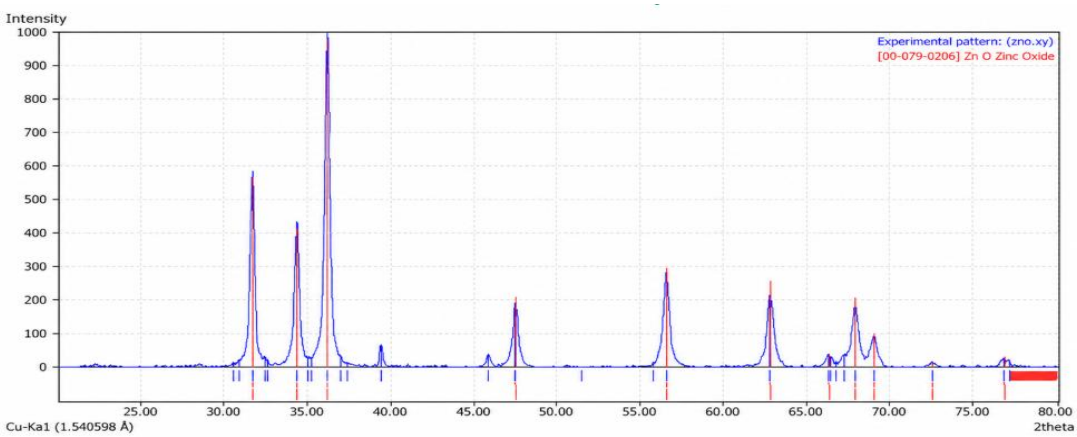


Fig. 2. Patrón de difracción de rayos X de la muestra ZnO obtenida por el método hidrotermal en azul y su comparación con la carta JCPDS 79-0206 en rojo.

La posición e intensidad de los picos observados concuerdan con la fase zincita del óxido de zinc reportada en la carta cristalográfica ICDD 01-079-0206, confirmando la formación de ZnO con estructura cristalina hexagonal y grupo espacial P63mc. La ausencia de señales intensas asociadas a otras fases cristalinas indica que el método hidrotermal empleado permitió obtener un material con elevada pureza estructural.

Asimismo, se detectaron señales de baja intensidad alrededor de 39.5° y 45.9° que no pudieron ser indexadas con la carta de referencia utilizada. Estas contribuciones podrían estar relacionadas con defectos cristalinos, tensiones residuales generadas durante el proceso de síntesis o la presencia de cantidades mínimas de fases secundarias no detectables de manera concluyente mediante esta técnica.

Los resultados obtenidos demuestran que las condiciones de síntesis empleadas favorecieron la formación exitosa de nanopartículas de ZnO con una estructura cristalina bien definida, característica que resulta relevante para aplicaciones donde las propiedades superficiales y la cristalinidad influyen directamente en el desempeño funcional del material.

CONCLUSIONES

Las nanopartículas de óxido de zinc obtenidas mediante el método hidrotermal presentaron una estructura cristalina correspondiente a la fase zincita, lo que fue confirmado mediante los análisis de difracción de rayos X. Los resultados demostraron que las condiciones de síntesis empleadas favorecieron la formación de un material con buena cristalinidad y características adecuadas para aplicaciones de interés biológico. Asimismo, las pruebas de actividad antimicrobiana evidenciaron una disminución del crecimiento bacteriano en presencia de las nanopartículas sintetizadas, confirmando su potencial como agente antimicrobiano. En conjunto, los resultados obtenidos indican que el ZnO nanométrico representa una alternativa prometedora para el desarrollo de recubrimientos protectores, superficies sanitarias y materiales con aplicaciones biomédicas y de salud pública.

BIBLIOGRAFÍA

1. Ramesh, M., Anbuvannan, M., & Viruthagiri, G. Green synthesis of ZnO nanoparticles using *Solanum nigrum* leaf extract and their antibacterial activity. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, Vol. 136, 2015, pp. 864–870.
2. Sirelkhatim, A., Mahmud, S., Seeni, A., Kaus, N. H. M., Ann, L. C., Bakhori, S. K. M., Hasan, H., & Mohamad, D. Review on zinc oxide nanoparticles: antibacterial activity and toxicity mechanism. *Nano-Micro Letters*, Vol. 7, No. 3, 2015, pp. 219–242.
3. Jones, N., Ray, B., Ranjit, K. T., & Manna, A. C. Antibacterial activity of ZnO nanoparticle suspensions on a broad spectrum of microorganisms. *FEMS Microbiology Letters*, Vol. 279, No. 1, 2008, pp. 71–76.
4. Premanathan, M., Karthikeyan, K., Jeyasubramanian, K., & Manivannan, G. Selective toxicity of ZnO nanoparticles toward Gram-positive bacteria and cancer cells by apoptosis through lipid peroxidation. *Applied Biochemistry and Biotechnology*, Vol. 165, 2011, pp. 797–807.
5. Kołodziejczak-Radzimska, A., & Jesionowski, T. Zinc oxide—From synthesis to application: A review. *Materials*, Vol. 7, No. 4, 2014, pp. 2833–2881.
6. Baruah, S., & Dutta, J. Hydrothermal growth of ZnO nanostructures. *Science and Technology of Advanced Materials*, Vol. 10, No. 1, 2009, Article 013001.
7. Cullity, B. D., & Stock, S. R. *Elements of X-Ray Diffraction*. 3rd ed., Prentice Hall, New Jersey, 2001.

DESARROLLO DE HUMEDALES CONSTRUIDOS PARA EL TRATAMIENTO DE CONTAMINANTES ACUOSOS

Irasema Leticia Islas García[1], Daniela Monserrat Suárez Balderrama[1], Diego Enrique Montoya Morales[2], Fabian Mendoza Hernández [1], Gustavo Montiel Canales [1]

[1]Centro de Estudios Científicos y Tecnológicos No. 16 “Hidalgo”, Instituto Politécnico Nacional,
[2]Unidad Politécnica Interdisciplinaria de Ingeniería Campus Zacatecas, UPIIZ.
lislasg@ipn.mx.

RESUMEN

La escasez de agua en el estado de Hidalgo constituye un problema crítico que afecta a la totalidad de sus 84 municipios. De acuerdo con el reporte del Monitor de Sequía en México, emitido por la Dirección Local Hidalgo de la Comisión Nacional del Agua (15 de febrero de 2024), 17 municipios presentan condiciones de sequía excepcional, 26 sequía extrema, 30 sequía severa y 11 sequía moderada.

Esta problemática impacta directamente a la comunidad del CECyT No. 16 Hidalgo, del Instituto Politécnico Nacional, ubicado en el municipio de San Agustín Tlaxiaca. Dicho municipio dispone de presas y jagüeyes cuya recarga depende principalmente de las precipitaciones pluviales; sin embargo, el suministro de agua se ha visto comprometido tanto por las condiciones de sequía como por deficiencias en la infraestructura hidráulica.

En este contexto, se identificó que los principales contaminantes a tratar corresponden a fármacos, los cuales forman parte de los denominados contaminantes emergentes y representan un riesgo significativo para la salud pública al incorporarse a distintos cuerpos de agua. En el presente estudio se abordó el tratamiento de ciprofloxacino, amoxicilina y paracetamol, mediante humedales artificiales.

Con el propósito de contribuir a la eliminación y/o reducción de estos contaminantes, se desarrolló esta propuesta basada en el uso de ecotecnologías, particularmente humedales artificiales, empleando agua sintética a escala de laboratorio adicionada con los fármacos de interés. Para ello, se diseñaron tres sistemas experimentales constituidos por contenedores que incluían sustrato (piedra volcánica), agua previamente caracterizada y la vegetación seleccionada; adicionalmente, se implementó un cuarto contenedor como control (blanco).

La vegetación fue sometida a un proceso de aclimatación en presencia de cada contaminante, seguido de la adición progresiva de diferentes concentraciones de los fármacos, lo que permitió generar curvas de tratamiento para cada compuesto. La evaluación del sistema consideró diversos mecanismos de remoción, entre los que destacan la fotodegradación de los fármacos, la adsorción en el sustrato y el metabolismo vegetal.

Los resultados obtenidos evidenciaron que la interacción planta–microorganismo en la rizosfera desempeña un papel fundamental en la degradación de antibióticos, así como la importancia de una adecuada selección de la especie vegetal utilizada en el sistema. La evaluación de parámetros fisicoquímicos mostró una eficiencia de remoción superior al 80%, considerando los distintos mecanismos de acción involucrados.

En conclusión, el humedal artificial desarrollado constituye una alternativa ecológica, funcional y de bajo costo, con alta capacidad para la remoción eficiente de contaminantes emergentes.

INTRODUCCIÓN

El agua es un recurso natural esencial para el desarrollo de cualquier nación, siendo el compuesto químico más abundante del planeta y absolutamente necesario para sostener la vida. Sin embargo, su disponibilidad ha ido disminuyendo gradualmente a causa de múltiples fuentes de contaminación, incluidas las que afectan los acuíferos subterráneos, generando impactos ambientales, económicos y sociales negativos [1].

Se considera que el agua está contaminada cuando sus propiedades químicas, físicas, biológicas o su composición se modifican, de tal manera que pierde la calidad requerida para ser potable o para su empleo en actividades domésticas, agrícolas o industriales. Por su parte, las aguas residuales son aquellas con composición diversa que resultan de descargas de usos urbanos, industriales, agrícolas, pecuarios y domésticos, incluyendo también fraccionamientos y otras fuentes de origen variado [2].

En el caso de México, se estima que se generan aproximadamente 200 metros cúbicos por segundo de aguas residuales, pero únicamente el 36 % de ellas recibe tratamiento [3]. Esto revela la necesidad de incrementar la infraestructura y contar con más personal capacitado para garantizar la calidad de este recurso, además de desarrollar propuestas innovadoras que permitan tratar las aguas bajo distintas realidades ambientales y sociales.

Desde la década de 1980 se ha detectado la presencia de fármacos en los cuerpos de agua y efluentes, pero en años recientes su relevancia ha crecido debido a los efectos adversos que provocan. Estos compuestos están generando impactos ecotoxicológicos en especies acuáticas y terrestres, como la resistencia a antimicrobianos, la reducción de la diversidad planctónica e incluso la inhibición del crecimiento de células embrionarias humanas [4, 5, 6]. Los antibióticos, aunque estén presentes en concentraciones muy bajas, contribuyen a la resistencia bacteriana, ya que los sistemas convencionales de tratamiento de aguas residuales no logran eliminarlos completamente, provocando así su presencia generalizada en el ambiente acuático [7].

En 2016 se hizo una publicación que compilo una base de datos de 123,761 entradas para 631 productos farmacéuticos únicos reportados en 71 países, en aguas superficiales, subterráneas y agua potable. Se encontró que 16 productos farmacéuticos coincidían en todas las regiones de Naciones Unidas entre ellos se encuentran paracetamol, ciprofloxacina y amoxicilina [8].

En cuanto a los métodos de depuración, los más empleados son de tipo físico, químico y biológico. Dentro de estos últimos destacan los humedales artificiales (HA), que se aplican principalmente al tratamiento de aguas residuales domésticas, aunque también se han adaptado para aguas industriales [9]. Esta tecnología surgió en Europa hace unos treinta años y aún continúa operando con buenos resultados [10]. Los HA consisten en sistemas que recrean un entorno intermedio entre zonas acuáticas y terrestres, diseñados específicamente para depurar aguas residuales bajo condiciones de control en cuanto a ubicación, tamaño y capacidad [11].

Entre sus principales ventajas sobresale el bajo costo de instalación y mantenimiento frente a otros sistemas físicos, químicos o biológicos, así como su aporte paisajístico. Los HA bien diseñados pueden tratar aguas municipales, industriales y pluviales, resultando particularmente eficaces en la eliminación de contaminantes como sólidos suspendidos, nutrientes (nitrógeno y fósforo), hidrocarburos y metales. Siempre que se operen de forma adecuada, representan una alternativa efectiva y segura para el reciclaje y tratamiento de aguas [12].

La tecnología de los HA se inspira en procesos naturales, reproduciendo lo que ocurre en ecosistemas acuáticos con una intervención mínima del ser humano, por lo que suelen denominarse “sistemas naturales de tratamiento”. Esto los hace especialmente atractivos desde el punto de vista económico y por su flexibilidad de aplicación.

Un HA está formado por plantas, el sustrato y comunidades microbianas. Las plantas, que pueden ser de distintas especies y formas de enraizamiento, cumplen funciones relevantes como la absorción

de nutrientes, la simbiosis con microorganismos, la liberación de oxígeno y la retención de partículas [13]. El sustrato, a su vez, sirve como soporte vegetal y proporciona un medio para el desarrollo de la biopelícula microbiana, además de facilitar el flujo hidráulico [14]. Los microorganismos constituyen el elemento clave de estos sistemas, ya que determinan la eficiencia en la eliminación de contaminantes al degradar materia orgánica y transformar compuestos nitrogenados y fosforados en formas más sencillas.

La selección de especies vegetales acuáticas es relevante porque varían en su capacidad de eliminar nutrientes específicos, elementos traza o incluso metales pesados [15]. Actualmente, existen HA funcionando en entidades como Colima, Chihuahua, Ciudad de México, Estado de México, Hidalgo, Nayarit, Oaxaca, Tamaulipas y Tlaxcala [3], mostrando una eficiencia de depuración superior a la de otros métodos convencionales de tratamiento de aguas residuales.

Los humedales son sistemas acuáticos que han sido considerados, a nivel mundial, entre los ecosistemas con mayor diversidad de hábitats [16, 17]. México cuenta con 138 humedales inscritos en la lista Ramsar, que incluyen aquellos ubicados en zonas costeras y continentales, a los cuales se les ha asignado especial importancia como sitios prioritarios para la conservación de aves migratorias [18]. Uno de estos sitios es la Laguna de Tecocomulco, ubicada en el estado de Hidalgo, que actualmente representa el cuerpo de agua más importante del Valle de México [19].

En los últimos 30 años, científicos, gestores y autoridades han reconocido que los ecosistemas lagunares sufren complicaciones ambientales a causa de una compleja cadena de eventos que varían de un sitio a otro, y que pueden, en parte, ser atribuidos al enriquecimiento por nutrientes que provienen de la escorrentía de las tierras agrícolas, las actividades de engorda de los animales, el vertido de aguas residuales, entre otras. Aunado a esto, la introducción y movilidad de metales pesados en los cuerpos de agua representan un grave problema para los organismos vivos, incluido el hombre [20].

Lo antes mencionado puede ser ratificado en la laguna de Tecocomulco, la cual presenta pérdida de almacenamiento, así como descargas de: drenaje sanitario, granjas porcinas y ganaderas. La presencia de grandes superficies erosionadas en las zonas adyacentes debido a la deforestación con fines de ampliación de la superficie agrícola, el consumo de leña o madera, el sobrepastoreo, las prácticas agrícolas no adecuadas y los incendios forestales, han acelerado los procesos de degradación, con el consecuente incremento de los escurrimientos en la cuenca, lo que genera empobrecimiento de suelos en las partes altas, inundaciones de las superficies de cultivo en las parte bajas y el azolvamiento de los cauces de la propia laguna [16].

La Laguna de Tecocomulco alberga una gran diversidad de vegetación acuática, siendo el tule (*Typha domingensis*) y el junco (*Schoenoplectus acutus*) las especies dominantes en el ecosistema. Estas plantas emergentes forman extensos tulares que cubren aproximadamente el 73 % de la superficie del cuerpo de agua, proporcionando hábitat esencial para aves migratorias y otras especies silvestres. No obstante, su proliferación excesiva, junto con la del lirio acuático (*Eichhornia crassipes*), ha reducido significativamente el espejo de agua, afectando la capacidad de almacenamiento y la dinámica ecológica de la laguna [21].

La presencia de antibióticos como la amoxicilina en cuerpos de agua, incluyendo humedales naturales y artificiales, representa un problema emergente de contaminación ambiental y salud pública. La amoxicilina, un antibiótico β-lactámico de amplio espectro, es comúnmente utilizada en medicina humana y veterinaria. Sin embargo, su uso excesivo y eliminación inadecuada a través de aguas residuales domésticas, hospitalarias o agropecuarias ha contribuido a su presencia en ecosistemas acuáticos, donde puede favorecer la selección de bacterias resistentes [22, 23].

En este contexto, el estudio de los anillos de inhibición de amoxicilina mediante métodos de difusión en agar permite evaluar la eficacia del antibiótico frente a bacterias aisladas de estos entornos, así como detectar posibles fenómenos de resistencia. Esta técnica consiste en colocar discos con amoxicilina sobre una placa con medio de cultivo inoculado con bacterias ambientales. Si el

microorganismo es susceptible, se formará un halo claro alrededor del disco, conocido como zona o anillo de inhibición. El tamaño de este halo es proporcional a la sensibilidad bacteriana y puede compararse con los estándares establecidos por el CLSI para clasificar a los microorganismos como sensibles, intermedios o resistentes [24, 25] (CLSI, 2020; Andrews, 2001).

En estudios realizados en humedales artificiales diseñados para el tratamiento de aguas contaminadas, esta metodología permite evaluar no solo la presencia de bacterias resistentes, sino también la efectividad del ecosistema para degradar o eliminar antibióticos residuales. Así, el análisis de anillos de inhibición se convierte en una herramienta esencial para monitorear el impacto ambiental de los fármacos, el potencial de propagación de genes de resistencia y la capacidad de los sistemas naturales o diseñados para mitigar estos contaminantes [26, 27].

OBJETIVO GENERAL

Diseñar, implementar y evaluar un HA como sistema de tratamiento natural de aguas residuales, mediante el seguimiento de variables fisicoquímicas y biológicas, con el fin de promover la conciencia ambiental, demostrar su eficacia en la mejora de la calidad del agua, y evaluar su capacidad para la remoción de contaminantes emergentes, específicamente los fármacos Amoxicilina, Ciprofloxacina y Paracetamol.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

1. Analizar los principios científicos que sustentan el funcionamiento de los humedales artificiales, incluyendo procesos de filtración, adsorción, absorción, biodegradación y fitorremediación.
2. Construir un prototipo de HA utilizando materiales accesibles y plantas acuáticas procedentes de un humedal natural, bajo condiciones controladas que simulen un sistema de tratamiento ecológico.
3. Evaluar la eficiencia del HA en la mejora de la calidad del agua, midiendo parámetros como el pH, la turbidez, la presencia de sólidos suspendidos y la oxigenación, antes y después del tratamiento.
4. Fomentar la conciencia ambiental entre los participantes del proyecto y la comunidad en general, mediante actividades de divulgación científica como presentaciones escolares, carteles informativos y talleres interactivos, que resalten la importancia de las tecnologías verdes y sostenibles para la conservación del agua y la biodiversidad.
5. Analizar la capacidad del HA para la remoción de contaminantes emergentes, específicamente los fármacos Amoxicilina, Ciprofloxacina y Paracetamol, mediante el seguimiento de su concentración antes y después del tratamiento, evaluando la eficiencia del sistema en la eliminación de estos compuestos.

PARTE EXPERIMENTAL

HUMEDALES

Se construyeron cuatro humedales utilizando recipientes plásticos con dimensiones 46 x 31 x 31 cm como unidades experimentales. Cada recipiente presentó las siguientes características:

- **Sustrato**: se colocaron tres capas de roca volcánica con granulometrías diferenciadas:
  - capa inferior de 8 cm de altura con granulometría gruesa
  - capa intermedia de 4 cm con granulometría media
  - capa superior de 3 cm con granulometría más fina

En conjunto, el lecho filtrante alcanzó una altura total de 15 cm.

- **Vegetación:** cada humedal se plantó con dos ejemplares de *Typha domingensis* (tule) y dos de

Schoenoplectus acutus (junco), distribuidos de manera uniforme para favorecer el desarrollo radicular y la interacción con el agua tratada. Es importante mencionar que las plantas utilizadas se muestrearon de la Laguna de Tecocomulco.

- **Tratamientos:**
  - Humedal 1: control (sin fármacos)
  - Humedal 2: adicionado con ciprofloxacina
  - Humedal 3: adicionado con amoxicilina
  - Humedal 4: adicionado con paracetamol

El agua empleada para el funcionamiento de los humedales correspondió a agua potable, a la que se adicionó la concentración deseada de cada fármaco, como se describe más adelante.
Los humedales se colocaron en condiciones ambientales normales, es decir, a la intemperie y expuestos a la temperatura y radiación solar ambiental, a fin de reproducir condiciones lo más próximas posibles a su funcionamiento real. Durante el periodo experimental se realizaron muestreos diarios en cada humedal, siempre a la misma hora, con el propósito de mantener la comparabilidad de resultados y poder evaluar adecuadamente la eficiencia de remoción de contaminantes, así como el comportamiento de las especies vegetales frente a la exposición de los compuestos farmacéuticos.

PRUEBAS BIOQUÍMICAS

Las pruebas bioquímicas permiten identificar y caracterizar bacterias mediante su metabolismo. Son esenciales en microbiología clínica, ambiental e industrial, las pruebas realizadas para este trabajo fueron las que se enlistan a continuación:

Prueba de catalasa
Preparación: no se necesita medio específico, solo una colonia fresca.
Procedimiento: se coloca una gota de peróxido de hidrógeno (3%) en un portaobjetos. Agregar una colonia.
Resultado positivo: formación inmediata de burbujas (liberación de O_2).

Prueba de ureasa
Preparación del medio: caldo o agar de urea con rojo de fenol. Procedimiento: inocular con bacteria y incubar a 37°C por 24h. Resultado positivo: cambio de color a rosa intenso.

Prueba TSI (Triple Sugar Iron)
Preparación del medio: TSI agar (glucosa, lactosa, sacarosa, hierro y fenol). Procedimiento: inocular con picadura y estría, incubar 24h a 37°C. Interpretación: amarillo (ácido), rojo (alcalino), negro (H_2S), burbujas (gas).

Prueba de Rojo de Metilo (MR)
Preparación del medio: caldo MR-VP.
Procedimiento: inocular, incubar 48h, añadir rojo de metilo. Resultado positivo: color rojo indica producción de ácidos estables.

Prueba de Citrato de Simmons
Preparación del medio: citrato de Simmons (azul de bromotimol). Procedimiento: inocular con estría, incubar 24-48h.
Resultado positivo: el medio se vuelve azul.

Prueba de Indol
Preparación del medio: caldo tripticasa.
Procedimiento: inocular, incubar 24h, añadir reactivo de Kovacs. Resultado positivo: capa roja en la superficie.

Prueba de Movilidad
Preparación del medio: agar semisólido (0.4% agar). Procedimiento: inocular con picadura en el centro, incubar.
Resultado positivo: difusión del crecimiento desde el sitio de inoculación.

Preparación de soluciones acuosas de ciprofloxacina
La ciprofloxacina se obtuvo a partir de tabletas comerciales, pero para este caso se mantuvo en solución acuosa. Se utilizó como solvente una solución de HCl 0,1 M. LA metodología de extracción que se utilizó fue la siguiente:

- Se pulverizó 2 tabletas de 500 mg de ciprofloxacina, de manera que se obtenga una cantidad equivalente a 1000 mg. Cuidar obtener un polvo fino.
- Se mezcló con 1 L de solución HCL 0,1 M.
- Se extrajo con agitación a 600 rpm por 40 minutos.
- Se filtró al vació la solución con papel filtro.
- Se transfirió la solución resultante a un matraz aforado de 1 L.
- Se aforó con HCl 0,1 M. Del procedimiento anterior se obtuvo una solución 1000 mg/L de ciprofloxacina, de donde se tomaron las alícuotas para preparar las soluciones 10, 50 y 100 mg/L de los humedales artificiales.

Preparación de soluciones acuosas de paracetamol
Se pulverizó 3 tabletas de paracetamol de 600 mg en un mortero hasta que se tuvo un polvo fino, después se disolvieron en 600 mL de agua destilada y se pusieron en baño ultrasónico por 60 min para que se disolviera completamente el polvo. Con el procedimiento anterior se obtuvo una solución de 2500 mg/L, a partir de esta solución se prepararon las alícuotas de 10 y 50 mg/L.

Preparación de Soluciones Acuosas de Amoxicilina
Este documento describe la preparación de soluciones acuosas de amoxicilina a concentraciones de 10 mg/L, 50 mg/L y 100 mg/L a partir de una tableta de 500 mg. Se incluyen cálculos directos y una estrategia alternativa mediante la preparación de una solución madre.

Cuantificación de fármacos
Se prepararon alícuotas de 2, 4, 6, 8 y 10 mg/L para hacer la curva de calibración para poder cuantificarlo mediante espectrometría UV-Vis. La longitud de onda de absorción de cada uno se encuentra en la Tabla 1.

Tabla 1. Longitudes de onda (λ) detectables para cada fármaco.

Fármaco	λ (nm)
Ciprofloxacina	273
Amoxicilina	271
Paracetamol	254

Aislamiento de Bacterias y Preparación de Discos con Amoxicilina
Mediante la selección de raíces frescas, sanas y jóvenes, se llevó a cabo la preparación en solución salina estéril al 0.85%, preparando diluciones seriadas de 10^{-1} a 10^{-3} para su posterior incubación y sembrado en agar nutritivo por estría, incubar, Tabla 2.

Tabla 2. Características de los discos con amoxicilina

Amoxicilina	Concentración Stock	Volumen / Disco	Contenido final
Polvo puro	2.5 mg/mL	20 μL	50 μg
Tableta 500mg	5 mg/mL	10 μL	50 μg

Adsorción en la piedra volcánica
Se preparó la piedra volcánica del sustrato de los humedales, posterior dilución y centrifugación, para finalmente llevar a cabo la lectura en espectrofotómetro UV-Vis

RESULTADOS

Batería de identificación bioquímica

En la Tabla 3 se muestran los resultados de la batería de pruebas bioquímicas aplicadas a los humedales.

Tabla 3. Resultados de las pruebas bioquímicas

Prueba	Resultado
TSI	Pico rojo/fondo amarillo, el microorganismo solamente fermenta la glucosa
Medio SIM / Indol con reactivo de Kovacs	Negativo
Agar Tripticasa	Positivo, hay movilidad Cepas móviles: producen turbidez del medio, que se extiende más allá de la línea de siembra
Agar Urea	Positivo
Citrato de Simmons	Positivo/indica formación de productos alcalinos
Agar EMB	Negativo
Agar Linasa	Negativo
Catalasa	Negativo

Determinación de la Calidad del Agua
Pruebas físico-químicas aplicadas a cada humedal

Tabla 4. Resultados de las pruebas físico-químicas aplicadas a los humedales

Determinación	Control	Paracetamol	Ciprofloxacina	Amoxicilina
Arsénico	0 ppm	0 ppm	0 ppm	0 ppm
Alcalinidad	122.04mg/L	122.04mg/L	122.04mg/L	122.04mg/L
Cloruros	20 mg/L	20 mg/L	20 mg/L	20 mg/L
Cloro libre/ Residual	0	0	0	0
Cianuros	0	0	0	0
Dureza	374.8 mg/L	374.8 mg/L	374.8 mg/L	374.8 mg/L
Dureza total	140 ppm	100 ppm	120ppm	110ppm
Plomo	0	0	0	0

Interpretación al microscopio y tinciones de Gram

En la Tabla 5, se muestran los resultados de las pruebas realizadas al microscopio de las muestras tomadas de los humedales.

Tabla 5. Resultados del análisis al microscopio de las muestras de humedales

Característica observada.	**Figura 1 a): (campo claro, aumento intermedio).**	**Figura 1 b): (campo completo, aumento menor).**	**Interpretación compatible con *Proteus spp.***
Tinción de Gram	Células bacilares, coloración rosada	Células pequeñas y dispersas, coloración rosada clara	Gram negativa, consistente con *Proteus*
Morfología celular	Bacilos cortos, rectos, algunos agrupados	Bacilos distribuidos homogéneamente en todo el campo	Bacilos cortos y móviles
Distribución en campo	Agrupamientos irregulares, dispersión variable	Alta concentración, posiblemente crecimiento rápido	Compatible con su rápido crecimiento
Presencia de agrupaciones tipo "enjambre"	Algunas zonas con agrupación densa en patrón irregular	Áreas densas que podrían indicar movilidad tipo enjambre	Característico de *Proteus mirabilis* o *vulgaris*
Coloración diferencial	Rosado tenue con centros más oscuros	Rosado uniforme	Propio de tinciones Gram para bacilos gramnegativos
Sospecha de cápsula	No evidente	No evidente	No capsulada típicamente
Compatibilidad con medios selectivos (no visible aquí)	—	—	Crece en agar MacConkey como colonias incoloras por no fermentar lactosa

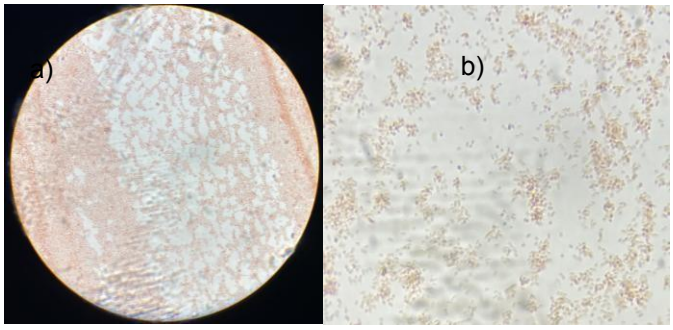


Figura 1. a) campo claro aumento intermedio, **b)** campo completo aumento menor

Cuantificación de los fármacos

Con la configuración de los humedales se logró la remoción casi por completo del medio. El humedal adicionado con ciprofloxacina en un tiempo de 4 días logró la remoción ≥98%, en comparación de los humedales adicionados con paracetamol y amoxicilina que hasta el día 7 de muestreo se logró observar un comportamiento similar (Figura 2).

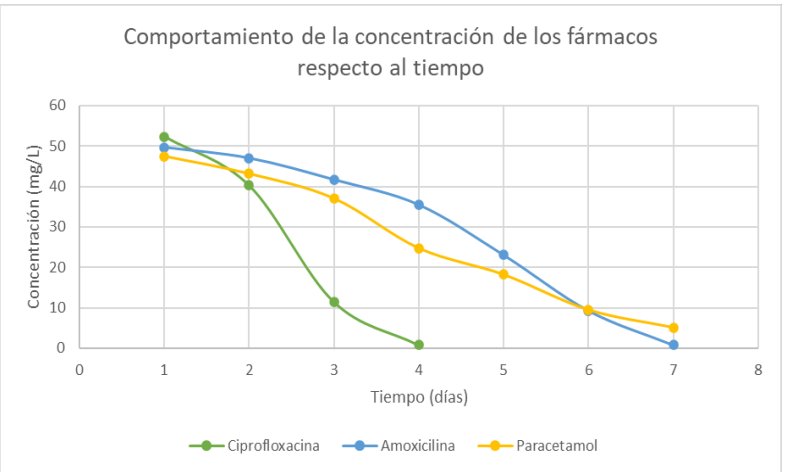


Figura 2. Comportamiento de la concentración de los fármacos de su respectivo humedal a través de los días de muestreo.

La remoción por parte de los humedales adicionados con ciprofloxacina y amoxicilina fue de ≥98%, mientras que el humedal adicionado con paracetamol presenta una remoción ≥89%. Lo anterior muestra que los humedales adicionados con antibióticos tienen una mayor remoción en comparación del humedal adicionado con analgésico (Figura 3).

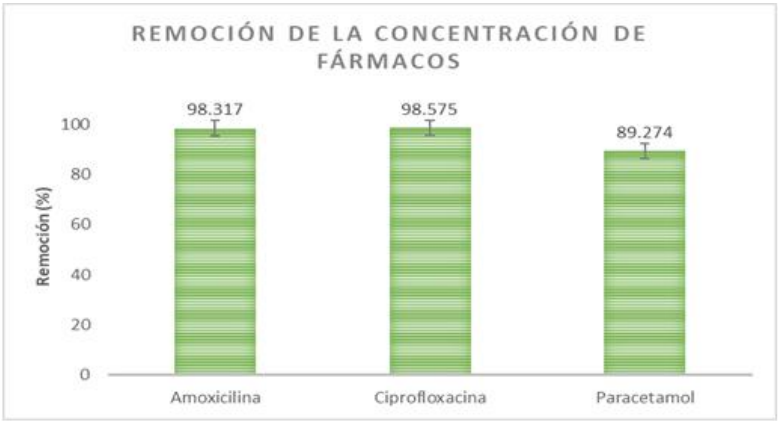


Figura 3. Remoción de los fármacos de cada humedal con una desviación estándar de aproximadamente n= 1.8, donde el humedal adicionado con paracetamol fue el que tuvo menor porcentaje de remoción.

Adsorción de la piedra volcánica

En la siguiente tabla se muestra la cantidad de amoxicilina que se encuentra en la superficie de la piedra volcánica.

Tabla 6. Relación de la concentración de amoxicilina respecto a la cantidad de piedra volcánica.

Masa de piedra volcánica (g)	Concentración de amoxicilina (mg/L)	Relación fármaco-piedra Volcánica (%)
1	0.0378	0.0378

La relación anterior se tomó del humedal con amoxicilina con una concentración de 100 mg/L. Se observa que la relación tiene un valor pequeño de remoción del fármaco.

ANÁLISIS DE RESULTADOS

La elección del medio de cultivo para aislar los agentes etiológicos depende de la naturaleza de la muestra y de los patógenos sospechosos. Para muestras de pus y orina, se utilizan comúnmente agar sangre y agar MacConkey. El *Proteus* crece en la placa de agar sangre en oleadas sucesivas, formando una fina capa de círculos concéntricos (enjambre). El *Proteus* no crece enjambre en el medio de agar MacConkey y forma colonias lisas, pálidas o incoloras (NLF).

Las especies del género *Proteus*, particularmente *P. mirabilis* y *P. vulgaris*, presentan un patrón de crecimiento característico en medios sólidos como agar sangre, donde forman un patrón concéntrico conocido como “enjambre” (swarming), debido a su alta motilidad [28]. No obstante, en agar MacConkey, al ser un medio que contiene sales biliares y cristal violeta, este tipo de motilidad suele inhibirse, y *Proteus* crece formando colonias pálidas o incoloras, ya que son lactosa no fermentadoras (NLF). Esto último coincide con lo observado en el presente experimento, donde las colonias formadas no presentaron pigmentación rosada, lo cual indica la no fermentación de la lactosa [17].

En las imágenes obtenidas por microscopía en laboratorio, se aprecian estructuras celulares compatibles con bacilos Gram negativos, con tinciones que muestran distribución irregular y posible aglomeración en ciertas zonas del campo visual, lo que podría corresponder al comportamiento típico de *Proteus spp*., conocido por su capacidad de agregación celular y secreción de ureasa, que alcaliniza el medio [18]. Aunque el medio MacConkey no permite observar directamente la alcalinización, sí es útil para inferirla indirectamente por el tipo de crecimiento y coloración observada. Adicionalmente, estudios recientes han mostrado que *Proteus* puede modular su fenotipo de crecimiento dependiendo del entorno químico del medio. La capacidad de *Proteus mirabilis* para formar biopelículas y alterar el pH del ambiente mediante producción de amoníaco (por la acción de la ureasa) es una característica clave en su colonización de ambientes diversos, incluidos sistemas naturales como los humedales [19].

El hecho de haber aislado bacterias con características compatibles con *Proteus spp* en un entorno de rizoma sugiere una posible participación de este género bacteriano en la degradación de materia orgánica o en procesos de transformación nitrogenada dentro del humedal artificial. Esto es relevante desde una perspectiva ecológica y biotecnológica, ya que estas bacterias podrían contribuir al tratamiento de aguas mediante la descomposición de compuestos nitrogenados [20].

El comportamiento de los fármacos ciprofloxacina, amoxicilina y paracetamol dentro de los humedales construidos estuvo determinado por la combinación de varios mecanismos de remoción, como la adsorción en el sustrato, la fotodegradación por exposición solar, la fitorremediación por las plantas utilizadas y la biodegradación asociada a la rizosfera. Cada uno de los humedales fue expuesto a condiciones ambientales similares, con configuraciones homogéneas en cuanto sustrato (roca volcánica utilizando tres diferentes granulometrías), vegetación (*Typha domingensis* y *Schoenoplectus acutus)* y volumen tratado. A pesar de esta uniformidad, se observaron diferencias en la eficiencia y el tiempo de remoción según el tipo de fármaco.

La ciprofloxacina presentó una remoción superior al 98% en apenas cuatro días, lo cual una de las razones puede ser por su alta sensibilidad a la radiación ultravioleta (UV) proveniente del sol. Estudios previos han demostrado que esta fluoroquinolona se fotodegrada rápidamente en soluciones acuosas mediante fotólisis directa, con tiempo de semivida muy bajos (menores a 3 minutos) en condiciones de pH neutro, debido a mecanismos como la defluoración, ruptura del anillo piperazínico y oxidación aromática inducida por la luz [21, 22]. Este comportamiento se vio favorecido por la exposición directa del humedal a la radiación solar, como se puede observar en las cinéticas que se muestran en el apartado de anexos, donde hay mayor disminución de la concentración del fármaco en un día soleado en comparación de un día nublado.

En el caso de la amoxicilina, la remoción también superó el 98%, aunque el tiempo necesario fue de siete días, Este fármaco β-lactámico es más estable frente a la fotodegradación directa, pero sufre

procesos de hidrolisis en medio acuoso, especialmente en presencia de materia orgánica y microorganismos [23]. En humedales, se ha observado que la materia orgánica disuelta y la actividad del biofilm radicular favorecen procesos de fotólisis indirecta y biodegradación, los cuales explican la eliminación progresiva de la amoxicilina [24].

El paracetamol, por otro lado, mostró una remoción ligeramente menor, alcanzando un valor promedio del 89% en siete días. Este comportamiento es coherente si tomamos en cuenta la fotoestabilidad frente a la radiación solar; el paracetamol no absorbe significativamente en el espectro UVA-visible y presenta degradación lenta incluso bajo la radiación ultravioleta C (UVC), a menos que esté acompañado de un fotocatalizador como TiO_2 [25]. Por lo tanto, su eliminación en los humedales probablemente se debió principalmente procesos de adsorción en el sustrato y a biodegradación facilitada por lo microorganismos asociados a las raíces de las plantas utilizadas, aunque en menor medida que en los antibióticos.

La eficiencia de los humedales construidos para eliminar contaminantes como es el caso de los fármacos mencionados depende de una variedad de factores como el proceso de adsorción, biodegradación y adsorción por plantas. El uso del sustrato (piedra volcánica) representa una alternativa de mejorar para la remoción de los compuestos presentes en nuestra agua residual [26, 27].

La estructura de la piedra volcánica influye directamente en la capacidad de adsorción dentro del humedal debido a sus características físicas y químicas, como lo puede ser:

Porosidad y tamaño de partícula: el tipo de porosidad que la roca volcánica presenta tiene la capacidad de retener y adsorber en sus medios porosos las moléculas. Partículas más pequeñas ofrecen una mayor superficie específica, lo que favorece una mayor adsorción [27].

Superficie específica: esta es una de sus características más destacables, por su alta superficie específica, que puede variar entre 8 y 20 m^2/g [28]. La estructura porosa y rugosa que presenta la piedra volcánica aumenta la superficie de contacto para que los fármacos interactúen con el sustrato, favoreciendo así, la adsorción física y química.

Composición química: la piedra volcánica contiene minerales como calcio, magnesio y entre otros el cual, influye en interacciones iónicas, los cuales, le confieren una carga superficial variable y una afinidad selectiva hacia distintos compuestos orgánicos [29].

Por tanto, estas características que presenta la piedra volcánica son clave para su función como adsorbente en el HA, ya que los resultados obtenidos sugieren que la piedra volcánica no solo sirve como un soporte físico para el crecimiento microbiano y la aireación del humedal, sino que también contribuye significativamente en la retención del agua residual mediante su mecanismo de adsorción.

La presencia de contaminantes emergentes como fármacos en cuerpos de agua ha generado un creciente interés en el uso de soluciones sostenibles, como los humedales artificiales con plantas acuáticas, para su tratamiento. Entre estas plantas destacan los juncos (*Juncus spp.*) y los tules *(Typha spp*.), por su alta capacidad de absorción, resistencia a contaminantes y su interacción con comunidades microbianas rizosféricas. Esta discusión aborda la interacción metabólica y de eliminación de tres fármacos relevantes: amoxicilina, paracetamol y ciprofloxacina, en sistemas que involucran estas especies vegetales utilizadas como modelo (*Typha domingensis* conocido como tule y *Schoenoplectus acutus* conocido como junco), los cuales fueron extraídos de la laguna de Tecocomulco perteneciente al estado de Hidalgo, la cual es un sitio RAMSAR, donde en su entorno entran aguas residuales, incluyendo aguas con hidrocarburos y otros contaminantes como la presencia de heces fecales de la ganadería presente y fauna local.

Paracetamol y su remoción por juncos

El paracetamol, uno de los analgésicos más comúnmente detectados en aguas residuales, ha sido objeto de estudio en humedales construidos que emplean *Scirpus grossus,* un tipo de junco. En un

estudio experimental, se observó una eliminación del fármaco entre 5 % y 33 % después de 21 días, cuando fue aplicado a una concentración inicial de 60 µg/L. La remoción se atribuyó a una combinación de mecanismos como la adsorción en raíces, la captación vegetal directa (uptake) y la biodegradación mediada por rizobacterias [30].

Estos hallazgos sugieren que las especies de junco pueden desempeñar un papel importante en la mitigación de contaminantes farmacéuticos, aunque su eficiencia puede depender de variables como el tiempo de retención, la concentración inicial del contaminante y la salud del sistema vegetal-microbiano.

Amoxicilina: perspectivas de degradación en plantas acuáticas

La amoxicilina, un antibiótico betalactámico de uso extendido, representa una amenaza ambiental debido a su persistencia y capacidad de inducir resistencia bacteriana. Aunque no se han encontrado estudios específicos sobre la remoción de amoxicilina por juncos o tules, se han realizado investigaciones con otras plantas acuáticas como *Spirodela polyrhiza* (lenteja de agua), que han demostrado una eficiencia notable en la eliminación del fármaco (84.6–100 %) en comparación con controles sin vegetación (62.1–73 %) [31].

La eliminación se atribuye en parte a mecanismos metabólicos activos por parte de la planta, indicando que es capaz de absorber y transformar el antibiótico, además de facilitar procesos de fotodegradación y biodegradación. Dado que *Typha* y *Juncus* poseen características morfológicas y fisiológicas similares, como raíces fibrosas y elevada superficie de contacto, se puede hipotetizar que también son capaces de contribuir significativamente a la eliminación de antibióticos como la amoxicilina en sistemas de tratamiento con humedales artificiales.

Además, se ha observado la presencia de *Spirodela polyrhiza* en cuerpos de agua como la laguna de Tecocomulco, donde coexiste con otras especies como tule (*Typha*) y junco (*Juncus*). Esta coexistencia sugiere un posible efecto sinérgico que podría mejorar la eficiencia del tratamiento en humedales artificiales, lo cual representa una línea importante de investigación futura.

Ciprofloxacina y potencial de absorción por macrófitas

La ciprofloxacina, una fluoroquinolona de amplio espectro, presenta una mayor complejidad estructural y una persistencia ambiental superior. En estudios realizados con *Eichhornia crassipes* (jacinto de agua), se ha demostrado una notable capacidad de acumulación en raíces (hasta 3711 µg/g), así como la formación de múltiples metabolitos secundarios, producto de desmetilación, oxidación y conjugación [32]. Esto indica que las plantas no solo retienen el fármaco, sino que pueden participar activamente en su transformación metabólica.

Aunque este estudio no incluye juncos o tules directamente, evidencia un patrón común en las macrófitas: la participación vegetal en la transformación de antibióticos. Dado que *Typha latifolia* ha mostrado capacidades comparables en la remoción de otros antiinflamatorios como diclofenaco y naproxeno, con eficiencias superiores al 60 %, se considera altamente probable que especies como los tules puedan desempeñar un papel similar frente a ciprofloxacina [33].

Interacciones farmacocinéticas relevantes

Aunque no pertenecen estrictamente al metabolismo vegetal, vale la pena considerar interacciones farmacológicas que ocurren entre estos compuestos, pues pueden influir en su destino ambiental. Por ejemplo, se ha documentado que la coadministración de paracetamol y ciprofloxacina en humanos incrementa el área bajo la curva (AUC) de esta última en aproximadamente 16 %, lo que implica una posible sinergia o interferencia metabólica que también podría reproducirse en ambientes con co-contaminación. Además, se ha reportado que la ciprofloxacina reduce la concentración pico de paracetamol en saliva y retrasa su absorción, prolongando su semivida [34].

Estas interacciones podrían afectar la degradación simultánea de ambos fármacos en ambientes donde coexisten, como es frecuente en aguas residuales urbanas. Este tipo de sinergias sugiere que

estudios futuros en humedales deberían considerar la dinámica de múltiples compuestos en vez de fármacos aislados.

CONCLUSIONES

Se observó que los humedales construidos presentaron tasas de remoción superiores al 98% para ciprofloxacina y amoxicilina, mientras que el paracetamol alcanzó una eficiencia cerca al 89%. Este comportamiento diferencial puede atribuirse a las propiedades fisicoquímicas de cada compuesto, en especial su susceptibilidad a procesos de fotodegradación, biodegradación y adsorción. En el caso de la ciprofloxacina, su elevada fotolabilidad en condiciones de radiación solar directa facilitó una rápida eliminación en un periodo de apenas cuatro días. La amoxicilina, aunque menos fotodegradable, fue efectivamente removida en siete días, presumiblemente mediante mecanismos de hidrólisis y biotransformación microbiana en la rizosfera. Por otro lado, el paracetamol mostró mayor persistencia, probablemente por su baja absorción en el espectro UV-visible y su limitada capacidad de adsorción o biotransformación en comparación con los antibióticos.

La adsorción en el sustrato de roca volcánica jugó un papel clave en el proceso de remoción, dado que esta presenta una elevada porosidad, superficie específica amplia y composición química favorable para interacciones iónicas con moléculas orgánicas. Sin embargo, se observó que, en condiciones estáticas, la retención directa del fármaco por el sustrato fue baja, lo que refuerza la hipótesis de que la remoción fue el resultado sinérgico de múltiples mecanismos, entre ellos la actividad vegetal y microbiana.

El papel de las especies vegetales utilizadas *Typha domingensis* (tule) y *Schoenoplectus acutus* (junco) fue central no solo en términos de fitorremediación, sino también por su capacidad para sustentar comunidades microbianas rizosfericas activas. Las pruebas microbiológicas revelaron la presencia de bacterias compatibles con el género *Proteus*, particularmente *P. mirabilis*, conocido por su capacidad de formar biopelículas, secretar ureasa y degradar compuestos nitrogenados. Estas cepas podrían estar desempeñando un rol relevante en la transformación de fármacos, especialmente aquellos con grupos funcionales susceptibles a hidrolisis o reacciones de óxido-reducción.

BIBLIOGRAFÍA

1. Esponda, G. (2001). *Contaminación del agua y su impacto ambiental*. México: Trillas.
2. Rodríguez-Monroy, V., & Durán de Bazúa, M. (2006). *Tratamiento de aguas residuales: Fundamentos y aplicaciones*. México: Limusa.
3. Comisión Nacional del Agua. (2007). *Estadísticas del agua en México* (Edición 2007). México: CNA.
4. Fent, K., Weston, A. A., & Caminada, D. (2006). Ecotoxicology of human pharmaceuticals. *Aquatic Toxicology, 76*(2), 122–159.https://doi.org/10.1016/j.aquatox.2005.09.009
5. Klamerth, N., Rizzo, L., Malato, S., Maldonado, M. I., Agüera, A., & Fernández-Alba, A. R. (2010). Degradation of fifteen emerging contaminants at µg L−1 initial concentrations by mild solar photo-Fenton in MWTP effluents. *Water Research, 44*(2), 545–554. https://doi.org/10.1016/j.watres.2009.11.020
6. Zhang, D., Gersberg, R. M., Ng, W. J., & Tan, S. K. (2014). Removal of pharmaceuticals and personal care products in aquatic plant-based systems: a review. *Environmental Pollution, 184*, 620–639. https://doi.org/10.1016/j.envpol.2013.10.047
7. Rizzo, L., Manaia, C., Merlin, C., Schwartz, T., Dagot, C., Ploy, M. C., ... & Fatta- Kassinos, D. (2013). Urban wastewater treatment plants as hotspots for antibiotic resistant bacteria and genes spread into the environment: a review. *Science of the Total Environment, 447*, 345–360. https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2013.01.032
8. Kkj Fenoglio, M. (2000). Humedales construidos: Una tecnología de tratamiento de aguas residuales. *Ingeniería Sanitaria y Ambiental, 2*(3), 25–33.

9. Cooper, P. (1999). A review of the design and performance of vertical-flow and hybrid reed bed treatment systems. *Water Science and Technology, 40*(3), 1–9. https://doi.org/10.2166/wst.1999.0131
10. Gerba, C. P., Pepper, I. L., & Whitehead, L. F. (1999). A risk assessment of emerging pathogens of concern in the land application of biosolids. *Water Environment Research, 71*(5), 775–779. https://doi.org/10.2175/106143099X143111
11. Miranda, A. (2000). *Tecnologías alternativas para el tratamiento de aguas residuales domésticas*. México: Universidad Autónoma Metropolitana.
12. Brix, H., Arias, C. A., & Johansen, N. H. (2001). Treatment of agricultural drainage water in constructed wetlands in Denmark—the role of macrophytes. *Water Science and Technology, 44*(11–12), 47–54. https://doi.org/10.2166/wst.2001.0765
13. Faulkner, S. P., & Richardson, C. J. (1989). Physical and chemical characteristics of freshwater wetland soils. In A. L. Ward, D. E. Davis, & K. M. Kilgore (Eds.), *Wetlands: Concerns and successes* (pp. 41–72). Bethesda, MD: American Water Resources Association.
14. Gopal, B. (1999). Natural and constructed wetlands for wastewater treatment: Potentials and problems. *Water Science and Technology, 40*(3), 27–35. https://doi.org/10.2166/wst.1999.0134
15. Delgadillo López, A. E. (2012). *Determinación de parámetros fisicoquímicos, estado eutrófico y metales pesados de la laguna de Tecocomulco, Hidalgo; identificación de compuestos quelantes de Hydrocotyle ranunculoides L. f.* [Tesis doctoral, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo].
16. Levinson, W. (2020). Review of Medical Microbiology and Immunology (16th ed.). McGraw-Hill Education.
17. Shaikh, S., Fatima, J., Shakil, S., Rizvi, S. M. D., & Kamal, M. A. (2021). Urease: a virulence factor of Proteus mirabilis and its role in pathogenesis. European Journal of Clinical Microbiology & Infectious Diseases, 40, 169–180. https://doi.org/10.1007/s10096-020-04018-y
18. Armbruster, C. E., Smith, S. N., & Mobley, H. L. (2018). Proteus mirabilis: Pathogenesis, diagnosis, and treatment of complicated urinary tract infection. Nature Reviews Microbiology, 16(9), 509–520. https://doi.org/10.1038/s41579-018-0043-4
19. Wang, L., Fan, H., & Wang, S. (2022). Nitrogen removal and bacterial community dynamics in a constructed wetland. Environmental Science and Pollution Research, 29, 12350–12363. https://doi.org/10.1007/s11356-021-16006-z
20. Novikov, M. V., Snytnikova, O. A., Fedunov, R. G., Yanshole, V. V., Grivin, V. P., Plyusnin, V. F., Xu, J., & Pozdnyakov, I. P. (2023). A new view on the mechanism of UV photodegradation of fluoroquinolone antibiotic ciprofloxacin in aqueous solutions. Chemosphere, 329, 138652. https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.138652
21. Ge, L., Li, K., Zhang, S., Na, G., Zhang, P., Ren, H., Yao, Z. (2015). New insights into the aquatic photochemistry of fluoroquinolone antibiotics: Direct photodegradation, hydroxyl-radical oxidation, and antibacterial activity changes. *Science of the Total Environment, 527–528*, 12–17. https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2015.04.099}
22. Ali, M. H., & Maafa, I. M. (2024). Photodegradation of amoxicillin in aqueous systems: A review. *International Journal of Molecular Sciences, 25*(17), 9575. https://doi.org/10.3390/ijms25179575
23. Xu, H., Cooper, W.J., Jung, J., Song, W. (2011). Photosensitized degradation of amoxicillin in natural organic matter isolate solutions. *Water Research, 45*(2), 632- 638. https://doi.org/10.1016/j.watres.2010.08.024
24. Yang, L., Yu, M., & Ray, M. B. (2008). Degradation of paracetamol in aqueous solutions by TiO_2 photocatalysis. *Water Research, 42*(13), 3480–3486. https://doi.org/10.1016/j.watres.2008.04.023
25. Tejeda Cruz, C., Monroy Aguirre, M. del R., C Chávez Galán, L. (2017). *Adsorption capacity of a volcanic rock used in constructed wetlands for carbamazepine removal and its modification with biofilm growth*. Water, 9(9), 721. https://doi.org/10.3390/w9090721
26. Ojeda Pérez, M. D. L., Monroy Aguirre, M. R., y Tejeda Cruz, C. (2023). *Volcanic rock as low-cost media for constructed wetlands: Adsorption and biofilm formation during carbamazepine removal*. Land, 12(2), 472. https://doi.org/10.3390/land12020472
27. Ramírez Hernández, J., Morales Sánchez, E., y González-Pérez, A. (2020). *Caracterización fisicoquímica del tezontle para su uso en procesos de tratamiento de aguas*. Revista Mexicana de Ingeniería Química, 19(1), 187–199. https://doi.org/10.24275/rmiq/IA419
28. González Olmos, R., Plaza, A., García, J., Garrido, L., y Ballesteros, R. (2013). *Evaluation of natural*

volcanic rock for wastewater treatment in constructed wetlands. Chemical Engineering Journal, 217, 475–483. https://doi.org/10.1016/j.cej.2012.12.066

29. Al Falahi, O. A., et al. (2022). Removal of pharmaceutical micropollutants in cons Opanotechnology, Monitoring & Management,17,100752. https://doi.org/10.1016/j.enmm.2021.100752
30. Gupta, A., et al. (2022). Phytoremediation of amoxicillin using Spirodela polyrhiza in aquatic systems. Science of the Total Environment, 830, 154784.
31. Liu, X., et al. (2023). Uptake and metabolic transformation of ciprofloxacin in water hyacinth (Eichhornia crassipes). Environmental Chemistry Letters, 21, 201–214. https://doi.org/10.1007/s44169-023-00039-9
32. Jiménez-Cisneros, B. E., et al. (2023). Capacidad de Typha latifolia para remover contaminantes emergentes en humedales artificiales. Revista Mexicana de Ciencias Ambientales, 14(1), 35–50.
33. Colombo, G., et al. (2007). Interaction between ciprofloxacin and paracetamol: Evidence from AUC and plasma clearance studies. Clinical Pharmacokinetics, 46(2), 139–145.

PREVALENCIA DE ENTEROPARÁSITOS EN HORTALIZAS DE HOJA VERDE COMERCIALIZADAS EN DOS MERCADOS DE CHILPANCINGO DE LOS BRAVO, GUERRERO

Luis Fernando Ramos Montalván, Blanca Esthela Álvarez Fernández, Luz Elena Ramos Arellano, Audrey Alessandra Carmona Álvarez, Sebastián Lorenzo Benito, Elizet Montañez Vázquez, Sofía Miranda Juárez y Aurora Castillo Laguna

Universidad Autónoma de Guerrero
blanca.alvarez@uagro.mx

RESUMEN

Las parasitosis intestinales continúan siendo un problema relevante de salud pública, especialmente en países en desarrollo, donde las condiciones ambientales y sanitarias favorecen su persistencia. Las hortalizas de hoja verde, particularmente aquellas consumidas crudas, pueden actuar como vehículos de transmisión de enteroparásitos cuando no se aplican prácticas adecuadas de saneamiento. El objetivo de este estudio fue analizar la prevalencia de enteroparásitos en hortalizas de hoja verde comercializadas en mercados de Chilpancingo de los Bravo, Guerrero, y evaluar su asociación con características de comercialización y morfología foliar. Se realizó un estudio observacional, transversal y analítico, en el que se analizaron 120 muestras de hortalizas de hoja lisa y rugosa adquiridas en dos mercados públicos. Las muestras se procesaron mediante técnicas parasitológicas convencionales, incluyendo lavado, concentración simple, observación en fresco con solución salina, tinción de yodo Lugol, tinción de Kinyoun y esporulación con dicromato de potasio. El análisis estadístico se realizó mediante la prueba de chi cuadrada, con un nivel de significancia de $p < 0.05$. La prevalencia general de contaminación parasitaria fue del 62.5%. Los protozoarios fueron los parásitos más frecuentes, destacando los ooquistes de *Cryptosporidium* spp., seguidos por *Cystoisospora* spp., *Blastocystis* spp., y *Cyclospora cayetanensis*. No se encontró asociación estadísticamente significativa entre la contaminación y el punto de venta, lugar de procedencia o tipo de saneamiento. Sin embargo, se observó una asociación significativa entre la morfología de la hoja y el poliparasitismo, así como entre el tipo de hortaliza y la carga parasitaria, siendo la lechuga italiana la más contaminada. Estos resultados evidencian un riesgo potencial para la salud pública y subrayan la necesidad de fortalecer las medidas de higiene y vigilancia sanitaria en la comercialización de hortalizas frescas.

INTRODUCCIÓN

Las parasitosis intestinales continúan representando un importante problema de salud pública a nivel mundial, especialmente en países en desarrollo donde las condiciones sanitarias, ambientales y socioeconómicas favorecen su transmisión. Se estima que anualmente se registran millones de nuevos casos de infecciones parasitarias, siendo América Latina, África y el Sudeste Asiático las regiones con las mayores tasas de prevalencia[1,2]. A pesar de su elevada frecuencia y de las consecuencias que generan sobre la salud humana, estas enfermedades siguen considerándose desatendidas debido a la limitada cobertura de programas de prevención, diagnóstico y control en muchas regiones del mundo[3].

Las enteroparasitosis son causadas principalmente por protozoarios y helmintos que colonizan el tracto gastrointestinal humano. Estas infecciones afectan a personas de todas las edades; sin embargo, los niños y las mujeres embarazadas constituyen algunos de los grupos más vulnerables debido a las repercusiones que pueden tener sobre el estado nutricional, el crecimiento y el desarrollo físico y cognitivo[4,5]. Se estima que alrededor de 3 500 millones de personas en el mundo están afectadas por algún tipo de parasitosis y que una proporción importante corresponde a habitantes de países de ingresos bajos y medios[6]. En América Latina, aproximadamente uno de cada tres niños presenta infección por parásitos intestinales[7]. En México, durante el 2021 se

reportaron cerca de 2.5 millones de casos de enteroparasitosis, lo que evidencia la persistencia de este problema de salud en la población[1].

La principal vía de transmisión de los enteroparásitos es la fecal-oral, mediante la ingestión de agua o alimentos contaminados con formas infectantes procedentes de materia fecal humana o animal. La contaminación puede ocurrir en cualquiera de las etapas de la cadena alimentaria, desde la producción agrícola hasta la comercialización y el consumo. Factores como el uso de agua contaminada para riego o lavado, la aplicación de fertilizantes orgánicos sin tratamiento adecuado y las deficientes prácticas de higiene durante la manipulación de los alimentos incrementan significativamente el riesgo de transmisión [5,8].

Las frutas y hortalizas constituyen componentes esenciales de una dieta saludable debido a su aporte de vitaminas, minerales, fibra y compuestos bioactivos. Su consumo ha aumentado en las últimas décadas como resultado de la adopción de hábitos alimentarios más saludables. Sin embargo, estos alimentos también pueden actuar como vehículos de transmisión de diversos agentes patógenos, incluidos bacterias, virus y parásitos, particularmente cuando son consumidos crudos o con un procesamiento mínimo antes de su ingesta[9,10].

Entre los vegetales de consumo habitual, las hortalizas de hoja verde presentan una especial relevancia epidemiológica debido a las características de su superficie foliar, que favorecen la retención y adherencia de estructuras parasitarias. Además, su consumo frecuente en fresco incrementa la probabilidad de transmisión de enteroparásitos al ser humano. Diversos estudios realizados en diferentes países han documentado la presencia de ooquistes, quistes, huevos y larvas de parásitos en lechuga, cilantro, espinaca y otras hortalizas de hoja verde comercializadas en mercados y establecimientos de venta al público[11,12,13]. La globalización de los sistemas de producción y distribución de alimentos ha incrementado la importancia de las enfermedades parasitarias transmitidas por alimentos frescos. En este contexto, las hortalizas de hoja verde han sido reconocidas como uno de los principales vehículos de transmisión de enteroparásitos, lo que ha motivado el fortalecimiento de los sistemas de vigilancia sanitaria en diversos países[14]. La contaminación de estos productos representa un riesgo potencial para la salud pública, especialmente en regiones donde las condiciones sanitarias son limitadas y los controles de inocuidad alimentaria son insuficientes[15].

En México la desigualdad de las clases sociales y deficiencias en la política sanitaria favorecen la persistencia de enfermedades parasitarias, particularmente en estados con elevados índices de marginación como el estado de Guerrero, el cual se encuentra entre las entidades con mayores niveles de pobreza del país, situación que puede incrementar la exposición de la población a factores de riesgo asociados con la transmisión de enteroparásitos[16]. No obstante, la información sobre la contaminación parasitaria de hortalizas de hoja verde comercializadas en los mercados locales del estado es limitada. Por lo anterior, resulta necesario generar evidencia que permita conocer la magnitud de este problema y contribuir al diseño de estrategias de prevención y control. En este contexto, el presente estudio tuvo como objetivo analizar la prevalencia de enteroparásitos en hortalizas de hoja verde comercializadas en mercados de Chilpancingo de los Bravo, Guerrero, y evaluar su asociación con características de comercialización y morfología foliar.

TEORÍA

Enteroparasitosis y enfermedades parasitarias transmitidas por alimentos

Las enteroparasitosis constituyen uno de los problemas de salud pública más persistentes a nivel mundial, particularmente en países de ingresos bajos y medios, donde las condiciones ambientales, sanitarias y socioeconómicas favorecen su transmisión. La Organización Mundial de la Salud estima que una proporción importante de la población mundial se encuentra afectada por parásitos intestinales, siendo América Latina, África y el Sudeste Asiático las regiones con mayor carga de enfermedad. Se calcula que alrededor de 3 500 millones de personas presentan alguna parasitosis intestinal y aproximadamente 450 millones desarrollan manifestaciones clínicas, mientras que en

México se registran millones de casos anualmente[1,3,7]. Los enteroparásitos se clasifican en protozoarios y helmintos, destacando por su importancia epidemiológica *Giardia lamblia*, *Entamoeba histolytica*, *Blastocystis* spp., *Ascaris lumbricoides*, *Trichuris trichiura* y *Schistosoma* spp. La transmisión ocurre principalmente por la vía fecal-oral, mediante el consumo de agua y alimentos contaminados con huevos, quistes, ooquistes o larvas infectantes[4,5].

En los últimos años, las enfermedades parasitarias transmitidas por alimentos han adquirido mayor relevancia debido a la globalización del comercio de productos agrícolas y al incremento en el consumo de alimentos frescos[17]. La Organización Mundial de la Salud reconoce a diversos protozoarios y helmintos como importantes agentes de enfermedades transmitidas por alimentos, representando un problema creciente para la seguridad alimentaria mundial. En este contexto, las frutas y hortalizas consumidas en fresco constituyen uno de los principales vehículos de transmisión, debido a que generalmente no reciben tratamientos térmicos capaces de eliminar las formas infectantes[7].

Hortalizas de hoja verde como vehículo de transmisión

Las frutas y hortalizas representan un componente esencial de una alimentación saludable debido a su aporte de vitaminas, minerales, fibra y compuestos antioxidantes. Su consumo ha aumentado considerablemente durante las últimas décadas; sin embargo, este incremento también ha resaltado la importancia de estos alimentos como potenciales vehículos de microorganismos patógenos, incluidos los enteroparásitos[9,18,19]. Las hortalizas de hoja verde presentan características morfológicas que favorecen la contaminación parasitaria. Su superficie irregular, la presencia de pliegues y una amplia área de contacto facilitan la adhesión y retención de quistes, ooquistes, huevos y larvas. Diversos estudios han demostrado que las hortalizas con superficies rugosas presentan mayores niveles de contaminación en comparación con aquellas de superficie lisa, lo que incrementa el riesgo cuando estos productos son consumidos crudos o insuficientemente desinfectados[9,20].

Además, los huevos de helmintos y los quistes de protozoarios presentan una elevada resistencia ambiental. Estas formas infectantes pueden permanecer viables durante semanas o incluso meses en el suelo, el agua y la superficie de los vegetales, soportando variaciones de temperatura y humedad. Particularmente, los huevos de *Ascaris lumbricoides* poseen una cubierta protectora que les confiere una notable resistencia, mientras que los quistes de *Giardia lamblia* y los ooquistes de *Cryptosporidium* spp., pueden sobrevivir a diferentes condiciones ambientales, favoreciendo su transmisión a través de los alimentos[21,22].

Factores asociados a la contaminación parasitaria de hortalizas

La contaminación parasitaria puede producirse en cualquier etapa de la cadena de producción y comercialización de los alimentos. Durante el cultivo, el uso de aguas residuales para riego, fertilizantes orgánicos insuficientemente tratados y la contaminación del suelo por materia fecal humana o animal constituyen importantes fuentes de contaminación[15,23]. Posteriormente, durante la cosecha, transporte y comercialización, diversos factores favorecen la contaminación cruzada. La manipulación excesiva, el lavado con agua contaminada, las deficientes prácticas higiénicas de los manipuladores y las condiciones sanitarias inadecuadas incrementan el riesgo de contaminación de las hortalizas[24,25].

Los mercados tradicionales representan un punto crítico dentro de esta cadena. La venta de productos al aire libre, la exposición al polvo ambiental, la presencia de animales domésticos y callejeros, así como el elevado contacto entre vendedores y consumidores, favorecen la contaminación de los productos agrícolas[21]. En Tailandia, se reportó que las hortalizas comercializadas en mercados abiertos presentaban un riesgo significativamente mayor de contaminación en comparación con las vendidas en establecimientos formales[23]. Las condiciones climáticas también desempeñan un papel importante. La temperatura y la humedad ambiental favorecen la supervivencia de las formas infectantes, observándose en algunos estudios una mayor prevalencia de contaminación durante las estaciones cálidas y húmedas.

Enteroparásitos reportados en hortalizas

Diversos estudios realizados en diferentes regiones del mundo han documentado la presencia de enteroparásitos en hortalizas destinadas al consumo humano. Entre las especies más frecuentemente identificadas destacan *Ascaris* spp., *Giardia lamblia*, *Entamoeba* spp., *Trichuris trichiura*, anquilostómidos, *Balantidium coli* y *Blastocystis* spp[26].

En Etiopía se ha reportado contaminación en más de un tercio de las frutas y verduras analizadas, siendo *Ascaris lumbricoides* y *Entamoeba* spp. los principales parásitos encontrados[24]. En Brasil, Perú y Tailandia también se han descrito elevadas prevalencias de contaminación en lechugas y otras hortalizas de consumo frecuente, identificando tanto helmintos como protozoarios intestinales[23,27].

En México, la información sobre contaminación parasitaria en hortalizas aún es limitada. No obstante, estudios realizados en Guerrero han documentado una elevada frecuencia de enteroparásitos en la población humana, incluyendo *Ascaris* spp., *Entamoeba coli*, *Endolimax nana* y *Giardia lamblia*, lo que refleja condiciones ambientales y sanitarias favorables para la transmisión de estas infecciones[16].

Importancia en salud pública

La transmisión de enteroparásitos constituye un problema complejo en el que intervienen factores humanos, animales y ambientales. El enfoque One Health reconoce que la salud humana está estrechamente relacionada con la salud animal y la calidad del ambiente, considerando que la contaminación de los alimentos puede originarse por reservorios animales, actividades agrícolas y deficiencias en el saneamiento ambiental[7,24].

En este contexto, las hortalizas de hoja verde representan un punto de convergencia entre estos factores, ya que pueden contaminarse durante la producción agrícola, el transporte y la comercialización. La presencia de animales en las áreas de cultivo y mercados, el manejo inadecuado de residuos y el uso de agua contaminada favorecen la persistencia de los ciclos de transmisión parasitaria[13,21].

Prevención y relevancia del estudio

La prevención de las enfermedades parasitarias transmitidas por alimentos requiere estrategias integrales que incluyan el tratamiento adecuado de aguas residuales, la implementación de buenas prácticas agrícolas, el uso seguro de fertilizantes orgánicos, el fortalecimiento de las medidas higiénico-sanitarias durante la comercialización y la educación sanitaria de productores, comerciantes y consumidores[26,27].

En México, y particularmente en el estado de Guerrero, las condiciones socioeconómicas y sanitarias favorecen la persistencia de las enteroparasitosis. La elevada marginación social, las limitaciones en infraestructura sanitaria y la importancia de los mercados tradicionales como centros de distribución de alimentos frescos convierten a las hortalizas de hoja verde en un potencial vehículo de transmisión de enteroparásitos. En consecuencia, la determinación de la prevalencia de enteroparásitos en hortalizas de hoja verde comercializadas en mercados de Chilpancingo de los Bravo, Guerrero, representa una herramienta importante para la vigilancia epidemiológica y la inocuidad alimentaria. La información generada permitirá identificar riesgos potenciales para la población, fortalecer las estrategias de prevención y contribuir al desarrollo de políticas orientadas a mejorar la seguridad alimentaria y la salud pública.

PARTE EXPERIMENTAL

Diseño del estudio y recolección de muestras

Se realizó un estudio observacional, transversal y analítico en el que se analizaron 120 muestras de hortalizas de hoja lisa y rugosa adquiridas en dos mercados públicos. La recolección de muestras se llevó a cabo en puntos de venta seleccionados ubicados dentro y en las inmediaciones de los mercados públicos de la ciudad de Chilpancingo de los Bravo, Guerrero. Previo a la recolección de

muestras, se aplicó un cuestionario estructurado a los responsables de los establecimientos con el propósito de obtener información sobre la procedencia de las hortalizas y las prácticas de saneamiento implementadas antes de su comercialización. Asimismo, se solicitó la firma de una carta de consentimiento y confidencialidad, mediante la cual se garantizó que la identidad de los participantes y de los establecimientos permanecería en el anonimato durante el desarrollo del estudio y la difusión de sus resultados.

Cada muestra recolectada fue identificada mediante un número de folio, lo que permitió su seguimiento durante el procesamiento y análisis de laboratorio sin comprometer la confidencialidad de la información. Posteriormente, las hortalizas seleccionadas se colocaron individualmente en bolsas de polietileno tipo Ziploc previamente etiquetadas. Las muestras fueron transportadas en una hielera hasta el Laboratorio de Investigación en Nutrición y Salud de la Facultad de Ciencias Químico Biológicas, donde se realizó su procesamiento parasitológico. El traslado se efectuó minimizando el tiempo transcurrido entre la recolección y el análisis, con el fin de preservar la integridad de las posibles formas parasitarias presentes y evitar alteraciones que pudieran afectar la confiabilidad de los resultados.

Preparación y análisis de las muestras

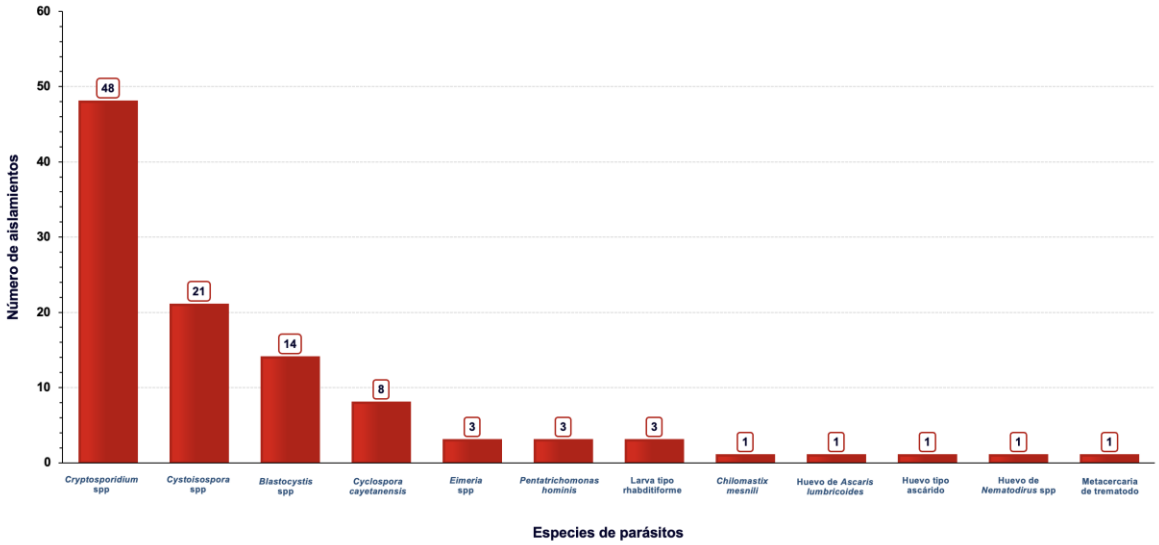
De cada tipo de hortaliza se seleccionaron y pesaron 100 g de hojas completas provenientes de las porciones externa, media e interna de cada muestra. Posteriormente, las hojas se colocaron en recipientes de vidrio a los que se adicionaron 300 mL de solución salina fisiológica al 0.85 %. Las muestras permanecieron cubiertas y en reposo durante 24 horas para favorecer el desprendimiento de posibles formas parasitarias adheridas a la superficie vegetal.

Una vez transcurrido este periodo, el líquido de lavado se recuperó y transfirió a tubos cónicos de 15 mL para su análisis parasitológico. La identificación microscópica de las diferentes formas evolutivas de los parásitos se realizó mediante el examen directo en fresco con solución salina fisiológica, técnica útil para la observación de estructuras móviles como los trofozoítos. Adicionalmente, se empleó la observación directa con solución de yodo-Lugol para resaltar características morfológicas específicas que facilitaran la identificación de quistes y otras estructuras parasitarias. Las observaciones se efectuaron utilizando dos microscopios ópticos de campo claro equipados con escalas micrométricas previamente calibradas, lo que permitió realizar mediciones precisas de las estructuras parasitarias observadas.

RESULTADOS

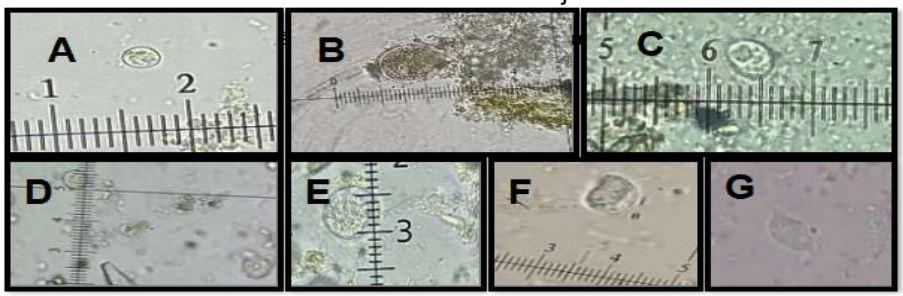
Se observó una prevalencia general de contaminación parasitaria del 62.5 % en las hortalizas analizadas. La distribución de las especies parasitarias identificadas se presenta en la **Gráfica 1**. Los ooquistes de *Cryptosporidium* spp., fueron los parásitos más frecuentemente detectados, con un total de 48 aislamientos, seguidos por *Cystoisospora* spp., (n = 21), *Blastocystis* spp. (n = 14) y *Cyclospora cayetanensis* (n = 8). Con menor frecuencia se identificaron *Eimeria* spp., *Pentatrichomonas hominis* y larvas tipo rabditoforme (n = 3 cada uno). Asimismo, se detectaron de manera esporádica *Chilomastix mesnili*, huevos de *Ascaris lumbricoides*, huevos tipo ascárido, nematodirus spp., y metacercarias de trematodo (n = 1 cada uno).

Gráfica 1. Frecuencia de parásitos identificados en el total de hortalizas analizadas.



En las muestras analizadas se identificaron principalmente protozoarios, destacando *Cryptosporidium* spp., *Cyclospora cayetanensis*, *Cystoisospora* spp., y *Blastocystis* spp., además de otros organismos observados con menor frecuencia. La identificación se realizó con base en las características morfológicas y morfométricas observadas mediante microscopía óptica. En la **Figura 1** se muestran microfotografías representativas de los principales protozoarios detectados en las hortalizas de hoja verde.

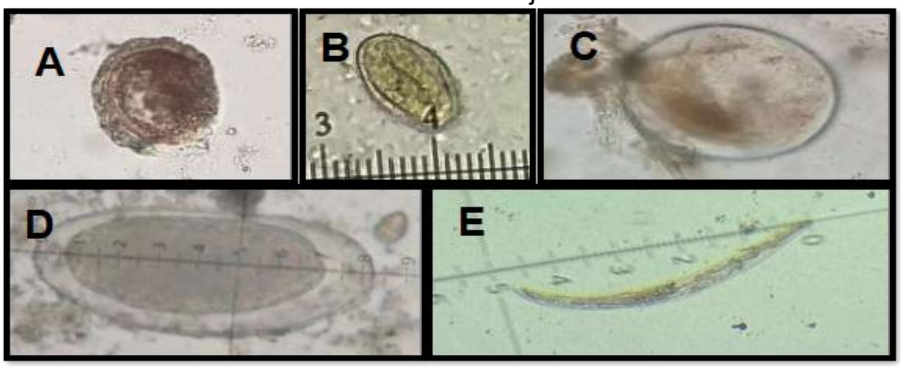
Figura 1. Protozoarios identificados en las hortalizas de hoja verde.



A) Ooquiste de *Cryptosporidium* spp., B) Ooquiste de *Cystoisospora* spp., C) Formas vacuolares de *Blastocystis* spp., D) Ooquiste de *Cyclospora cayetanensis*, E) Ooquiste de *Eimeria* spp., F) Trofozoito de *Chilomastix mesnili* y G) Trofozoito de *Pentatrichomonas hominis*. Microfotografías tomadas con objetivo 40X.

Asimismo, se identificaron estructuras compatibles con helmintos y otros estadios larvarios, aunque con una frecuencia considerablemente menor que la observada para los protozoarios. Entre ellos se encontraron huevos de *Ascaris lumbricoides*, huevos tipo ascárido, metacercarias de trematodos, *Nematodirus* spp., y larvas rabditoformes. Las características morfológicas de estas estructuras se presentan en la **Figura 2**.

Figura 2. Helmintos identificados en las hortalizas de hoja verde.



A) Huevo de *Ascaris lumbricoides*, B) Huevo tipo ascárido, C) Metacercaria de trematodo, D) Huevo de *Nematodirus* spp, y E) Larvas rabditiformes. Microfotografías tomadas con objetivos 10 y 40X.

El análisis estadístico mostró que ninguna de las variables generales evaluadas (punto de venta, lugar de procedencia, tipo de limpieza y morfología de la hoja) presentó una asociación estadísticamente significativa con la presencia o ausencia de contaminación parasitaria. No obstante, al analizar la carga parasitaria, definida como el número de especies parasitarias presentes simultáneamente en una misma muestra, se identificó una asociación significativa con la morfología de la hoja. Las hortalizas de hoja rugosa registraron una mayor frecuencia y diversidad de parásitos (n = 42) en comparación con las hortalizas de hoja lisa (n = 33). Además, el 100 % de las muestras con contaminación por tres especies parasitarias correspondió a hortalizas de hoja rugosa, diferencia que resultó estadísticamente significativa (p = 0.041). De manera similar, se observó una asociación significativa entre el tipo de hortaliza y el grado de contaminación parasitaria (p = 0.001). La lechuga italiana presentó el mayor número de muestras contaminadas (n = 28), así como la mayor proporción de poliparasitismo. Por el contrario, la lechuga romana, el cilantro y el pápalo mostraron menores niveles de contaminación (**Tabla 1**).

Tabla 1. Frecuencia de contaminación parasitaria en hortalizas según especie y morfología foliar.

Características	Total 120 (100%)	Sin presencia de parásitos	Contaminación por un parásito	Contaminación por dos parásitos	Contaminación por tres parásitos	Valor de *p*
Tipo de Hoja						
Lisa	60 (50%)	27 (60%)	25 (50%)	8 (42.1%)	0 (0%)	*0.041
Rugosa	60 (50%)	18 (40%)	5 (50%)	11 (57.9%)	6 (100%)	
Tipo de Hortaliza						
Lechuga Italiana	30 (25%)	2 (4.4%)	13 (26%)	10 (52.6%)	5 (83.3%)	*0.001
Lechuga Romana	30 (25%)	16 (35.6%)	12 (24%)	1 (5.4%)	1 (16.7%)	
Cilantro	30 (25%)	12 (26.7%)	14 (28%)	4 (21%)	0 (0%)	
Pápalo	30 (25%)	15 (33.3%)	11 (22%)	4 (21%)	0 (0%)	

Los datos muestran n (%) y valores de p por χ^2. *Estadísticamente significativo. Fuente: Elaboración propia con base en los resultados del estudio.

En relación con la frecuencia de contaminación por tipo de hortaliza, la lechuga italiana presentó la mayor prevalencia (n = 28), seguida del cilantro (n = 18), el pápalo (n = 15) y la lechuga romana (n

= 14). Asimismo, se identificaron diversas combinaciones de especies parasitarias en una misma muestra, principalmente en la lechuga italiana. Entre las formas parasitarias observadas se identificaron ooquistes de *Cryptosporidium* spp., *Cyclospora* cayetanensis y *Cystoisospora* spp., así como formas compatibles con *Blastocystis* spp. y, en menor proporción, huevos de helmintos. En una muestra se detectó la coexistencia de ooquistes de *Cyclospora cayetanensis*, formas de *Blastocystis* spp., y un huevo de *Ascaris lumbricoides*; en otra, ooquistes de *Cyclospora cayetanensis*, formas de *Blastocystis* spp. y una metacercaria de trematodo. Asimismo, se observó una muestra con trofozoítos de *Pentatrichomonas hominis*, ooquistes de *Cryptosporidium* spp., y ooquistes de *Cystoisospora* spp. Finalmente, dos muestras presentaron de manera simultánea ooquistes de *Cryptosporidium* spp., *Cyclospora cayetanensis* y *Cystoisospora* spp.

CONCLUSIONES

El presente estudio permitió determinar, por primera vez, la prevalencia de contaminación parasitaria en hortalizas de hoja verde comercializadas en los mercados de Chilpancingo de los Bravo, Guerrero. Se observó una prevalencia general del 62.5 %, lo que evidencia un riesgo potencial para la salud pública asociado al consumo de estos productos cuando no son sometidos a procesos adecuados de lavado y desinfección.

Los protozoarios constituyeron el grupo parasitario predominante, destacando los ooquistes de *Cryptosporidium* spp., seguidos por *Cystoisospora* spp y *Blastocystis* spp. En contraste, los helmintos se detectaron de manera esporádica y en bajas proporciones. Estos hallazgos sugieren que los protozoarios representan los principales agentes de contaminación parasitaria en las hortalizas evaluadas y constituyen un riesgo potencial de transmisión para la población consumidora.

Si bien no se identificaron asociaciones estadísticamente significativas entre la presencia de contaminación parasitaria y variables como el punto de venta, el lugar de procedencia o el tipo de limpieza reportado por los comerciantes, se observó una mayor frecuencia y diversidad de parásitos en determinadas hortalizas. En particular, las hortalizas de hoja rugosa, como la lechuga italiana, presentaron una mayor diversidad parasitaria y una mayor frecuencia de poliparasitismo, lo que sugiere que las características morfológicas de la superficie foliar podrían favorecer la adherencia y permanencia de estructuras parasitarias.

Asimismo, las hortalizas procedentes del municipio de Tixtla, Guerrero, y del estado de Puebla mostraron mayores porcentajes de contaminación en comparación con otras procedencias evaluadas. Aunque estas diferencias no fueron estadísticamente significativas, los resultados resaltan la importancia de fortalecer las medidas de saneamiento e higiene durante las etapas de producción, transporte, almacenamiento y comercialización de las hortalizas.

Finalmente, los hallazgos obtenidos ponen de manifiesto la necesidad de implementar programas de vigilancia sanitaria y estrategias de educación dirigidas a productores, distribuidores, comerciantes y consumidores, con el propósito de reducir el riesgo de transmisión de enteroparásitos y contribuir a la protección de la salud pública.

BIBLIOGRAFÍA

1. Oceguera-Segovia V, et al. Frequency of intestinal parasitic infections in elementary schools in Veracruz, Mexico. Rev Mex Pediatr. 2022;89(4):146-51. doi:10.35366/109589.
2. Aldas JE, Fiallos V, Rodriguez AO. Evaluación de las técnicas de flotación y coproparasitario en el diagnóstico de parasitosis intestinales en niños. Rev Cient Salud. 2025;5(1):232-42.
3. Zavala-Hoppe AN, et al. Epidemiología de la parasitosis en la población de América Latina. Polo Conoc. 2025;10(3):3-18. doi:10.23857/pc.v10i3.9032.
4. La E, et al. Prevalencia y factores de riesgo para parasitosis intestinales en niños de dos consejos populares de Guantánamo. Rev Cubana Med Trop. 2024;76:1-20.

5. Lara-Medina RO, et al. Prevalencia de *Blastocystis* sp. en niños en edad escolar de Reynosa, México. Infectio. 2022;26(2):145-8. doi:10.22354/in.v26i2.1013.
6. Mendoza S, et al. Uso potencial de las aguas residuales en la agricultura. Rev Mex Cienc Agríc. 2021;12(1):115-26.
7. Organización Panamericana de la Salud. Medios auxiliares para el diagnóstico de parasitosis intestinales. 2nd ed. Washington (DC): OPS; 2020.
8. Regassa K, et al. Prevalence and factors associated with intestinal parasites among food handlers in Medebay Zana District, North West Tigray, Northern Ethiopia. Trop Dis Travel Med Vaccines. 2021;7(1):2-7. doi:10.1186/s40794-020-00123-1.
9. Devera RA, Cova Martínez LR, Zaghab Sadek AM. Formas parasitarias de interés médico en muestras de lechugas comercializadas en el municipio Caroní, estado Bolívar, Venezuela. Rev Venez Salud Pública. 2021;9(1):20-36.
10. Li J, et al. Review of zoonotic amebiasis: epidemiology, clinical signs, diagnosis, treatment, prevention and control. Res Vet Sci. 2021;136:174-81. doi:10.1016/j.rvsc.2021.02.021.
11. Eraky MA, et al. Parasitic contamination of commonly consumed fresh leafy vegetables in Benha, Egypt. J Parasitol Res. 2014;2014:613960. doi:10.1155/2014/613960.
12. Punsawad C, et al. Prevalence of parasitic contamination of raw vegetables in Nakhon Si Thammarat Province, southern Thailand. BMC Public Health. 2019;19(1):34. doi:10.1186/s12889-018-6358-9.
13. El Safadi D, Osman M, Hanna A, Hajar I, Kassem I, Khalife S, et al. Parasitic contamination of fresh leafy green vegetables sold in northern Lebanon. Pathogens. 2023;12(8):1014. doi:10.3390/pathogens12081014.
14. Berrouch S, et al. Detection methods and prevalence of transmission stages of Toxoplasma gondii, Giardia duodenalis and *Cryptosporidium* spp. in fresh vegetables: a review. Parasitology. 2020;147(5):516-32. doi:10.1017/S0031182020000086.
15. Santos DEO, et al. Occurrence of parasites in waters used for crop irrigation and vegetables from the Savannah of Bogotá, Colombia. Environ Sci Pollut Res Int. 2024;31(23):33360-70. doi:10.1007/s11356-024-33088-1.
16. Villalobos N, et al. Tenencia de cerdos y letrinas como factores de riesgo de parasitosis intestinales en dos comunidades de Guerrero, México. Rev MVZ Córdoba. 2024;29(3). doi:10.21897/rmvz.3400.
17. Adam RD. Giardia duodenalis: biology and pathogenesis. Clin Microbiol Rev. 2021;34(4):e00024-19. doi:10.1128/CMR.00024-19.
18. Bracho-Mora AM, et al. Determinación de parásitos en Lactuca sativa expendidas en el mercado central de Portoviejo, Ecuador. Kasmera. 2022;50:1-9. doi:10.5281/zenodo.5812660.
19. Li J, et al. Detection of human intestinal protozoan parasites in vegetables and fruits: a review. Parasites & Vectors. 2020;13(1):380. doi:10.1186/s13071-020-04255-3.
20. Narkkul U, et al. Prevalence of intestinal parasite contamination in raw vegetables and school soil samples in Koh Yao, Phang Nga Province, southern Thailand. PLoS One. 2025;20(4):e0320929. doi:10.1371/journal.pone.0320929.
21. González KL, Rivas RE, Sandoval N. Aguas, suelos y hortalizas como fuente potencial de enteroparásitos en niños de la escuela Majara, Capira. Tecnociencia. 2018;20(1):5-26.
22. Arias S, Bejarano M, Romero P. Comportamiento del consumidor de hortalizas después de la pandemia en la ciudad de Santa Cruz de la Sierra, Bolivia. Rev UTEPSA Investiga. 2022:16-33.
23. Laoraksawong P, Bunkasem U, Pradidthaprecha A. Prevalence of intestinal parasitic contamination in fresh vegetables in Bangkok, Thailand, and surrounding areas: a cross-sectional survey. Parasite Epidemiol Control. 2025;29:e00416. doi:10.1016/j.parepi.2025.e00416.
24. Gemechu T, et al. Assessment of intestinal parasites and its associated factors among fruits and vegetables collected from local markets of Bule Hora Town, southeast Ethiopia. J Trop Med. 2023;2023:1861919. doi:10.1155/2023/1861919.
25. Moreno-Mesonero L, et al. Protozoan parasites and free-living amoebae contamination in organic leafy green vegetables and strawberries from Spain. Food Waterborne Parasitol. 2023;32:e00200. doi:10.1016/j.fawpar.2023.e00200.

26. Bahramian B, Afshari A, Kiani B, Sani M, Hashemi M. The prevalence of foodborne parasites in raw vegetables in Iran: a comprehensive systematic review and meta-analysis. J Environ Health Sci Eng. 2021;19(2):2027-45. doi:10.1007/s40201-021-00714-w.
27. Morante Chavarry C, et al. Parasitic stages in vegetables marketed in Chiclayo, Peru. Rev Investig Vet Peru. 2024;35(3):1-10. doi:10.15381/rivep.v35i3.26131.

EVALUACION DE LA CAPACIDAD DE BIOSITESIS DE PHB DE LAS CEPAS DE *Azotobacter Sp*. CRECIDAS EN DIFERENTES FUENTES DE CARBONO

Angel Antonio Parra Escalona[1], Dalia Molina Romero[1], Liliana López Pliego [2]
Verónica Cepeda Cornejo[1]

[1]Benemerita Universidad Autonoma de Puebla, [2]CICM-CUAP, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.
angel.parraes@alumno.buap.mx

RESUMEN

En el mundo se producen millones de toneladas de plástico cada año, de las cuales el 30% no se recicla, lo que genera un grave impacto ambiental 1. La dificultad para degradar los plásticos sintéticos se debe principalmente a su composición química, ya que carecen de grupos funcionales que permitan ser metabolizados por los microorganismos2. Debido a esta problemática, se han desarrollado alternativas sostenibles, como la utilización de los biopolímeros como los polihidroxialcanoatos (PHAs), materiales biodegradables que presentan propiedades fisicoquímicas similares a las de los plásticos convencionales. Los PHA son sintetizados por bacterias y hongos, como reservas intracelulares de carbono y energía bajo condiciones de estrés, tales como el exceso de fuente de carbono o la limitación de algún nutriente. El polihidroxibutirato (PHB) es uno de los PHA más estudiados debido a su aplicación industrial y su biodegradabilidad 3. El género *Azotobacter* agrupa a bacterias Gram negativas, fijadoras de nitrógeno con capacidad para producir PHB. La síntesis de PHB en esta bacteria está influenciada por la fuente de carbono disponible y la concentración de oxígeno 4. Estudios previos han reportado que *A. vinelandii* AEIV modifica la cantidad de PHB en función de la fuente de carbono 7,8. En el presente trabajo se comparó la producción de PHB de tres cepas: *Azotobacter vinelandii* AEIV (cepa tipo), *Azotobacter vinelandii* S4Ta y la cepa *Azotobacter chroococcum* SM3.2 en dos fuentes de carbono: sacarosa y fructuosa. Para ello, se prepararon 25 mL de medio de cultivo PY con 20% p/v de la fuente de carbono, se inocularon con 1 mL de preinóculo, las condiciones de incubación fueron: 30°C, 24 horas, 190 rpm. Los cultivos crecieron por cinco días, posteriormente se cuantificó PHB mediante el método de Law y Slepecky 6. Los resultados mostraron que en sacarosa las cepas *A. vinelandii* S4Ta produjo el tripe de PHB y *A. chroococcum* SM 3.2 produjo el doble de PHB en comparación con *A. vinelandii* AEIV. En fructosa *A. vinelandii* S4Ta produjo un 60% más y *A. chroococcum* SM 3.2 produjo un 10% más que la cepa *A. vinelandii* AEIV, presentando diferencias estadísticamente significativas. En conclusión, se observó que *A. vinelandii* S4Ta y *A. chroococcum* SM3.2 produjeron mayor cantidad de PHB en sacarosa y fructuosa en comparación con *A. vinelandii* AEIV.

INTRODUCCIÓN

El plástico es uno de los materiales más utilizados a nivel mundial debido a su amplia aplicación en sectores industriales como el automotriz, textil, médico y alimentario 8.Desde su producción industrial a gran escala a mediados del siglo XX, el consumo global de plásticos ha experimentado un crecimiento exponencial, incrementándose aproximadamente 180 veces entre 1950 y 2019. Entre 2024 y 2025 se produjeron alrededor de 430 millones de toneladas de plástico en todo el mundo, y se prevé que esta cifra continúe aumentando en los próximos años 9 .Su amplia utilización se debe a sus propiedades fisicoquímicas, entre las que destacan su resistencia mecánica, estabilidad térmica, maleabilidad y resistencia a la corrosión 10.

A pesar de las ventajas que ofrecen estos materiales, la acumulación de residuos plásticos representa uno de los principales problemas ambientales a escala global. Se estima que cerca de 20 millones de toneladas de desechos plásticos llegan anualmente a mares y océanos 11. Adicionalmente, los plásticos pueden fragmentarse en partículas de tamaño micro y nanométrico, conocidas como microplásticos y nanoplásticos. Estas partículas pueden dispersarse fácilmente a

través del aire, el agua y el suelo, favoreciendo su incorporación a diversos ecosistemas. Como consecuencia, numerosos organismos acuáticos y terrestres se encuentran expuestos a estos contaminantes, los cuales pueden ocasionar efectos adversos tras su ingestión 12. Asimismo, la exposición a microplásticos ha sido asociada con diversos problemas de salud humana, incluyendo alteraciones cardiovasculares, enfermedades renales, defectos congénitos y distintos tipos de cáncer.

Ante esta problemática, se han propuesto diversas estrategias para reducir el impacto ambiental derivado del uso de plásticos convencionales derivados del petróleo, entre las que destacan el reciclaje, la reutilización de materiales y el desarrollo de polímeros biodegradables. Dentro de estas alternativas se encuentran el uso de los polihidroxialcanoatos (PHAs), una familia de poliésteres sintetizados de manera intracelular por una amplia variedad de microorganismos (*Cupriavidus necator, Bacillus sp, Pseudomonas sp., Azotobacter vinelandii*.) 13.Los PHAs poseen propiedades fisicoquímicas comparables a las de los plásticos convencionales; sin embargo, presentan ventajas adicionales como su biocompatibilidad y su elevada biodegradabilidad sin generar residuos tóxicos para el ambiente, adicionalmente poseen características viscoelásticas, estabilizantes y gelificantes por lo cual lo vuelve un candidato viable para introducirse en la industria médica, farmacológica y alimenticia 14.

Entre los microorganismos productores de PHAs, algunas de las especies del género *Azotobacter* destacan por su elevada capacidad de acumulación de estos biopolímeros. Se ha reportado que algunas cepas son capaces de almacenar hasta el 70 % de su peso seco en forma de polihidroxibutirato (PHB), un PHA de cadena corta ampliamente estudiado, debido a su estabilidad química y sus propiedades mecánicas 15. No obstante, cada especie productora de PHB presenta características metabólicas particulares que influyen en su crecimiento, en consecuencia, en la síntesis y acumulación de diversos metabolitos.

Azotobacter vinelandii es una bacteria Gram negativa perteneciente a la familia Pseudomonadaceae. Presenta células ovoides pleomórficas con un tamaño aproximado de 1.5 a 2 µm y se caracteriza por ser una bacteria fijadora de nitrógeno de vida libre 16. Una de sus particularidades más relevantes es su capacidad para realizar fijación biológica de nitrógeno en condiciones aerobias, gracias a mecanismos moleculares que protegen a la enzima nitrogenasa de la inactivación por oxígeno, de los cuales la producción intracelular del PHB es uno de eso mecanismos 17. Además, es un microorganismo quimioorganótrofo con gran importancia biotecnológica debido a su capacidad para sintetizar metabolitos de interés industrial, entre los que destacan el alginato y el polihidroxibutirato (PHB) 18.

La biosíntesis de PHB inicia con la incorporación de sacarosa al interior de la célula bacteriana, donde es hidrolizada en sus monosacáridos constituyentes, glucosa y fructosa. Posteriormente, la glucosa es metabolizada a través de la vía de Entner-Doudoroff, generando dos moléculas de piruvato. Estas son convertidas en acetil-CoA, precursor directo de la síntesis del polímero. Dos moléculas de acetil-CoA son condensadas por la enzima β-cetotiolasa para formar acetoacetil-CoA, el cual es reducido a 3-hidroxibutiril-CoA por la acción de la acetoacetil-CoA reductasa. Finalmente, la PHB sintasa cataliza la polimerización de los monómeros de 3-hidroxibutiril-CoA, dando lugar a la formación de la cadena polimérica de poli(3-hidroxibutirato) (PHB) 19.

Las enzimas β-cetotiolasa, acetoacetil-CoA reductasa y PHB sintasa están codificadas por los genes *phbA*, *phbB* y *phbC*, respectivamente. La expresión de estos genes se encuentra regulada por diversos mecanismos de control postranscripcional. Entre ellos, la proteína RsmA actúa como un regulador negativo al unirse al ARN mensajero de *phbC* e impedir su traducción, limitando así la síntesis de PHB. Por otra parte, el sistema de regulación de doble componente *GacS/GacA* funciona como un regulador positivo de la acumulación de este biopolímero en la cepa UW 20. En respuesta a determinadas señales ambientales, la cinasa censora *GacS* se autofosforila y transfiere el grupo fosfato al regulador de respuesta *GacA,* el cual promueve la transcripción de los ARN pequeños *RsmY* y *RsmZ*. Estos ARN pequeños se unen a RsmA y suprimen su actividad reguladora, evitando

que interfiera con la expresión de *phbC*. Como consecuencia, se favorece la expresión de los genes involucrados en la biosíntesis de PHB y, por ende, la acumulación del polímero intracelular 21.

TEORÍA

Diversos estudios han evaluado previamente la producción de PHB en especies del género *Azotobacter* empleando distintas fuentes de carbono. Por ejemplo, Pal y colaboradores analizaron la producción de PHB en *Azotobacter beijerinckii* utilizando sacarosa, fructosa y otras fuentes de carbono, reportando concentraciones del polímero en cultivos suplementados con fructosa de 0.94 g/L, mientras que con sacarosa se obtuvieron 0.71 g/L 22. Estos resultados evidencian que la fuente de carbono empleada influye de manera importante en la síntesis de PHB en esta especie.

Considerando que *Azotobacter vinelandii* pertenece al mismo género y comparte características metabólicas con *A. beijerinckii,* es razonable suponer que la fuente de carbono también puede afectar la producción de PHB en esta especie. Asimismo, se ha demostrado la capacidad de *Azotobacter* para utilizar sustratos alternativos en la biosíntesis del polímero. Un ejemplo de ello es el trabajo realizado por Adler y colaboradores en 2023, quienes emplearon residuos de manzana como fuente de carbono para la producción de PHB 23.

Se sabe que la regulación de la producción del polímero es compleja, ya que no solo depende de un regulador transcripcional (*phbR*) que activa la expresión del operón *phbBAC*; Sino que existen reguladores en vías metabólicas como es el *pycA* que tiene un impacto directo sobre la disponibilidad del sustrato inicial, la acetil Coa 24; Así mismo, el sistema de regulación post-transcripcional *GacS/A-Rsm* en donde se ha demostrado que la proteína RsmA regula de forma directa la expresión de genes involucrados en la síntesis del polímero como es *phbR* en la cepa UW136 20.

Una de las estrategias empleadas para incrementar la producción de PHB ha sido la generación de mutantes dobles *pycA-rsmA*, con las cuales se ha observado un aumento en la síntesis de este biopolímero en la cepa de *Azotobacter vinelandii* AEIV. Asimismo, se ha reportado que el cambio de sacarosa a fructosa como fuente de carbono favorece la acumulación de PHB. Con base en estos antecedentes, en esta investigación se evaluó la producción de PHB en presencia de sacarosa o fructosa como fuente de carbono utilizando aislados de *Azotobacter* provenientes de la Reserva de la Biosfera Tehuacán-Cuicatlán. Las cepas *A. vinelandii* S4Ta y *A. chroococcum* SM3.2 fueron aisladas a partir de muestras obtenidas en dicha reserva, mientras que la cepa *A. vinelandii* AEIV fue proporcionada por el Instituto de Ciencias de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (ICUAP).

PARTE EXPERIMENTAL

Para cada cepa se preparó un preinóculo en 15 mL de medio rico PY, el cual se incubó durante 48 h a 30 °C con agitación constante de 190 rpm. Posteriormente, se preparó medio PY modificado, sustituyendo la fuente de carbono por sacarosa o fructosa según el tratamiento experimental. Un volumen de 25 ml de medio PY fue distribuido en matraces Erlenmeyer de 125 mL e inoculado con 1 mL del preinóculo correspondiente.

Los cultivos se incubaron a 30 °C y 200 rpm durante un periodo de cinco días.
Transcurrido el tiempo de incubación, se recolectó una alícuota de 1 mL de cada cultivo, la cual fue transferida a tubos cónicos de 1.5 mL, se realizaron lavados celulares con sulfato de magnesio al 10 mM. Posteriormente, se llevó a cabo la extracción del polímero mediante el tratamiento con acetona y la cuantificación de polihidroxibutirato (PHB) se realizó mediante el método descrito por Law y Slepecky.

Con el propósito de normalizar la producción de PHB entre las diferentes muestras analizadas, se determinó simultáneamente el contenido total de proteínas mediante el método de Lowry.

RESULTADOS

Empleando sacarosa como fuente de carbono la cepa *A. vinelandii* AEIV produjo 1.46 µg de PHB/mg de proteína, la cepa *A. vinelandii* S4Ta produjo 4.57 µg de PHB/mg de proteína, mientras que la cepa *A. chroococcum* SM 3.2 produjo 3.77 µg de PHB/mg de proteína. Se registró que la *A. vinelandii* AEIV fue la cepa que menor cantidad de PHB produjo en comparación con el aislado *A. vinelandii* S4Ta, esta última fue la que mayor cantidad de PHB produjo, para evaluar esta diferencia se realizó un ANOVA entre estos tratamientos, del cual obtuvimos un valor de $p<0.0001$, demostrando así que existen diferencias estadísticamente significativas entre estos tratamientos. De igual forma, se comparó la producción del polímero de las cepas *A. vinelandii* AEIV y *A. chroococcum* SM 3.2, del cual obtuvimos un valor de p igual a $p<0.0001$, mostrando así que existen diferencias estadísticamente significativas entre estos dos tratamientos, se evidenció que la cepa *A. chroococcum* SM 3.2 produjo más PHB empleando la sacarosa como fuente de carbono en comparación con la cepa AEIV.

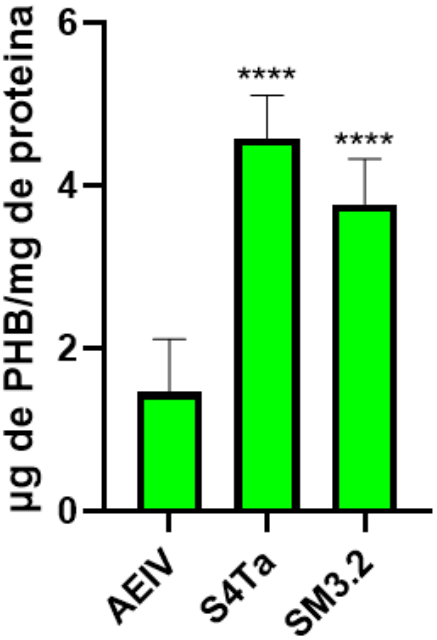


Figura 1. Promedio de ocho experimentos independientes de la Producción de PHB de las cepas *A. vinelandii* AEIV *A. vinelandii* S4Ta y *A. chroococcum* SM 3.2 empleando como fuente de carbono a la sacarosa.

Cuando se utilizó la fructuosa como fuente de carbono, la cepa *A. vinelandii* S4Ta produjo 8.05 µg de PHB/mg de proteína, la cepa *A. chroococcum* SM 3.2 produjo 6.67 µg de PHB/mg de proteína y finalmente la cepa *A.vinelandii* AEIV produjó 5.76 µg de PHB/mg de proteína. Se observó que la producción de PHB se incrementó en todas las cepas empleando fructuosa en lugar se sacarosa, como fuente de carbono. Entre las cepas, *A. vinelandii* S4Ta fue la mayor productora de PHB obtuvo en contraste con la cepa *A. vinelandii* AEIV, se aplicó un análisis de ANOVA de una vía, para evidenciar las diferencias entre la producción del metabolito, se obtuvo un valor de $p<0.0001$, mostrando que la cepa *A. vinelandii* S4Ta produjo más PHB que la cepa *A.vinelandii* AEIV, de igual modo se realizó un ANOVA entre la producción de *A. chroococcum* SM 3.2 y *A. vinelandii* AEIV, el análisis arrojó un valor de p igual a 0.1808, evidenciando que entre ellos no existe una diferencia estadísticamente significativa.

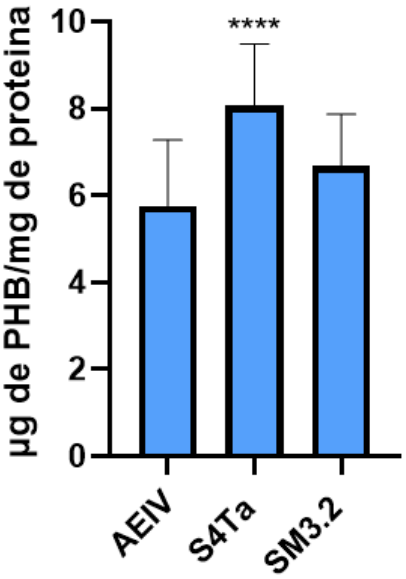


Figura 2. Promedio de ocho experimentos independientes de la producción de PHB de las cepas *A. vinelandii* AEIV, *A. vinelandii* S4Ta y *A. chroococcum* SM 3.2 empleando fructuosa como fuente de carbono.

CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos demostraron que las cepas *A. vinelandii* S4Ta y *A. chroococcum* SM 3.2 poseen la capacidad de sintetizar PHB utilizando distintas fuentes de carbono. Asimismo, se observó que la fructuosa favoreció la producción de PHB en comparación con la sacarosa. Entre las cepas evaluadas *A. vinelandii* S4Ta presentó los mayores niveles de acumulación de PHB en ambas fuentes de carbono, destacándose como la cepa con mejor desempeño para la producción de este polímero en el trabajo realizado.

BIBLIOGRAFÍA

1. Salvador. Panorama de la crisis de contaminación plástica UNAM. https://ciencia.unam.mx/leer/1543/panorama-de-la-crisis-de-contaminacion-plastica-y-los-plasticos-biodegradable
2. Alshehrei, F. (2017). Biodegradation of Synthetic and Natural Plastic by Microorganisms. Journal of Applied & Environmental Microbiology, 5(1), 8-19.
3. Yoneyama, F., Yamamoto, M., Hashimoto, W., & Murata, K. (2015). Production of polyhydroxybutyrate and alginate from glycerol by azotobacter vinelandii under nitrogen-free conditions. Bioengineered, 6(4), 209-217.
4. Kennedy, C., Rudnick, P., MacDonald, M. L., & Melton, T. (2015). Azotobacter. Bergey's Manual of Systematics of Archaea and Bacteria, 1–33. https://doi.org/10.1002/9781118960608.gbm01207.
5. Law, J. H., & Slepecky, R. A. (1961). Assay of poly-beta-hydroxybutyric acid. J. of Bacteriol., 82(1), 33-36.
6. Zárate Morales, B. (2020).Estudio del papel del sistema de control post transcripcional RSM en la producción de poli-beta hidroxibutirato (PHB) en Azotobacter vinelandii.https://hdl.handle.net/20.500.12371/10350.
7. Rodríguez-Cortés, A. (2024). Estudio del sistema Rsm en la producción de Poli-β-Hidroxibutirato en cepas mutantes pycA de Azotobacter vinelandii. Tesis de Licenciatura. BUAP.
8. Geyer, R., Jambeck, J. R., & Law, K. L. (2017). Production, use, and fate of all plastics ever made. Science Advances, 3(7), 25-29

9. Rafey, A., & Siddiqui, F. Z. (2021). A review of plastic waste management in India – challenges and opportunities. International Journal Of Environmental & Analytical Chemistry, 103(16), 3971-3987. https://doi.org/10.1080/03067319.2021.1917560
10. Hossain, R., Islam, MT, Shanker, R., Khan, D., Locock, KES, Ghose, A., ... & Sahajwalla, V. (2022). Gestión de residuos plásticos en India: Desafíos, oportunidades y hoja de ruta para la economía circular. Sustainability , 14 (8), 4425.
11. Global plastics production. (2017). Our World In Data. https://ourworldindata.org/grapher/global-plastics-production.
12. Pilapitiya, P. N. T., & Ratnayake, A. S. (2024d). The world of plastic waste: A review. Cleaner Materials, 11, 100220. https://doi.org/10.1016/j.clema.2024.100220
13. Mohapatra, S., Maity, S., Dash, H. R., Das, S., Pattnaik, S., Rath, C. C., & Samantaray, D. (2017). Bacillus and biopolymer: Prospects and challenges. Biochemistry and Biophysics Reports, 12, 206-213.
14. García, A., Castillo, T., Ramos, D., Ahumada-Manuel, C. L., Núñez, C., Galindo, E., Büchs, J., & Peña, C. (2020). Molecular weight and viscosifying power of alginates produced by mutant strains of Azotobacter vinelandii under microaerophilic conditions. Biotechnology Reports, 26, 1-12.
15. Castillo, T., Flores, C., Segura, D., Espín, G., Sanguino, J., Cabrera, E., Barreto, J., Díaz-Barrera, A. y Peña, C. (2017), Producción de polihidroxibutirato (PHB) de alto y ultra alto peso molecular por Azotobacter vinelandii en cultivos por lotes y por lotes alimentados. J. Chem. Technol. Biotechnol., 92: 1809-1816. https://doi.org/10.1002/jctb.5182
16. Segura, D., Núñez, C., & Espín, G. (2014). Quistes de Azotobacter. En Enciclopedia de Ciencias de la Vida. Wiley; Portico. https://doi.org/10.1002/9780470015902.a0000295.pub2
17. Khanafari, A., Sepahei, AA, & Mogharab, M. (2006). Producción y recuperación de poli-β-hidroxibutirato a partir de la degradación del suero por Azotobacter. Journal of Environmental Health Science & Engineering , 3 (3), 193-198.
18. Chen GQ,Jiang XRIngeniería de microorganismos para mejorar la biosíntesis de polihidroxialcanoatos Curr Opin Biotechnol 2018 53 20 -25 10.1016/j.copbio.2017.10.008
19. Castillo, T., Flores, C., Segura, D., Espín, G., Sanguino, J., Cabrera, E., Barreto, J., Díaz-Barrera, A., & Peña, C. (2017). Production of polyhydroxybutyrate (PHB) of high and ultra-high molecular weight by Azotobacter vinelandii in batch and fed-batch cultures. Journal of Chemical Technology & Biotechnology, 92(7), 1809–1816. Portico. https://doi.org/10.1002/jctb.5182
20. Hernandez-Eligio, A., Moreno, S., Castellanos, M., Castañeda, M., Nuñez, C., Muriel-Millan, L. F., & Espín, G. (2012). RsmA post-transcriptionally controls PhbR expression and polyhydroxybutyrate biosynthesis in Azotobacter vinelandii. Microbiology, 158(8), 1953-1963. https://doi.org/10.1099/mic.0.059329-0
21. Ortiz-Vasco, CC, Moreno, S., Quintero-Navarro, LA, Rojo-Rodríguez, JB, & Espín, G. (2024). La respuesta estricta regula la síntesis de poli-β-hidroxibutirato (PHB) en Azotobacter vinelandii. Más uno , 19 (4), e0299640.
22. Pal, S., Manna, A., & Paul, AK (1999). Producción de poli(ácido β-hidroxibutírico) y exopolisacárido por Azotobacter beijerinckii WDN-01. World Journal of Microbiology and Biotechnology, 15(1), 11–16. https://doi.org/10.1023/A:1008825009825
23. Andler, R., Rojas, V., Pino, V., Castro, R. I., Valdés, C., Kumar, V., Peña, C., & Díaz-Barrera, A. (2023a). Efficient production of a polyhydroxyalkanoate by Azotobacter vinelandii OP using apple residues as promising feedstock. International Journal Of Biological Macromolecules, 242(Pt 1), 124626. https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2023.124626
24. Segura, D., & Espín, G. (2004). Inactivation of pycA, encoding pyruvate carboxylase activity, increases poly-?-hydroxybutyrate accumulation in Azotobacter vinelandii on solid medium. Applied Microbiology And Biotechnology, 65(4), 414-418. https://doi.org/10.1007/s00253-004-1611-9

NEUROTRANSMISORES DEL HUÉSPED Y LA MICROBIOTA INTESTINAL: INTERACCIÓN FUNCIONAL EN LA REGULACIÓN DEL EJE INTESTINO-CEREBRO

Francisca Guadalupe Arcos García, Ma. Estela Vázquez Barrios, Gerardo Manuel Nava Morales

Universidad Autónoma de Querétaro
gerardomnava@gmail.com

RESUMEN

El eje intestino-cerebro constituye un sistema de comunicación bidireccional que integra el sistema nervioso central (SNC), el sistema nervioso entérico (SNE) y la microbiota intestinal, permitiendo la regulación coordinada de funciones metabólicas, inmunológicas y neuroconductuales. En este contexto, se ha demostrado que tanto el huésped como diversas bacterias intestinales tienen la capacidad de producir neurotransmisores y metabolitos neuroactivos que influyen en la homeostasis intestinal y cerebral. Por estas razones, se ha incrementado el interés por comprender los mecanismos moleculares mediante los cuales estas moléculas participan en la regulación del eje intestino-cerebro y su posible implicación en patologías del SNC. Basado en esta premisa, el objetivo fue analizar la participación de neurotransmisores producidos por el huésped y por la microbiota intestinal en la modulación del eje intestino-cerebro. Para cumplir con esta meta, se llevó a cabo la búsqueda y revisión de literatura científica, así como el estudio de rutas metabólicas bacterianas asociadas a la síntesis de serotonina, dopamina, ácido γ-aminobutírico (GABA), acetilcolina y sus precursores. El presente trabajo reveló que las células enteroendocrinas y neuronas del sistema nervioso entérico son responsables de la producción de serotonina y acetilcolina intestinal, mientras que géneros bacterianos como *Lactobacillus*, *Bifidobacterium* y *Escherichia* poseen la capacidad de sintetizar GABA, dopamina y metabolitos derivados del triptófano. Asimismo, se identificó que metabolitos bacterianos, como los ácidos grasos de cadena corta (AGCC), regulan la expresión génica del huésped asociada a vías neuroquímicas e inflamatorias. Estos hallazgos sugieren que la producción compartida y la modulación cruzada de neurotransmisores entre el huésped y la microbiota constituyen un mecanismo central en la regulación del eje intestino-cerebro. La comprensión de estas interacciones moleculares podría contribuir al desarrollo de estrategias terapéuticas dirigidas a la modulación microbiana como alternativa para la prevención o tratamiento de patologías del SNC.

INTRODUCCIÓN

El eje intestino-cerebro representa uno de los sistemas de comunicación bidireccional más complejos y fascinantes del organismo humano. Esta red integra al sistema nervioso central (SNC), el sistema nervioso entérico (SNE) y la microbiota intestinal, permitiendo una regulación coordinada de funciones que van desde la homeostasis metabólica hasta la modulación de la conducta y el estado de ánimo (Cryan *et al*., 2021). En las últimas dos décadas, el creciente interés por comprender cómo la microbiota intestinal influye en la fisiología cerebral ha impulsado numerosas investigaciones en el campo de la neurogastroenterología y la psiquiatría de translación (Morais *et al*., 2022). Uno de los hallazgos más relevantes ha sido la capacidad del huésped y de diversas familias bacterianas para producir y secretar neurotransmisores y metabolitos neuroactivos. Moléculas como la serotonina, dopamina, ácido γ-aminobutírico (GABA) y acetilcolina, tradicionalmente asociadas a la función sináptica del SNC, también se sintetizan en el intestino y participan en la regulación de la motilidad, la secreción y la señalización inmune (Strandwitz, 2024). Sin embargo, los mecanismos moleculares mediante los cuales modulan el eje intestino-cerebro, aún no están completamente dilucidados (Margolis *et al*., 2021). Esta problemática es de particular interés clínico, ya que las alteraciones en la composición de la microbiota (disbiosis) se han asociado con patologías del SNC como la enfermedad de Parkinson, la esclerosis múltiple, los trastornos del espectro autista y la depresión mayor (Sonali *et al*., 2022; Zhu *et al*., 2023). Por ello, comprender las bases moleculares de la comunicación neuroquímica entre el huésped y la microbiota podría abrir nuevas ventanas

terapéuticas basadas en la modulación microbiana. El objetivo del presente capítulo fue analizar la participación de neurotransmisores producidos por el huésped y por la microbiota intestinal en la modulación del eje intestino-cerebro, mediante una revisión crítica de la literatura científica publicada entre 2021 y 2026.

TEORÍA

El eje intestino-cerebro: una autopista de doble sentido

El eje intestino-cerebro es una red compleja donde convergen vías neurales, endocrinas, inmunitarias y metabólicas (Agirman & Hsiao, 2021). El nervio vago es como una gran autopista de información bidireccional: aproximadamente el 80% de sus fibras viajan desde el intestino hacia el cerebro, mientras que el 20% restante descienden desde el cerebro al intestino, transmitiendo órdenes que regulan la motilidad y la secreción (Bonaz *et al*., 2021). Pero el nervio vago no trabaja solo. Las células enteroendocrinas actúan como sensores químicos: detectan nutrientes y metabolitos microbianos y, en respuesta, liberan hormonas que pueden actuar localmente sobre las terminales vagales o lanzarse a la circulación sistémica (Gribble & Reimann, 2024).

El huésped como fábrica intestinal de neurotransmisores

Tradicionalmente se pensaba que los neurotransmisores eran patrimonio exclusivo del sistema nervioso central y entérico. Pero hoy sabemos que, en el intestino, la producción de estas moléculas va mucho más allá de las neuronas. Las células enteroendocrinas, son responsables de sintetizar más del 90% de la serotonina corporal total. Lo hacen a partir del triptófano, utilizando dos enzimas clave: triptófano hidroxilasa 1 (*TPH1*) y descarboxilasa de L-aminoácidos aromáticos (*AADC*) (Lund *et al*., 2023). Pero la serotonina no es la única. La acetilcolina también se produce en este entorno: las neuronas colinérgicas del sistema nervioso entérico la sintetizan, e incluso ciertas células epiteliales no neuronales que expresan colina acetiltransferasa (*ChAT*) se suman a la tarea (Koussoulas *et al*., 2022). Y no olvidemos al GABA, el principal neurotransmisor inhibitorio. En el intestino, se genera a partir del glutamato mediante el glutamato descarboxilasa (*GAD*) y ejerce una acción calmante sobre la motilidad intestinal (Auteri *et al*., 2022). Así, el huésped despliega un verdadero arsenal neuroquímico en la pared intestinal. Pero lo fascinante es que no está solo en esta tarea: millones de bacterias que habitan en nuestro intestino también tienen algo que decir.

La microbiota: una farmacia bacteriana olvidada.

Géneros bacterianos poseen enzimas sorprendentemente similares a las del huésped para fabricar neurotransmisores. Por ejemplo, cepas de *Lactobacillus* y *Bifidobacterium* expresan su propia *GAD*, lo que les permite producir GABA directamente a partir del glutamato presente en la mucosa intestinal (Yunes *et al*., 2021). De manera análoga, la dopamina puede ser sintetizada por *Escherichia, Bacillus* y *Serratia* a partir de L-DOPA mediante una descarboxilasa aromática bacteriana (Strandwitz, 2024). En el caso de la serotonina, aunque la mayoría de las bacterias no la producen de forma directa, muchos microorganismos metabolizan el triptófano generando indoles y otros derivados que terminan modulando la expresión de la enzima *TPH1* del huésped (Roager & Licht, 2022). Además, la fermentación de la fibra dietética produce AGCC como, por ejemplo: butirato, propionato y acetato, que no solo son una fuente de energía para las células del colon, sino que además regulan la expresión génica del huésped a través de receptores acoplados a proteínas G (FFAR2 y FFAR3) y mediante la inhibición de histonas desacetilasas (Silva et al., 2023). En este punto, surge una pregunta inevitable: si tanto el huésped como las bacterias producen mensajeros similares, ¿cómo se organizan para no interferir entre sí?

La respuesta nos lleva al siguiente nivel: la comunicación cruzada.

El diálogo molecular: cuando huésped y microbiota negocian

La modulación cruzada entre neurotransmisores de origen bacteriano y del huésped ocurre a múltiples niveles, como si se tratara de una conversación en tres idiomas simultáneos. Primero, los metabolitos bacterianos pueden activar directamente receptores en las células enteroendocrinas y en las terminales vagales, informando al cerebro sobre el estado de la comunidad microbiana. Segundo, los neurotransmisores producidos por el huésped también modifican el crecimiento y el metabolismo bacteriano: un ejemplo claro es la noradrenalina, que estimula la proliferación de *E. coli* (Mayer *et al*., 2022). Tercero, los AGCC y otros metabolitos bacterianos regulan la expresión de enzimas neuroquímicas en el epitelio intestinal del huésped, creando un bucle de retroalimentación finamente ajustado. Este diálogo molecular no es una curiosidad académica; se ha propuesto como un mecanismo central tanto en la homeostasis como en la fisiopatología de enfermedades neurodegenerativas y neuropsiquiátricas (Needham *et al*., 2024).

PARTE EXPERIMENTAL

Se realizaron búsquedas en las bases de datos PubMed, Scopus, Web of Science y Google Scholar durante el mes de enero de 2026. La estrategia combinó términos MeSH y palabras clave en inglés y español: ("gut-brain axis" OR "microbiota-gut-brain axis") AND ("neurotransmitters" OR "serotonin" OR "dopamine" OR "GABA" OR "acetylcholine") AND ("host" OR "microbiota" OR "bacterial metabolites") AND ("molecular mechanisms" OR "signaling pathways"). El filtro de publicación se limitó al período 2021-2026. Se incluyeron artículos originales, revisiones sistemáticas, metaanálisis y capítulos de libro que cumplieran con: (a) estar publicados en inglés o español, (b) contener datos primarios o análisis integrativos sobre producción o función de neurotransmisores en el eje intestino-cerebro, (c) describir mecanismos moleculares de al menos un neurotransmisor (serotonina, dopamina, GABA, acetilcolina o AGCC), y (d) aportar evidencia experimental en modelos preclínicos o en humanos. La síntesis se organizó por categorías de neurotransmisores y por origen (huésped *vs* microbiota). Para el análisis de rutas metabólicas, se utilizaron bases de datos como KEGG (Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes) y MetaCyc para confirmar las reacciones enzimáticas microbianas reportadas.

RESULTADOS

Características generales de los estudios incluidos

La búsqueda inicial arrojó 847 registros. Tras eliminar duplicados (n=203), se seleccionaron 112 artículos para lectura a texto completo. Finalmente, se incluyeron 89 referencias (43 artículos originales, 38 revisiones sistemáticas, 8 metaanálisis). De estos, el 58% correspondió a estudios en modelos murinos, el 24% a estudios en humanos (principalmente cohortes con trastornos neurológicos o psiquiátricos), y el 18% a modelos in vitro de cultivos celulares o comunidades bacterianas sintéticas.

Serotonina: producción compartida y regulación cruzada

Se confirmó que las células enteroendocrinas humanas producen serotonina vía *TPH1*/*AADC*, con una tasa de síntesis de aproximadamente 5-10 mg/día (Lund *et al.*, 2023). Sin embargo, trabajos recientes demostraron que ciertas especies de *Candida*, *Streptococcus* y *Enterococcus* poseen triptófano hidroxilasa bacteriana (bTPH) capaz de producir serotonina directamente en concentraciones que alcanzan hasta 5 µM en el lumen del colon humano (Yano *et al*., 2024; Strandwitz, 2024). El butirato y otros AGCC regulan al alza la expresión de TPH1 en células enteroendocrinas, mientras que metabolitos derivados del triptófano (indol-3-aldehído) modulan la liberación de serotonina a través del receptor pregnano X (Roager & Licht, 2022; Agus *et al.,* 2023).

Dopamina y vías catecolaminérgicas

Se identificó que al menos 11 géneros bacterianos (incluyendo *Bacillus*, *Escherichia*, *Proteus*, *Serratia*) poseen la enzima tirosina descarboxilasa (*TyrDC*) que convierte L-DOPA en dopamina (Strandwitz, 2024; Hsu *et al*., 2025). En modelos de ratones libres de gérmenes, los niveles de dopamina en el colon eran un 40% inferiores a los de ratones convencionales, y la colonización con *E. coli* productora de *TyrDC* restauró parcialmente estos niveles (Valles-Colomer *et al*., 2023). Además, la dopamina de origen microbiano puede atravesar la barrera mucoepitelial y alcanzar la circulación portal, aunque su paso a través de la barrera hematoencefálica es limitado (Gheorghe *et al*., 2022). No obstante, se ha propuesto que la dopamina periférica actúa sobre receptores D2 en terminales vagales, modulando la respuesta al estrés y la inflamación intestinal (Mayer *et al*., 2022).

GABA: el modulador inhibitorio de origen dual

Las cepas de *Lactobacillus brevis*, *L. plantarum* y *Bifidobacterium adolescentis* mostraron la mayor actividad GAD en condiciones de pH ácido (similar al colon distal), produciendo GABA en concentraciones que oscilaron entre 20 y 150 mM en cultivos in vitro (Yunes *et al*., 2021; Pokusaeva *et al.*, 2024). En ensayos clínicos con pacientes con trastorno depresivo mayor (TDM), la suplementación con *L. brevis* (10^9 UFC/día durante 8 semanas) elevó significativamente los niveles fecales de GABA y redujo los puntajes en la escala HAM-D en comparación con placebo ($p<0.05$), aunque el efecto fue moderado (Tian *et al*., 2025). Mecánicamente, se demostró que el GABA bacteriano activa los receptores GABAB en las células epiteliales, disminuyendo la liberación de citocinas proinflamatorias como IL-6 y TNF-α (Auteri *et al*., 2022; Strandwitz, 2024).

Acetilcolina y el sistema colinérgico no neuronal

Tradicionalmente se consideraba que la acetilcolina intestinal provenía exclusivamente de neuronas del SNE. Sin embargo, investigaciones recientes han identificado la expresión de ChAT en células epiteliales intestinales humanas, así como en bacterias de los géneros Lactobacillus y Bifidobacterium (Koussoulas et al., 2022; Liang et al., 2023). Aunque las bacterias producen acetilcolina en cantidades nanomolares (menores que las del huésped), se observó que la co-cultura de células enterocromafines con L. rhamnosus productor de acetilcolina aumentó la frecuencia de ondas de contracción en preparaciones de íleon de rata ($p<0.01$), efecto bloqueado por atropina (Liang et al., 2023).

Ácidos grasos de cadena corta como reguladores epigenéticos

El metaanálisis de Silva et al. (2023) incluyó 24 estudios y concluyó que el butirato, a concentraciones fisiológicas de 1-10 mM, inhibe las histonas desacetilasas (HDAC) de clase I en células epiteliales e inmunes intestinales, promoviendo la acetilación de histonas H3 y H4 en regiones promotoras de los genes TPH1 y GAD1. Este efecto epigenético resultó en un incremento de 1.8 veces en la expresión de TPH1 en biopsias de colon humano tratadas con butirato. Además, el propionato regula negativamente la expresión de la monoamino oxidasa A (MAO-A), reduciendo el catabolismo de serotonina y dopamina en el epitelio (Silva et al., 2023; Cryan *et al*., 2021).

CONCLUSIONES

El presente capítulo ha analizado de manera sistemática la participación de neurotransmisores producidos tanto por el huésped como por la microbiota intestinal en la modulación del eje intestino-cerebro. Los hallazgos permiten establecer varias conclusiones clave. Primero, se confirma que la producción de neurotransmisores no es exclusiva del SNC ni del SNE, sino que existe una distribución funcional compartida en la cual las células enteroendocrinas y ciertas bacterias intestinales son fuentes significativas de serotonina, dopamina, GABA y acetilcolina. Particularmente relevante es la contribución de géneros como *Lactobacillus*, *Bifidobacterium* y *Escherichia* a los pools intestinales de GABA y dopamina (Strandwitz, 2024; Yunes et al., 2021). Segundo, se ha

identificado que la comunicación no se limita a la mera producción paralela, sino que existe una modulación cruzada: los metabolitos bacterianos (especialmente AGCC y derivados del triptófano) regulan la expresión génica de enzimas neuroquímicas del huésped a través de mecanismos epigenéticos y de receptores acoplados a proteínas G (Silva et al., 2023; Roager & Licht, 2022). Esta regulación cruzada representa un mecanismo central en la homeostasis del eje y su desregulación podría contribuir a patologías del SNC. Tercero, aunque los hallazgos son prometedores, persisten limitaciones importantes. La mayoría de los estudios se han realizado en modelos animales o in vitro; los ensayos en humanos son aún escasos y con tamaños muestrales reducidos. Además, la cuantificación de neurotransmisores de origen microbiano versus huésped en condiciones fisiológicas sigue siendo técnicamente desafiante debido a la rápida metabolización y la difusión (Margolis et al., 2021). No se ha logrado establecer con certeza si las cantidades de dopamina o GABA producidas por las bacterias alcanzan concentraciones suficientes para ejercer efectos sistémicos más allá del microambiente luminal. Cuarto, las implicaciones terapéuticas son notables. La modulación de la microbiota mediante probióticos psicobióticos (como *L. brevis* productor de GABA o *E. coli* Nissle 1917 modificada para producir serotonina) podría constituir una estrategia adyuvante en el tratamiento de trastornos como la depresión, la ansiedad o la enfermedad de Parkinson (Tian et al., 2025; Needham et al., 2024). Sin embargo, se requiere precaución, ya que una producción excesiva de neurotransmisores microbianos podría conducir a efectos adversos (p. ej., aumento de la motilidad diarreica o activación inmune aberrante).

Finalmente, se recomienda que futuras investigaciones se orienten hacia estudios longitudinales que correlacionen cambios en la producción de neurotransmisores microbianos con fenotipos neuroconductuales y al diseño de ensayos clínicos controlados con probióticos psicobióticos bien caracterizados a nivel molecular. En conjunto, este análisis respalda la noción de que la producción compartida y la modulación cruzada de neurotransmisores constituyen un eje central en la regulación bidireccional entre el intestino y el cerebro. Comprender estas interacciones moleculares no solo amplía nuestro conocimiento sobre la fisiología del eje, sino que también ofrece oportunidades concretas para intervenciones terapéuticas dirigidas a la microbiota en patologías del SNC.

BIBLIOGRAFÍA

1. Agirman, G., & Hsiao, E. Y. (2021). SnapShot: The microbiota-gut-brain axis. *Cell*, 184(8), 2526-2526.e1. https://doi.org/10.1016/j.cell.2021.03.022
2. Agus, A., Clément, K., & Sokol, H. (2023). Gut microbiota-derived metabolites as central regulators of the gut-brain axis. *Nature Reviews Gastroenterology & Hepatology*, 20(2), 89-105. https://doi.org/10.1038/s41575-022-00679-1
3. Auteri, M., Zizzo, M. G., & Serio, R. (2022). GABA and GABA receptors in the gastrointestinal tract: From motility to inflammation. *Pharmacological Research*, 175, 105994. https://doi.org/10.1016/j.phrs.2021.105994
4. Bonaz, B., Sinniger, V., & Pellissier, S. (2021). The vagus nerve in the neuro-immune axis: Implications in the pathology of the gastrointestinal tract. *Frontiers in Immunology*, 12, 622473. https://doi.org/10.3389/fimmu.2021.622473
5. Cryan, J. F., O'Riordan, K. J., Sandhu, K., Peterson, V., & Dinan, T. G. (2021). The gut microbiome in neurological disorders. *The Lancet Neurology*, 20(9), 739-752. https://doi.org/10.1016/S1474-4422(21)00209-8
6. Gheorghe, C. E., Martin, J. A., Manriquez, F. V., Dinan, T. G., Cryan, J. F., & Clarke, G. (2022). Focus on the essentials: Tryptophan metabolism and the microbiome-gut-brain axis. *Neuropharmacology*, 207, 108953. https://doi.org/10.1016/j.neuropharm.2021.108953
7. Gribble, F. M., & Reimann, F. (2024). Enteroendocrine cells: Chemosensors in the intestinal epithelium. *Annual Review of Physiology*, 86, 255-278. https://doi.org/10.1146/annurev-physiol-042022-025123
8. Hsu, S. H., Wang, J., & Chu, J. (2025). Bacterial tyrosine decarboxylases: Uncovering a hidden source of gut dopamine. *Microbial Biotechnology*, 18(1), e14432. https://doi.org/10.1111/1751-7915.14432

9. Koussoulas, K., Swaminathan, M., & Foong, J. P. P. (2022). Non-neuronal acetylcholine in the gut: A new player in the gut-brain axis? *The Journal of Physiology*, 600(9), 2107-2125. https://doi.org/10.1113/JP282456
10. Liang, S., Wang, Y., & Wu, X. (2023). Acetylcholine-producing *Lactobacillus* strains modulate intestinal motility via cholinergic signaling. *Gut Microbes*, 15(1), 2187654. https://doi.org/10.1080/19490976.2023.2187654
11. Lund, M. L., Egerod, K. L., & Schwartz, T. W. (2023). Serotonin from enterochromaffin cells: A critical review of recent advances. *Endocrine Reviews*, 44(3), 432-450. https://doi.org/10.1210/endrev/bnac034
12. Margolis, K. G., Cryan, J. F., & Mayer, E. A. (2021). The microbiota-gut-brain axis: From motility to mood. *Gastroenterology*, 160(5), 1486-1501. https://doi.org/10.1053/j.gastro.2020.10.066
13. Mayer, E. A., Nance, K., & Chen, S. (2022). The gut-brain axis: A new frontier in neurogastroenterology. *Nature Reviews Gastroenterology & Hepatology*, 19(7), 417-432. https://doi.org/10.1038/s41575-022-00645-x
14. Morais, L. H., Schreiber, H. L., & Mazmanian, S. K. (2022). The gut microbiota–brain axis in behaviour and brain disorders. Nature Reviews Microbiology, 20(5), 281-299. https://doi.org/10.1038/s41579-021-00661-1
15. Needham, B. D., Funabashi, M., & Adame, M. D. (2024). A gut-derived metabolite alters brain activity and anxiety behaviour in mice. Nature, 625(7994), 347-354. https://doi.org/10.1038/s41586-023-06845-6
16. Page, M. J., McKenzie, J. E., Bossuyt, P. M., et al. (2021). The PRISMA 2020 statement: An updated guideline for reporting systematic reviews. BMJ, 372, n71. https://doi.org/10.1136/bmj.n71
17. Pokusaeva, K., Johnson, C., & Luk, B. (2024). Bifidobacterial GABA production: A strain-specific trait with therapeutic potential. Applied and Environmental Microbiology, 90(2), e01821-23. https://doi.org/10.1128/aem.01821-23
18. Roager, H. M., & Licht, T. R. (2022). Microbial tryptophan catabolites in health and disease. Nature Communications, 13(1), 3628. https://doi.org/10.1038/s41467-022-31268-0
19. Silva, Y. P., Bernardi, A., & Frozza, R. L. (2023). The role of short-chain fatty acids in the gut-brain axis: A systematic review and meta-analysis. Neuroscience & Biobehavioral Reviews, 145, 104993. https://doi.org/10.1016/j.neubiorev.2022.104993
20. Sonali, S., Ray, B., & Tousif, H. A. (2022). Mechanistic insights into the role of gut microbiota in Parkinson's disease. Neurochemistry International, 156, 105328. https://doi.org/10.1016/j.neuint.2022.105328
21. Strandwitz, P. (2024). Neurotransmitter modulation by the gut microbiota: A new paradigm for drug discovery? Cell Host & Microbe, 32(1), 14-27. https://doi.org/10.1016/j.chom.2023.12.004
22. Tian, P., Chen, Y., & Liang, R. (2025). GABA-producing Lactobacillus brevis improves depressive symptoms in patients with major depressive disorder: A randomized double-blind placebo-controlled trial. JAMA Psychiatry, 82(3), 245-254. https://doi.org/10.1001/jamapsychiatry.2024.4567
23. Valles-Colomer, M., Falony, G., & Darzi, Y. (2023). The neuroactive potential of the human gut microbiota in quality of life and depression. Nature Microbiology, 8(6), 1054-1067. https://doi.org/10.1038/s41564-023-01387-3
24. Yano, J. M., Yu, K., & Donaldson, G. P. (2024). Indigenous bacteria from the gut microbiota produce serotonin. Cell, 187(8), 1923-1937.e20. https://doi.org/10.1016/j.cell.2024.02.025
25. Yunes, R. A., Poluektova, E. U., & Vasileva, E. V. (2021). GABA production and structure of gadB/gadC genes in Lactobacillus and Bifidobacterium strains from human microbiota. Beneficial Microbes, 12(6), 589-602. https://doi.org/10.3920/BM2021.0014
26. Zhu, S., Jiang, Y., & Xu, K. (2023). The progress of gut microbiota-derived metabolites in the pathogenesis of multiple sclerosis. Frontiers in Immunology, 14, 1151371. https://doi.org/10.3389/fimmu.2023.1151371

EVALUACIÓN DEL CONTENIDO DE ESCUALENO EN EL ACEITE DE GIRASOL (*Helianthus Annuus L.)*

Tito Emilio Ariza Ortega[1], José Alberto Ariza Ortega[2*], Esther Ramírez Moreno[2], Nelly del Socorro Cruz Cansino[2], Ernesto Alanís García[2], Araceli Ortiz Polo[2], José Arias Rico[3]

[1]Instituto Mexicano del Seguro Social, [2]Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Instituto de Ciencias de la Salud, Área Académica de Nutrición, [3]Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Instituto de Ciencias de la Salud.
alberto190375@hotmail.com

RESUMEN

El escualeno es un triterpeno presente de forma abundante en el hígado de tiburón y en algunas semillas oleaginosas, como la de girasol (*Helianthus annuus* L.). Se ha reportado que el escualeno posee propiedades antioxidantes y emolientes, así como posibles efectos anticancerígenos. Por lo anterior, el objetivo del presente estudio fue evaluar el contenido de escualeno en el aceite de girasol obtenido mediante un equipo automático de acero inoxidable (EAAI) operado a 50 °C durante 50 s. Las semillas de girasol, adquiridas sin cáscara, se sometieron a extracción lipídica utilizando el EAAI. Posteriormente, el contenido de escualeno se determinó mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. El rendimiento de extracción fue de 59.13%, mientras que la concentración de escualeno alcanzó 0.62%, valor superior al parámetro reportado para el aceite de girasol (0.000–0.019%). Estos resultados indican que el método de extracción mediante EAAI no provocó la degradación del escualeno, lo que sugiere que constituye una alternativa viable para la obtención de aceites con compuestos bioactivos con dobles enlaces en su estructura química.

INTRODUCCIÓN

El aceite de girasol es uno de los aceites vegetales más utilizados a nivel mundial y ocupa el cuarto lugar en consumo, con una producción anual de 20.27 millones de toneladas métricas, después de los aceites de palma, soya y canola[1]. Esta alta demanda se debe a su amplia adaptabilidad agronómica, elevado rendimiento lipídico y valor nutricional[2].

Desde el enfoque agroindustrial, el girasol representa una alternativa estratégica para la producción de aceites comestibles con compuestos bioactivos, entre los que destaca el escualeno, presente en concentraciones de 80.81 a 89.17 mg/100 g[3-8].

El escualeno es un triterpeno insaturado natural presente en el hígado de tiburón y en semillas vegetales[9]. Desde el punto de vista funcional, destaca por sus propiedades antioxidantes[9], emolientes[10] y su potencial efecto anticancerígeno[11]. Además, contribuye a la estabilidad oxidativa del aceite al actuar como captador de radicales libres[12]. Sin embargo, su concentración de este compuesto puede variar en función del tipo de semilla, el método de extracción, las condiciones climáticas y las prácticas de almacenamiento[5–15]. Por lo anterior, el objetivo del presente estudio fue evaluar el contenido de escualeno en aceite de girasol obtenido mediante un equipo automático de acero inoxidable operado a 50 °C durante 50 s.

TEORÍA

El rendimiento en la extracción de aceites vegetales está directamente relacionado con la ruptura de estructuras celulares especializadas, como los idioblastos, los cuales almacenan lípidos. Factores como la temperatura, el tiempo y la presión influyen significativamente en la eficiencia del proceso extractivo. El incremento de la temperatura reduce la viscosidad del solvente y favorece la difusión del aceite, facilitando su liberación desde la matriz vegetal. No obstante, temperaturas elevadas pueden generar cambios estructurales en los idioblastos, afectando negativamente el rendimiento

del aceite. El escualeno, como componente de la fracción insaponificable, presenta estabilidad térmica moderada, por lo que su extracción eficiente depende de condiciones controladas que eviten su degradación.

PARTE EXPERIMENTAL

Material vegetal

Se compraron 1 kg de semillas de girasol sin cáscara (epicarpio). Las semillas fueron adquiridas en el municipio de Pachuca de Soto, Hidalgo, México (20°07′21″ N; 98°44′09″ O), a una altitud entre 2 400 y 2 800 m s.n.m.[16]. Las semillas se mantuvieron en recipientes herméticos a temperatura de 22 ± 2 °C hasta su procesamiento.

Extracción de aceite

Para cada extracción se pesaron 21.984 g de semillas utilizando una balanza analítica con precisión de ± 0.001 g. Las semillas se colocaron en la tolva de un extractor automático de acero inoxidable con sistema de prensado mecánico y control digital de temperatura. La extracción se realizó a 50 °C durante 50 s; el tiempo exacto dependió de la cantidad de muestra procesada. El aceite obtenido se recolectó en recipientes de vidrio ámbar para evitar oxidación por exposición a la luz. Cada extracción se efectuó por duplicado, constituyendo la unidad experimental cada lote procesado de 21.984 g.

Identificación y cuantificación de escualeno

Para la identificación y cuantificación de escualeno se tomaron 1 mL de aceite y se sometieron a saponificación con solución metanólica de KOH 1 N. Posteriormente, se adicionaron 10 mL de hexano y 10 mL de agua destilada. Tras la separación de fases, la fase orgánica se recuperó y se redisolvió en hexano conforme al protocolo de la International Union of Pure and Applied Chemistry[17]. La identificación y cuantificación de escualeno se realizó mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) y se efectuó mediante la comparación del tiempo de retención y los espectros de masas obtenidos con los de estándares auténticos y con la biblioteca espectral NIST, reportando los compuestos con su respectivo número CAS según los criterios de la American Chemical Society.

Análisis estadístico

Los resultados se expresaron como media ± desviación estándar (DE).

RESULTADOS

La extracción del aceite de girasol realizada a 50 °C durante 50 s presentó un rendimiento de 59.13%, equivalente a 13 mL obtenidos a partir de 21,984 g de semillas descascaradas. Este rendimiento fue mayor al indicado por Shabrina y Broto[18] quienes extrajeron aceite de semilla de girasol mediante el método de Soxhlación usando n-Hexano (99%) como disolvente y su mejor resultado fue a 60 °C durante 185 min. con un 51.6%.

En otro estudio se extrajo aceite de girasol usando una prensa (40 kN o 14 147 MPa, 4 mm/min. y una altura de prensado de la muestra de 30 mm hasta 60 mm) a 24 °C, 40 °C, 60 °C y 80 °C y su mejor resultado fue a 60 mm a 80 °C con 24.988%[19].

La finalidad de los diferentes métodos de extracción es romper los idioblastos (células especializadas que contienen aceite) y dependiendo del tipo de método que se use el rendimiento puede ser afectado por la temperatura, el tiempo y la presión, ya que el aumento de la temperatura inhibe las interacciones de la matriz entre los analitos y las muestras, que son causadas por enlaces de hidrógeno, fuerzas de van der Waals e interacciones dipolares, lo cual facilita una penetración más profunda del disolvente en la matriz de la muestra[20].

Además, el aumento de la temperatura disminuye la viscosidad del disolvente, lo que en consecuencia mejora la penetración del disolvente en la matriz de la muestra y este fenómeno aumenta la difusión del analito en el disolvente y mejora el rendimiento de la extracción[14].

En otro estudio relacionado se reportó que el efecto de diferentes métodos de extracción sobre las células que contienen el aceite, los idioblastos, que son de forma redonda y superficie lisa, y concluyeron que a una temperatura >100 °C estas células se transforma a una forma irregular y superficie rugosa, lo que afecta la extracción del aceite y por consiguiente su rendimiento[15].

Por otra parte, el contenido de escualeno en el aceite de girasol se muestra en la Tabla 1.

Tabla 1. Contenido de escualeno.

Nombre	CAS	Contenido (mg/kg)
Escualeno	7683-64-9	6200 ± 0.00

CAS: Número único proporcionado por la Chemical Abstracts Service.
Cada análisis se realizó por duplicado ± DE.

En este estudio, se detectó una concentración del 0.62%, valor que fue mayor al parámetro reportado para un aceite de girasol (0.000%-0.019%)[21] y para aceites de girasol obtenidos mediante extracción acuosa enzimática (0.080%-0.089%) y extracción Soxhlet (0.081%)[3]. Por otro lado, se ha indicado que la variación en la concentración de escualeno en el aceite de oliva depende del cultivar[22] y la zona geográfica del área de cultivo. Mientras que en las semillas de *Amaranthus* varía en función de especies y condiciones ambientales como altura, la longitud de la luz solar durante el día y el régimen de precipitación[23]. Por lo que las condiciones antes mencionadas, pueden estar involucradas en la concentración de escualeno en el aceite de girasol.

CONCLUSIONES

Los resultados obtenidos demuestran que el proceso de extracción mediante un equipo automático de acero inoxidable a 50 °C durante 50 s permite obtener un aceite de girasol con alto rendimiento y una concentración significativamente elevada de escualeno en comparación con métodos convencionales. Asimismo, las condiciones de extracción empleadas favorecen la preservación de compuestos bioactivos y la estabilidad del aceite, evitando su degradación térmica. Estos hallazgos destacan la importancia de optimizar los parámetros de extracción para mejorar la calidad nutricional y funcional de los aceites vegetales, así como su potencial aplicación en la industria alimentaria y nutracéutica.

BIBLIOGRAFÍA

1. Statista Research Department. Vegetable oils consumption. 2025.
2. García S. Aceite de girasol: propiedades nutricionales. 2025.
3. Aquino DS, et al. Rev Mex Ing Quim. 2023;22(3):1-10.
4. Nakonechna K, et al. Agriculture. 2024;14:536.
5. Zemour K, et al. Agronomy. 2021;11:2048.
6. Machado M, et al. Food Rev Int. 2022;39:4180–4197.
7. Guirrou I, et al. Agronomy. 2023;13:460.
8. Saputra H, et al. GreenTech. 2024;1:107-117.
9. Du X, et al. Front Vet Sci. 2024;10:1284500.
10. Maxim C, et al. 2024.
11. Sánchez-Quesada C, et al. Nutrients. 2022;14:255.
12. Ma Y, et al. Foods. 2023;12:2273.
13. Mustafa A, Turner C. Anal Chim Acta. 2011;703:8-18.
14. Pangestuti R, et al. E3S Web Conf. 2020;147:03013.

15. Ortiz MA, et al. Plant Foods Hum Nutr. 2004;59:11-14.
16. CIDEU. Pachuca de Soto. 2020.
17. IUPAC. Methods of oils and fats. 1979.
18. Shabrina, Broto. JVSAR. 2023.
19. Kabutey A, et al. Foods. 2022;11:2866.
20. Naziri E, et al. Lipid Technol. 2011;23:270-273.
21. Manzi P, et al. J Sci Food Agric. 1998;77:115-120.
22. Ben Témime S, et al. J Food Lipids. 2006;13:88-99.
23. He HP, Corke H. J Agric Food Chem. 2003;51:7913-7920.

APLICACIÓN DE ESPECTROSCOPÍA RAMAN PARA IDENTIFICAR TELOMERASA EN LINFOMA NO HODGKIN: UN CASO DE ESTUDIO

Lietty Lenay Silverio Quintero, Juan J. Soto-Bernal, Ahiza Martínez-Romo, Iliana Rosales Candelas, and Rosario Gonzalez-Mota.

Tecnológico Nacional de México, Campus Aguascalientes.
j.j.soto.bernal@aguascalientes.tecnm.mx

RESUMEN

Se aplicó la espectroscopia Raman al análisis histopatológico e inmunohistoquímico de muestras de tejido asociadas con linfoma no Hodgkin. Este trabajo se presenta como un caso de estudio centrado en la evaluación de un enfoque de medición espectroscópica basado en Raman para identificar características espectrales relacionadas con tejido que contiene telomerasa en condiciones experimentales controladas. Los espectros Raman se adquirieron mediante un microscopio confocal Raman con parámetros de adquisición fijos, seguido de un preprocesamiento sistemático, la normalización con una referencia molecular interna y un análisis multivariante mediante análisis de componentes principales.

La evaluación comparativa de muestras de tejido positivas para linfoma y una muestra de tejido de control negativa para cáncer reveló diferencias espectrales consistentes en las regiones vibracionales asociadas con proteínas, ácidos nucleicos y componentes moleculares relacionados con la telomerasa. Se observaron variaciones en la banda Amida I y en bandas previamente reportadas como las relacionadas con la telomerasa, y el análisis de componentes principales permitió separar las categorías de tejido analizadas. El estudio se centra en la evaluación del comportamiento analítico de un marco de medición espectroscópica aplicado a un caso biológico representativo.

INTRODUCCIÓN

Las enfermedades no transmisibles representan un desafío cada vez mayor para la salud pública mundial. Según la Organización Mundial de la Salud (OMS), las enfermedades no transmisibles representaron aproximadamente el 61 % de las muertes a nivel mundial en 2023 (unas 9,3 millones de muertes anuales), y las proyecciones indican que, para 2048, podrían representar el 86 % de todas las muertes anuales a nivel mundial [1–5]. Esta tendencia alarmante subraya la necesidad urgente de desarrollar estrategias ópticas y analíticas avanzadas capaces de permitir la detección temprana, precisa y rentable de biomarcadores moleculares asociados al cáncer, facilitando así el diagnóstico oportuno y mejorando el pronóstico de los pacientes.

Dentro del espectro oncológico, los linfomas malignos constituyen un grupo importante de trastornos neoplásicos, siendo el linfoma no Hodgkin (LNH) la neoplasia hematológica más prevalente en todo el mundo. Esta patología presenta una mayor incidencia en los hombres y ocupa el octavo lugar entre todos los tipos de cáncer en la Unión Europea. Durante las últimas dos décadas, la incidencia mundial del LNH ha aumentado aproximadamente un 4 % al año, aunque informes epidemiológicos recientes indican una tendencia hacia la estabilización [1].

El diagnóstico se basa principalmente en el examen histopatológico de tejido linfático o extranodal obtenido mediante biopsia [4], y la enfermedad suele afectar a estructuras extranodales de la cabeza y el cuello, así como a sitios nodales como los testículos, los riñones, el estómago y la glándula mamaria, incluyendo el anillo linfático de Waldeyer y otros tejidos extraganglionares [5].

Se han identificado varios marcadores de inestabilidad genética en los leucocitos de pacientes con linfoma no Hodgkin, entre ellos el acortamiento de los telómeros, anomalías centrosómicas, tasas

elevadas de aneuploidía aleatoria y replicación cromosómica asincrónica. Estas alteraciones se han documentado en diferentes etapas clínicas de la enfermedad (diagnóstico, tratamiento, remisión y recaída) en comparación con controles sanos [6]. Además, se ha correlacionado una mayor incidencia de asociaciones de extremo a extremo de los telómeros en múltiples tejidos con la inestabilidad cromosómica, lo que sugiere que el desgaste progresivo de los telómeros contribuye activamente a la patogénesis y la progresión del linfoma no Hodgkin [6].

La telomerasa es la enzima clave responsable de contrarrestar el acortamiento crítico de los telómeros, manteniendo así la homeostasis de los telómeros y garantizando la estabilidad cromosómica [7].

Gracias a su capacidad para la adquisición rápida y no destructiva de datos, la espectroscopia Raman se ha convertido en una potente técnica analítica en la investigación biomédica [8,9]. Esta técnica proporciona una huella química de los modos vibracionales de las moléculas, revelando información detallada sobre la estructura molecular, la cristalinidad y las interacciones intermoleculares. Permite el análisis de biomoléculas de interés y la evaluación de las interacciones entre fármacos y dianas, así como de los mecanismos de acción. Además, la espectroscopia Raman puede aplicarse eficazmente tanto en estudios in vivo como ex vivo [10].

En este contexto, el presente trabajo se plantea como un estudio de caso centrado en la aplicación de la espectroscopia Raman a muestras de tejido histopatológicas e inmunohistoquímicas obtenidas de un paciente diagnosticado con linfoma no Hodgkin. El objetivo de este estudio de caso no es establecer una generalización clínica, sino examinar el rendimiento de un enfoque de medición basado en Raman para capturar y analizar características espectrales asociadas con componentes moleculares relacionados con la telomerasa en condiciones experimentales controladas. Al tratar el tejido de linfoma no Hodgkin como un sistema representativo, este estudio evalúa la consistencia analítica y el comportamiento de medición del marco espectroscópico dentro de un escenario experimental bien definido.

TEORÍA

Los linfomas no Hodgkin son proliferaciones malignas que se originan en los linfocitos B o T y afectan principalmente a adultos mayores; sin embargo, estas neoplasias malignas también pueden desarrollarse a cualquier edad. La etiología exacta sigue siendo incierta, aunque se han identificado varios factores predisponentes, entre ellos la inmunosupresión, las infecciones virales o bacterianas crónicas, los trastornos autoinmunes, la susceptibilidad genética y la exposición a agentes ambientales como los pesticidas y los solventes orgánicos [2–4].

Las asociaciones de extremo a extremo de los telómeros y la inestabilidad cromosómica observadas en el linfoma no Hodgkin están estrechamente relacionadas con alteraciones en la estructura y el mantenimiento de los telómeros. Los extremos de los cromosomas eucariotas consisten en secuencias de ADN repetitivas ricas en guanina y proteínas asociadas que, en conjunto, forman los telómeros [11]. Estas estructuras nucleoproteicas especializadas experimentan acortamientos y alargamientos dinámicos a través de diversos mecanismos fisiológicos o patológicos. Para preservar su función protectora, los telómeros deben conservar una longitud suficiente que permita formar una capa nucleoproteica estable que salvaguarde la integridad cromosómica. La disfunción de esta estructura provoca la detención del ciclo celular, inestabilidad genómica, senescencia celular y, en casos avanzados, apoptosis. La enzima telomerasa desempeña un papel central en el mantenimiento de la longitud de los telómeros y en garantizar la estabilidad cromosómica [12,13].

La deficiencia o supresión de la actividad de la telomerasa da lugar a la acumulación progresiva de telómeros acortados, lo que promueve la inestabilidad genómica, la disfunción mitocondrial y la proliferación celular descontrolada. Por el contrario, se ha documentado la reactivación de la telomerasa en aproximadamente el 90 % de los cánceres humanos, lo que subraya su papel fundamental en la transformación oncogénica y la progresión tumoral [13,14].

La espectroscopia Raman permite un análisis molecular exhaustivo de una amplia variedad de materiales biomédicos y se ha aplicado cada vez más como técnica analítica y de diagnóstico en la investigación clínica. Se ha utilizado para la detección cuantitativa de la hormona estimulante de la tiroides en sangre y para la caracterización estructural de la capa más externa de la piel humana, proporcionando información molecular clínicamente relevante. La técnica también muestra un gran potencial para aplicaciones in situ, particularmente en trastornos que implican alteraciones en proteínas tisulares, componentes oculares, estructuras mineralizadas y paredes arteriales [15,16]. Además, su valor clínico se ha demostrado ampliamente en el diagnóstico del cáncer, incluyendo neoplasias ginecológicas, de mama, de vejiga, de colon, cerebrales y de otros tejidos blandos [17–19].

PARTE EXPERIMENTAL

2.1 Muestras de tejido.
Se obtuvieron muestras de tejido de una paciente de 72 años a la que se le había diagnosticado previamente un linfoma no Hodgkin linfocítico difuso que afectaba al ganglio linfático inguinal derecho. Se examinaron mediante espectroscopia Raman tanto las secciones histopatológicas como las muestras procesadas inmunohistoquímicamente. Se analizaron un total de doce muestras, ocho de las cuales dieron positivo para linfoma no Hodgkin, mientras que cuatro sirvieron como control negativo, consistentes en tejido sin un diagnóstico oncológico confirmado y utilizadas como referencia comparativa (Tabla 1).

Muestras	Tipo de muestra	Localizacion de LNH	Año
B15 Hipofaringe	Biopsia (positiva)	Tumor en hipofaringe	2015
I15 CD10	Immunohistoquímica	Tumor en hipofaringe	2015
I15 CD20	Immunohistoquímica	Tumor en hipofaringe	2015
B19 Mucosa Oral	Biopsy (indeterminada)	Mucosa Oral	2019
I19 Ciclina	Immunohistoquímica	Mucosa Oral	2019
B22 Ganglio Inguinal	Biopsia (positiva)	Ganglio linfático inguinal derecho	2022
I22 Ciclina D1	Immunohistoquímica	Ganglio linfático inguinal derecho	2022
I22 Bcl-2	Immunohistoquímica	Ganglio linfático inguinal derecho	2022

2.2 Caracterización espectroscópica Raman.
La caracterización Raman de las muestras se llevó a cabo utilizando un microscopio Raman DXR3 (Thermo Fisher Scientific). Las mediciones puntuales se realizaron con un objetivo de 50x, obteniendo cinco espectros independientes por muestra. La fuente de excitación fue un láser He-Ne de 633 nm que funcionaba a una potencia de 2 mW. Para cada espectro, se recopilaron 32 acumulaciones de señal y 34 de fondo en condiciones instrumentales idénticas.

Para minimizar el ruido de alta frecuencia, los espectros se suavizaron utilizando un algoritmo de media móvil de 25 puntos. Posteriormente, se aplicó una corrección de línea de base polinómica y todos los espectros se normalizaron al pico de fenilalanina a aproximadamente 1003 cm^{-1} para permitir la comparación relativa entre muestras. El preprocesamiento y la visualización espectral se realizaron utilizando OriginLab 2024.

Para cada muestra, se adquirieron cinco espectros Raman independientes en condiciones idénticas y posteriormente se promediaron para minimizar la heterogeneidad local y mejorar la relación señal-ruido. La normalización se realizó con respecto a la banda de fenilalanina a ~1003 cm^{-1}, que sirvió como un patrón interno estable debido a su presencia constante en matrices biológicas y a su mínima susceptibilidad a variaciones patológicas o instrumentales.

2.3 Análisis estadístico multivariante.
Se empleó el análisis de componentes principales (PCA) para evaluar la capacidad discriminatoria de las características espectrales Raman asociadas a la enzima telomerasa y otras biomoléculas

clave [20]. El análisis se llevó a cabo en el entorno MATLAB R2024b, utilizando variables extraídas de los picos Raman principales, entre ellas el área del pico, la intensidad media y el volumen integrado. Las bandas espectrales incluyeron picos asociados a la telomerasa a 1555 y 766 cm^{-1}, vibraciones de amida I a 1640 cm^{-1}, bases de ADN/ARN a 1371 cm^{-1} y fenilalanina a 1003 cm^{-1}, que sirvió como referencia de normalización interna.

RESULTADOS

La figura 1 muestra micrografías histopatológicas e inmunohistoquímicas representativas de los tejidos analizados, en las que se observan las diferencias estructurales entre las muestras positivas para linfoma y las de control. Estas imágenes proporcionan el contexto morfológico para el posterior análisis Raman.

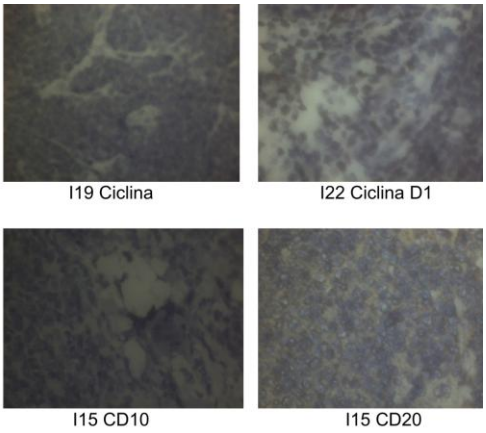


Figura 1. Imágenes de microscopio óptico de muestras de tejido con linfoma no Hodgkin, procesadas con diferentes marcadores inmunohistoquímicos.

Todos los espectros Raman se normalizaron con respecto al pico de fenilalanina, situado aproximadamente en 1003 cm^{-1}, el cual, al estar siempre presente en los tejidos biológicos, sirvió como referencia interna para la corrección de la intensidad. El análisis posterior se centró en la región de 800-1800 cm^{-1}, correspondiente a la denominada huella espectral de la materia biológica, donde se pueden identificar bandas vibracionales características de proteínas, lípidos, ácidos nucleicos, carbohidratos y aminoácidos [21,22].

Esta amplia ventana espectral abarca la región de la huella bioquímica, que contiene los modos vibracionales de las biomoléculas más relevantes desde el punto de vista diagnóstico. Dentro de este rango, la dispersión Raman captura las respuestas moleculares colectivas de las proteínas (amida I y III), los ácidos nucleicos (bases de purina y pirimidina), los lípidos y los carbohidratos. La evaluación simultánea de estos componentes permite una evaluación exhaustiva de las variaciones bioquímicas asociadas con la actividad de la telomerasa y la remodelación estructural que acompaña a la progresión tumoral.

En esta región espectral se identificaron varias bandas Raman características. La banda a 1640 cm^{-1} se atribuyó a las vibraciones de Amida I [23,24], mientras que el pico a 1555 cm^{-1} se atribuyó a la enzima telomerasa [25]. La característica cerca de 1371 cm^{-1} correspondía a los modos de respiración del anillo de las bases de ADN/ARN adenina, timina y guanina (A, T, G) [26,27]. Las vibraciones de amida III aparecieron entre 1200 y 1330 cm^{-1}, junto con señales entre 1350 y 1400 cm^{-1} asociadas a regiones ricas en triptófano y guanina [28]. La fenilalanina se detectó claramente a aproximadamente 1003 cm^{-1}, sirviendo como un marcador de normalización estable. La banda a 766 cm^{-1} se atribuyó a los modos de respiración del anillo de pirimidina de los residuos rC y rU, componentes relevantes de la telomerasa [29]. Finalmente, las bandas a 536 cm^{-1} y 456 cm^{-1} se

atribuyeron al colesterol y a los modos de torsión del anillo de los grupos fenilo, respectivamente [30]. Véase la Tabla 2.

La Figura 2 presenta los espectros Raman correspondientes a las ocho muestras positivas para linfoma no Hodgkin y la muestra de control negativo, lo que proporciona una visualización comparativa de las diferencias espectrales entre ambos grupos.

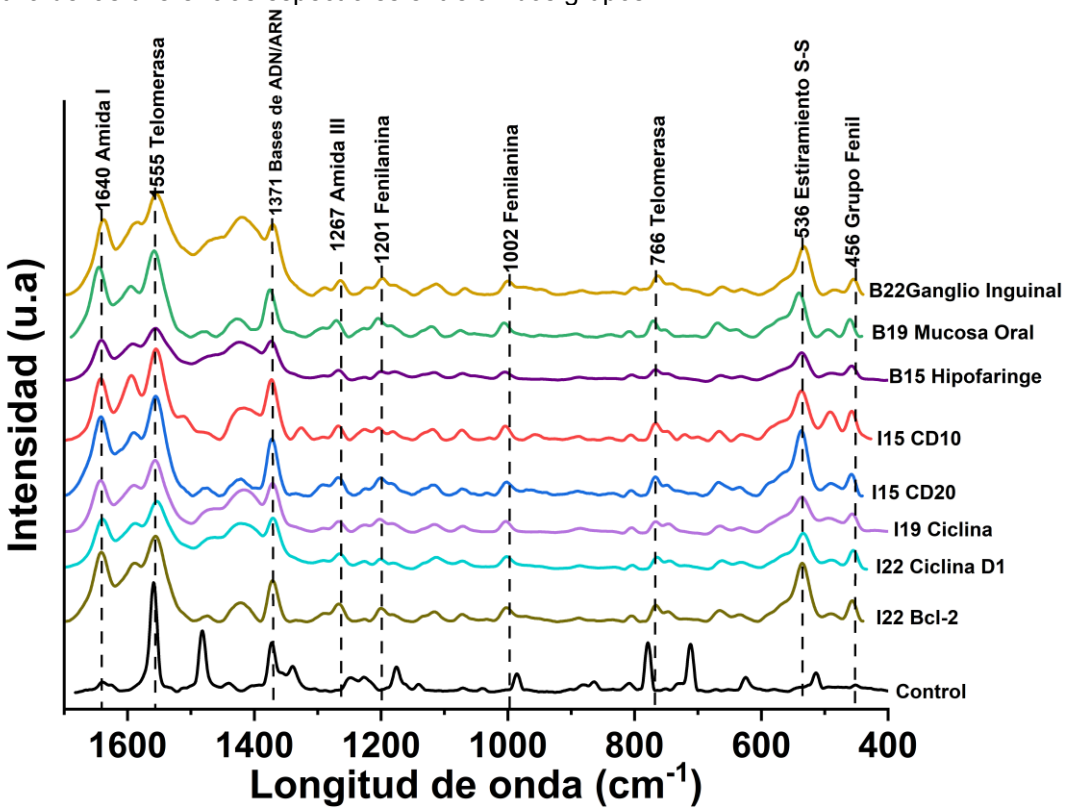


Fig. 2. Espectros Raman de muestras de tejido con linfoma no Hodgkin (B22, B19, B15, I15 CD10, I15 CD20, I19 Ciclina, I22 Ciclina D1, I22 Bcl-2) y de tejido de control sin cáncer («Control»).

Tabla 2. Bandas Raman de tejido sano y de tejido con linfoma.

Longitud de onda Raman (cm^{-1})		
Muestra de tejido normal	Muestra positiva a LNH	Asignación
1640	1642	Amida I [67], [68]
1558	1556	Telomerasa[69]
1481		Bases purínicas del ácido nucleico (G, A)[70]
1439		Deformación CH_2 (lípido)[70]
	1416	Estiramiento en el anillo quinoide C-C [67]
1371	1371	T, A, G (Modos de respiración del anillo de bases de ADN/ARN)[67]
1339		Amida III[71]
1248		Amida III (Estructura aleatoria)[72]
	1267	Amida III (α hélices)[72]
1226		Amida III (β intermolecular)[72]
	1201	Fenilalanina (cadena lateral)[72]
1175		Modo de flexión C– H en el plano de la tirosina [70]
1141		Carbohidratos [67]
	1115	Flexión en el plano $CH_{2,6}$ y flexión C_1-C_α-H_α [67]

1070	1070	Lisina [72], [73]
1039		Estiramiento C-O de carbohidratos[74]
985	1002	Vibración de estiramiento, modo de respiración simétrica en anillo, fenilalanina [74]
882	884	Triptófano d(anillo)[75]
862		Ácido fosfatídico (lípido)[76]
808	804	Fosfodiéster (marcador Z)[67]
779	766	Modos de respiración del anillo de pirimidina presente en los residuos rC y rU de la telomerasa. [49]
711		Estiramiento simétrico C-C-N_+ en fosfatidilcolina (lípido)[77]
754	746	Respiración simétrica de triptófano [74]
669	665	T, G y ν(C-S) de cisteína (DNA/RNA)[74]
513		Conformación gauche-gauche-gauche (ggg) y estiramiento (S-S)[72], [78]
	536	Conformación gauche-gauche-trans (ggt) estiramiento (S-S) [72], [78]
	494	Estiramiento S-S en cisteína [78]
452	456	Giros del anillo del grupo fenilo [79]

3.2 Análisis de componentes principales.

Se utilizó el análisis de componentes principales (PCA) para evaluar la estructura de la varianza del conjunto de datos espectrales y para explorar la separación entre las muestras de tejido positivas para linfoma no Hodgkin (LNH) y las muestras de tejido de control. El análisis incluyó las bandas Raman principales a 1640, 1555, 1371 y 766 cm^{-1}, correspondientes a los modos de vibración de Amida I, telomerasa, bases de ADN/ARN y anillo de pirimidina, respectivamente.

La Figura 3 muestra los gráficos de puntuación del PCA bivariado (PC1 vs. PC2) obtenidos a partir de los datos espectrales. Para la banda de Amida I (1640 cm^{-1}), PC1 representó el 77,97 % de la varianza total y PC2 el 20,03 %. Para la banda de telomerasa (1555 cm^{-1}), PC1 explicó el 16,01 % y PC2 el 15,14 %. Para la banda de ADN/ARN (1371 cm^{-1}), PC1 y PC2 contribuyeron con un 91,56 % y un 6,50 %, respectivamente, mientras que para la banda de 766 cm^{-1}, las contribuciones respectivas fueron del 62,15 % y del 35,36 %.

En todos los casos, los gráficos de PCA mostraron patrones de agrupamiento claros, con los espectros de tejido de control agrupados hacia la región superior de los gráficos y los espectros de tejido positivo para LNH ubicados predominantemente en los cuadrantes inferiores. Esta separación consistente entre los dos grupos de tejidos demuestra el alto poder discriminatorio de las bandas espectrales seleccionadas y respalda la solidez del análisis multivariante.

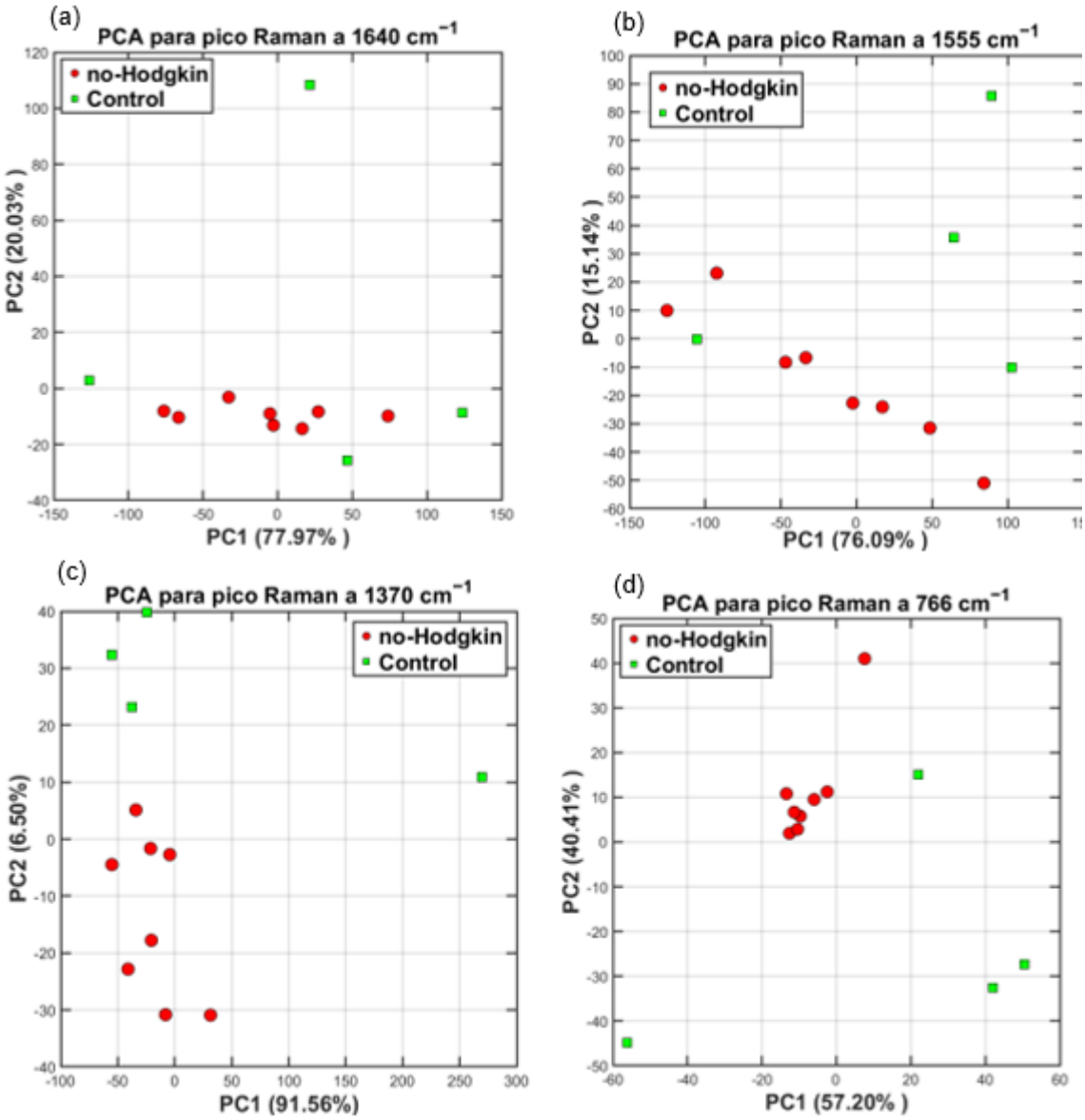


Figura 3. Gráficos de puntuaciones del análisis de componentes principales (PCA) derivados de las intensidades espectrales Raman de muestras de tejido positivo para linfoma no Hodgkin (LNH) y muestras de tejido de control. (a) PCA de la banda de 1640 cm^{-1} (amida I), (b) PCA de la banda de 1555 cm^{-1} (modo relacionado con la telomerasa), (c) PCA de la banda de 1371 cm^{-1} (bases de ADN/ARN) y (d) PCA de la banda de 766 cm^{-1} (modos de respiración del anillo de pirimidina). Los gráficos de puntuaciones muestran una agrupación consistente y una clara separación entre los espectros de tejido de control (cuadrados verdes) y los espectros de tejido positivo para LNH (círculos rojos) en todas las regiones vibracionales analizadas.

4.1 Interpretación espectral.

El análisis comparativo de los espectros Raman de muestras de tejido positivo para linfoma no Hodgkin (LNH) y de la muestra de tejido de control reveló diferencias consistentes en las regiones vibracionales asociadas con proteínas, ácidos nucleicos y lípidos (Tabla 2). La banda de Amida I cerca de 1640 cm^{-1} y las señales relacionadas con la telomerasa a 1555 cm^{-1} y 766 cm^{-1} se detectaron en ambas categorías de tejido, mostrando ligeros desplazamientos en la posición del pico

y variaciones en la intensidad relativa. Estas diferencias reflejan cambios espectrales medibles relacionados con la composición bioquímica del tejido analizado dentro de las condiciones de este estudio de caso [36].

El tejido de control mostró características distintivas a 1481 cm^{-1} y 1439 cm^{-1}, correspondientes a las bases de purina y a los modos asociados a los lípidos, respectivamente, así como vibraciones lipídicas adicionales a 862 cm^{-1} y 711 cm^{-1}. Estas bandas fueron menos prominentes o no se observaron en las muestras positivas para LNH. Tales distinciones concuerdan con informes previos en los que los tejidos de control o no malignos exhiben señales Raman relacionadas con los lípidos más intensas [22].

Por el contrario, los espectros de los tejidos positivos para LNH mostraron reducciones en las intensidades asociadas a los lípidos y a las purinas, junto con ligeros desplazamientos en las regiones de las amidas y la aparición de bandas de baja intensidad que no estaban presentes en el tejido de control. La banda cercana a los 536 cm^{-1}, atribuida al estiramiento S–S y a las vibraciones asociadas a los lípidos, presentó una intensidad notablemente menor en las muestras positivas para LNH, lo que pone de relieve una diferencia reproducible entre ambos grupos. Se observaron distinciones adicionales en la banda a 456 cm^{-1}, como se indica en la Tabla 2, en consonancia con las observaciones reportadas en investigaciones Raman anteriores [36].

Estas distinciones espectrales pueden interpretarse en términos de la composición molecular subyacente y las alteraciones bioquímicas relacionadas con la telomerasa en las muestras analizadas. En particular, los cambios concurrentes observados en las bandas asociadas a proteínas, ácidos nucleicos y lípidos sugieren que el tejido de linfoma que contiene telomerasa presenta un perfil vibracional distinto en comparación con el tejido de control. En el marco de este estudio de caso, estas observaciones respaldan el uso de las bandas Raman evaluadas como indicadores espectrales candidatos para caracterizar las diferencias bioquímicas entre el tejido positivo para LNH y el tejido de control.

4.2 Análisis de componentes principales.

El análisis de componentes principales (PCA) aplicado a las bandas de 1640, 1555, 1371 y 766 cm^{-1} mostró una clara diferenciación entre las muestras de tejido positivas para NHL y la muestra de tejido de control. Para cada región espectral, los dos primeros componentes principales capturaron una alta proporción de la varianza, y los gráficos de puntuación PC1-PC2 resultantes separaron de manera consistente los espectros en dos grupos distintos. Los espectros de tejido de control se alinearon predominantemente hacia las regiones superiores de los gráficos, mientras que los espectros de tejido positivo para LNH se agruparon en los cuadrantes inferiores. Esta separación reproducible confirma la capacidad discriminatoria de las bandas Raman seleccionadas y respalda el uso del análisis multivariante para distinguir entre ambas condiciones de tejido.

Entre las regiones vibracionales evaluadas, la banda de amida I a 1640 cm^{-1} produjo la mayor contribución a la varianza, lo que indica que las señales asociadas a las proteínas fueron un factor importante en la diferenciación espectral observada. La banda de 1555 cm^{-1} asignada a la telomerasa y la banda de 766 cm^{-1} asociada a los modos de respiración del anillo de pirimidina (rC y rU), descritas anteriormente como marcadores vibracionales del ARN de la telomerasa,[29] contribuyeron a los patrones de agrupamiento observados. La banda relacionada con el ADN/ARN a 1371 cm^{-1} también mostró un comportamiento discriminatorio. Estas observaciones concuerdan con estudios Raman que informan de huellas espectrales características en tejidos que presentan cambios patológicos [37].

Estos hallazgos concuerdan con estudios multivariantes previos de espectroscopia Raman en tejidos relacionados con el cáncer [28,29,37], los cuales han demostrado que el PCA puede diferenciar eficazmente los perfiles espectrales asociados a distintos estados bioquímicos. En el presente estudio de caso, la separación consistente entre los espectros de los tejidos de control y los positivos para LNH obtenidos de las regiones vibracionales seleccionadas respalda la aplicabilidad de la espectroscopia Raman, combinada con el PCA, como un enfoque analítico sin marcadores para

diferenciar las respuestas espectrales de estas categorías de tejidos dentro de un marco experimental bien definido.

CONCLUSIONES

Se aplicó la espectroscopia Raman al análisis de muestras de tejido histopatológicas e inmunohistoquímicas asociadas al linfoma no Hodgkin, utilizando un protocolo experimental controlado y un análisis multivariante. En este trabajo, se observaron diferencias espectrales características entre las muestras de tejido positivas para linfoma y una muestra de tejido de control negativa para cáncer en las regiones vibracionales asociadas a proteínas, ácidos nucleicos y componentes moleculares relacionados con la telomerasa.

La evaluación comparativa de las bandas Raman a 1640, 1555, 1371 y 766 cm^{-1}, junto con el análisis de componentes principales, reveló patrones espectrales consistentes que permitieron diferenciar entre las categorías de tejido analizadas en el contexto de este estudio de caso. Las señales asociadas a las proteínas, en particular las que contribuyen a la región de Amida I, representaron una fuente dominante de variación espectral, mientras que las bandas relacionadas con la telomerasa y los ácidos nucleicos proporcionaron información complementaria.

Es importante destacar que el presente estudio se plantea como un estudio de caso y no pretende establecer una generalización clínica. En cambio, los resultados demuestran la capacidad de un enfoque de medición basado en Raman para capturar y analizar características espectrales reproducibles asociadas con tejido de linfoma que contiene telomerasa en condiciones experimentales bien definidas. Estos hallazgos respaldan el uso de la espectroscopia Raman, combinada con el análisis multivariante, como un marco analítico sin marcadores para la evaluación espectroscópica de tejidos biológicos en escenarios de medición controlados.

BIBLIOGRAFÍA

[1] Picco Díaz MI, López Haro M de L, Arellano Flores AM. Linfoma no Hodgkin intraóseo. Reconstrucción mandibular secundaria: Reporte de un caso clínico. Revista Odontológica Mexicana Órgano Oficial de La Facultad de Odontología UNAM 2022;9:197–202. https://doi.org/10.22201/fo.1870199xp.2005.9.4.15961.

[2] Feugier P, Perrot A. Linfomas no Hodgkin: diagnóstico y tratamiento. EMC - Tratado de Medicina 2012;16:1–6. https://doi.org/10.1016/S1636-5410(12)61139-8.

[3] Bowzyk Al-Naeeb A, Ajithkumar T, Behan S, Hodson DJ. Non-Hodgkin lymphoma. BMJ 2018;362. https://doi.org/10.1136/BMJ.K3204.

[4] Huang MS, Weinstein HJ. Non-Hodgkin Lymphoma. Lanzkowsky's Manual of Pediatric Hematology and Oncology 2023:473–83. https://doi.org/10.1016/B978-0-12-821671-2.00040-4.

[5] Singh R, Shaik S, Negi B, Rajguru J, Patil P, Parihar A, et al. Non-Hodgkin's lymphoma: A review. J Family Med Prim Care 2020;9:1834. https://doi.org/10.4103/JFMPC.JFMPC_1037_19.

[6] Goldberg-Bittman L, Kitay-Cohen Y, Quitt M, Hadary R, Fejgin MD, Yukla M, et al. Telomere aggregates in non-Hodgkin lymphoma patients at different disease stages. Cancer Genet Cytogenet 2008;184:105–8. https://doi.org/10.1016/j.cancergencyto.2008.04.006.

[7] Zvereva MI, Shcherbakova DM, Dontsova OA. Telomerase: Structure, functions, and activity regulation. Biochemistry (Moscow) 2010;75:1563–83. https://doi.org/10.1134/S0006297910130055,.

[8] Roake CM, Artandi SE. Regulation of human telomerase in homeostasis and disease. Nat Rev Mol Cell Biol 2020;21:384–97. https://doi.org/10.1038/s41580-020-0234-z.

[9] Villazon J, Cruz N Dela, Shi L. Cancer Cell Line Classification Using Raman Spectroscopy of Cancer-Derived Exosomes and Machine Learning. Anal Chem 2025;97:7289–98. https://doi.org/10.1021/ACS.ANALCHEM.4C06966.

[10] Andreikos D, Spandidos DA, Epameinondas V. Telomeres and telomerase in mesothelioma: Pathophysiology, biomarkers and emerging therapeutic strategies (Review). Int J Oncol 2025;66. https://doi.org/10.3892/ijo.2025.5729.
[11] Cottliar ASH, Noriega MF, Narbaitz M, Rodríguez A, Slavutsky IR. Association between telomere length and BCL2 gene rearrangements in low- and high-grade non-Hodgkin lymphomas. Cancer Genet Cytogenet 2006;171:1–8. https://doi.org/10.1016/j.cancergencyto.2006.05.016.
[12] Cifuentes-Rojas C, Shippen DE. Telomerase regulation. Mutation Research/Fundamental and Molecular Mechanisms of Mutagenesis 2012;730:20–7. https://doi.org/10.1016/J.MRFMMM.2011.10.003.
[13] Shay JW, Wright WE. Telomeres and telomerase: three decades of progress. Nat Rev Genet 2019;20:299–309. https://doi.org/10.1038/S41576-019-0099-1.
[14] Orozco VM, Caicedo CA. Rol de la telomerasa en la carcinogénesis y en el envejecimiento prematuro. RevMedicaSanitas 2016;19.
[15] Klein K, Gigler AM, Aschenbrenner T, Monetti R, Bunk W, Jamitzky F, et al. Label-free live-cell imaging with confocal Raman microscopy. Biophys J 2012;102:360–8. https://doi.org/10.1016/j.bpj.2011.12.027.
[16] Ichimura T, Chiu L Da, Fujita K, Kawata S, Watanabe TM, Yanagida T, et al. Visualizing Cell State Transition Using Raman Spectroscopy. PLoS One 2014;9:e84478. https://doi.org/10.1371/JOURNAL.PONE.0084478.
[17] Kong K, Rowlands CJ, Varma S, Perkins W, Leach IH, Koloydenko AA, et al. Diagnosis of tumors during tissue-conserving surgery with integrated autofluorescence and Raman scattering microscopy. Proc Natl Acad Sci U S A 2013;110:15189–94. https://doi.org/10.1073/pnas.1311289110.
[18] Allakhverdiev ES, Khabatova V V., Kossalbayev BD, Zadneprovskaya E V., Rodnenkov O V., Martynyuk T V., et al. Raman Spectroscopy and Its Modifications Applied to Biological and Medical Research. Cells 2022;11:386. https://doi.org/10.3390/cells11030386.
[19] Stone N, Kendall C, Smith J, Crow P, Barr H. Raman spectroscopy for identification of epithelial cancers. Faraday Discuss 2004;126:141–57. https://doi.org/10.1039/B304992B.
[20] Lin H, Marjanović O, Lennox B, Šašić S, Clegg IM. Multivariate statistical analysis of Raman images of a pharmaceutical tablet. Appl Spectrosc 2012;66:272–81. https://doi.org/10.1366/11-06238.
[21] Li Y, Wen Z-N, Li L-J, Li M-L, Gao N, Guo Y-Z. Research on the Raman spectral character and diagnostic value of squamous cell carcinoma of oral mucosa. Journal of Raman Spectroscopy 2010;41:142–7. https://doi.org/10.1002/jrs.2421.
[22] Jeng MJ, Sharma M, Sharma L, Chao TY, Huang SF, Chang LB, et al. Raman spectroscopy analysis for optical diagnosis of oral cancer detection. J Clin Med 2019;8:1313. https://doi.org/10.3390/jcm8091313.
[23] Movasaghi Z, Rehman S, Rehman IU. Raman spectroscopy of biological tissues. Appl Spectrosc Rev 2007;42:493–541. https://doi.org/10.1080/05704920701551530.
[24] Hauptmann A, Hoelzl G, Mueller M, Bechtold-Peters K, Loerting T. Raman Marker Bands for Secondary Structure Changes of Frozen Therapeutic Monoclonal Antibody Formulations During Thawing. J Pharm Sci 2023;112:51–60. https://doi.org/10.1016/J.XPHS.2022.10.015/ATTACHMENT/4A7E7798-9245-4CF7-84EA-ACCB56B67C05/MMC1.PDF.
[25] Xu L, Zhao S, Ma W, Wu X, Li S, Kuang H, et al. Multigaps Embedded Nanoassemblies Enhance in Situ Raman Spectroscopy for Intracellular Telomerase Activity Sensing. Adv Funct Mater 2020;30:1602–8. https://doi.org/10.1002/adfm.201504587.
[26] Overman SA, Thomas GJ. Raman markers of nonaromatic side chains in an α-helix assembly: Ala, Asp, Glu, Gly, Ile, Leu, Lys, Ser, and Val residues of phage fd subunits. Biochemistry 1999;38:4018–27. https://doi.org/10.1021/BI982901E.
[27] Lasch P, Chiriboga L, Yee H, Diem, M. Infrared Spectroscopy of Human Cells and Tissue: Detection of Disease. Technol Cancer Res Treat 2002;1:1–7. https://doi.org/10.1177/153303460200100101.
[28] Agsalda-Garcia M, Shieh T, Souza R, Kamada N, Loi N, Oda R, et al. Raman-Enhanced Spectroscopy (RESpect) Probe for Childhood Non-Hodgkin Lymphoma. SciMed J 2020;2:1–7. https://doi.org/10.28991/scimedj-2020-0201-1.

[29] Reipa V, Niaura G, Atha DH. Conformational analysis of the telomerase RNA pseudoknot hairpin by Raman spectroscopy. RNA 2007;13:108–15. https://doi.org/10.1261/rna.182607.
[30] Chang C, Liu H, Chen C, Wu L, Lv X, Xie X, et al. Rapid diagnosis of systemic lupus erythematosus by Raman spectroscopy combined with spiking neural network. Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc 2024;310:123904. https://doi.org/10.1016/J.SAA.2024.123904.
[31] Kuhar N, Sil S, Umapathy S. Potential of Raman spectroscopic techniques to study proteins. Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc 2021;258:119712. https://doi.org/10.1016/J.SAA.2021.119712.
[32] Kast RE, Serhatkulu GK, Cao A, Pandya AK, Dai H, Thakur JS, et al. Raman spectroscopy can differentiate malignant tumors from normal breast tissue and detect early neoplastic changes in a mouse model. Biopolymers 2008;89:235–41. https://doi.org/10.1002/bip.20899.
[33] Ditta A, Nawaz H, Mahmood T, Majeed MI, Tahir M, Rashid N, et al. Principal components analysis of Raman spectral data for screening of Hepatitis C infection. Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc 2019;221:117173. https://doi.org/10.1016/J.SAA.2019.117173.
[34] Krafft C, Neudert L, Simat T, Salzer R. Near infrared Raman spectra of human brain lipids. Spectrochim Acta A Mol Biomol Spectrosc 2005;61:1529–35. https://doi.org/10.1016/j.saa.2004.11.017.
[35] Notingher I, Green C, Dyer C, Perkins E, Hopkins N, Lindsay C, et al. Discrimination between ricin and sulphur mustard toxicity in vitro using Raman spectroscopy. J R Soc Interface 2004;1:79. https://doi.org/10.1098/RSIF.2004.0008.
[36] Baba AI, Câtoi C. Comparative Oncology. Bucarest (RO): House of the Romanian Academy; 2007.
[37] Abramczyk H, Placek I, Brożek-Płuska B, Kurczewski K, Morawiec Z, Tazbir M. Human breast tissue cancer diagnosis by Raman spectroscopy. Journal of Spectroscopy 2008;22:2–3. https://doi.org/10.3233/SPE-2008-0337.

INFLUENCIA DEL ANILLO 1,2,3-TRIAZOL EN LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y REACTIVAS DE DERIVADOS FLUOROQUINOLÓNICOS: UN ESTUDIO TEÓRICO-COMPUTACIONAL

Reyes-Delgado Edna Nallely[1], Martínez-Guajardo Gerardo[1], Correa-Aguado Hans Christian[2] Hernández-López Hiram[1].

[1]Maestría en Ciencia y Tecnología Química, Universidad Autónoma de Zacatecas "Francisco García Salinas". [2]Instituto Politécnico Nacional, Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingeniería
edna.reyes@uaz.edu.mx

RESUMEN

Las quinolonas constituyen una familia de compuestos de gran interés debido a su versatilidad estructural y facilidad para la incorporación de modificaciones químicas. La introducción de diferentes heterociclos en el núcleo quinolónico ha despertado un notable interés científico por su potencial para generar nuevas entidades con actividad biológica. En este trabajo se analizó la influencia del anillo 1,2,3-triazol sobre la estructura electrónica y conformacional de derivados quinolónicos, evaluando su efecto en la distribución electrónica, la aromaticidad y su estabilidad química.

Los resultados obtenidos mediante optimización geométrica, análisis de orbitales moleculares, descriptores cuánticos y estudios de aromaticidad indican que el anillo triazólico no es coplanar con el sistema quinolínico. Esta disposición geométrica limita la conjugación electrónica entre ambos sistemas, disminuyendo la aromaticidad extendida de la molécula; sin embargo, el triazol ejerce una influencia significativa sobre la distribución electrónica global.

Los descriptores cuánticos revelan que los híbridos triazol-quinolona (FQT) presentan una mayor reactividad que Norfloxacino y Levofloxacino, atribuible a la redistribución electrónica inducida por el heterociclo. En particular, FQT-03 exhibe el valor de HOMO más alto, el LUMO más bajo y el menor intervalo energético HOMO-LUMO, sugiriendo una mayor flexibilidad electrónica y una potencial capacidad de interacción con blancos biológicos. Asimismo, los híbridos FQT muestran mayores valores de suavidad y electrofilicidad, así como una mejor capacidad para donar y aceptar electrones.

INTRODUCCIÓN

La posición C-7 de las fluoroquinolonas desempeña un papel fundamental en la actividad antimicrobiana de esta familia de compuestos. Diversos estudios han demostrado que la incorporación de heterociclos amínicos alifáticos en esta posición puede modificar significativamente su perfil biológico, siendo los sistemas de seis miembros, como la piperazina, los sustituyentes más empleados. En contraste, la incorporación de anillos aromáticos en C-7 suele disminuir la actividad antimicrobiana, llegando en algunos casos a generar compuestos con escasa o nula actividad biológica. Sin embargo, el efecto de heterociclos aromáticos nitrogenados, como el 1,2,3-triazol, sobre las propiedades estructurales y electrónicas de las fluoroquinolonas aún no ha sido estudiado de manera sistemática[1].

El anillo 1,2,3-triazol es un heterociclo aromático con una distribución electrónica característica capaz de modificar la polaridad y el momento dipolar de las moléculas a las que se incorpora[2]. Su presencia podría afectar parámetros relevantes para la actividad biológica de las fluoroquinolonas, tales como la distribución de densidad electrónica, la conformación molecular, la aromaticidad, la capacidad de interacción con biomoléculas y las propiedades de transporte en sistemas biológicos. En particular, cambios en la geometría o en la deslocalización electrónica podrían influir en el reconocimiento molecular de enzimas blanco, como la ADN girasa y la topoisomerasa IV[3].

Los resultados experimentales reportados para derivados fluoroquinolona-triazol muestran comportamientos diversos, observándose en algunos casos una mejora de la actividad biológica y

en otros una disminución de la misma[1,4]. Estas observaciones sugieren que el efecto del triazol depende de la manera en que modifica las propiedades electrónicas y estructurales del sistema quinolónico. Adicionalmente, la obtención de productos con una coloración más tenue de la esperada sugiere posibles cambios en la extensión efectiva de la conjugación electrónica del sistema[1].

En este contexto, las herramientas de química computacional constituyen una estrategia adecuada para estudiar la influencia del anillo 1,2,3-triazol sobre las propiedades de las fluoroquinolonas. El análisis de la estructura electrónica, la aromaticidad, los orbitales moleculares y la reactividad permite establecer relaciones estructura-propiedad que contribuyan a comprender el efecto de este heterociclo y orientar el diseño racional de nuevos derivados con potencial interés farmacológico[5].

METODOLOGÍA

Para los cálculos de optimización geométrica y el mapeo de orbitales moleculares se utilizó el programa Gaussian 16, empleando el funcional PBE0 junto con la base def2-TZVP.

El análisis de aromaticidad se llevó a cabo mediante el cálculo de blindajes magnéticos utilizando el método GIAO (Gauge Including Atomic Orbital), empleando el funcional B3LYP y la base 6-311++G(d,p), con el fin de evaluar las propiedades magnéticas locales asociadas al sistema aromático.

RESULTADOS

Optimización

Las optimizaciones geométricas convergieron satisfactoriamente para todos los compuestos estudiados, obteniéndose energías electrónicas de −1236.37055058, −1297.49862031 y −1310.2759 u.a. para FQT-01, FQT-02 y FQT-03, respectivamente. Los valores obtenidos son consistentes con estructuras estables y comparables a los reportados previamente para fluoroquinolonas relacionadas, como Norfloxacino y Levofloxacino[6].

El análisis de los parámetros geométricos (Tabla 1) reveló la presencia de un puente de hidrógeno intramolecular característico de esta familia de compuestos. Asimismo, se observó que el anillo 1,2,3-triazólico adopta una orientación no coplanar respecto al núcleo quinolínico. Los ángulos diedros calculados entre ambos sistemas fueron de 25.14°, 51.42° y 57.54° para FQT-01, FQT-02 y FQT-03, respectivamente. Este incremento progresivo de la desviación angular sugiere que la naturaleza de los sustituyentes presentes en la molécula influye significativamente en la conformación espacial del sistema.

La pérdida de coplanaridad limita la conjugación electrónica entre el anillo triazólico y el sistema quinolínico, lo que puede repercutir en la distribución electrónica y en las propiedades aromáticas de los híbridos. El mayor efecto se observó en FQT-03, donde la presencia de sustituyentes voluminosos favorece una orientación más alejada del plano de la quinolona.

	FQT-01	FQT-02	FQT-03
Longitud de Enlace			
O1-H13-O3	1.66128	1.6721	1.66492
O3-H13	0.99514	0.99407	0.99469
F1-C5	1.33595	1.32887	1.33189
N2-C6	1.40435	1.40207	1.40573

C11-H8	1.07446	1.07643	1.07794
Ángulo de enlace			
H13-O3-C16	108.187	108.247	108.265
F1-C5-C6	119.541	118.311	117.657
N2-C6-C4	118.987	120.212	120.304
C13-C12-C11	131.335	131.535	130.344
Ángulo diedro			
O2-C13-C12-C11	-112.505	-113.416	30.681
C11-N2-C6-C5	25.14	51.42	-57.537

Tabla 1. Parámetros geométricos pertenecientes a los híbridos triazol-quinolona con el orbital hibrido PBE0 en fase gaseosa

Aromaticidad

Los perfiles de blindaje magnético obtenidos mediante el método GIAO muestran diferencias significativas entre los anillos que conforman los híbridos fluoroquinolona-triazol (Figura 1). El Anillo 1 presenta una región central de desblindaje característica de sistemas aromáticos, mientras que los Anillos 2 y 3 exhiben máximos de blindaje más intensos. Entre ellos, el Anillo 3 muestra el comportamiento más similar al observado para el benceno, lo que sugiere una mayor contribución aromática local.

Al comparar FQT-01, FQT-02 y FQT-03, se observa que la tendencia general de los perfiles se conserva, indicando que la incorporación de diferentes sustituyentes no modifica significativamente la aromaticidad intrínseca de los anillos. Sin embargo, las variaciones observadas en la intensidad del blindaje son consistentes con los cambios conformacionales obtenidos en la optimización geométrica. El incremento del ángulo diedro entre el anillo triazólico y el sistema quinolínico limita la conjugación electrónica entre ambos fragmentos, reduciendo la aromaticidad extendida del conjunto. Estos resultados indican que el triazol mantiene su carácter aromático propio, pero su contribución a la deslocalización electrónica global depende de la coplanaridad del sistema.

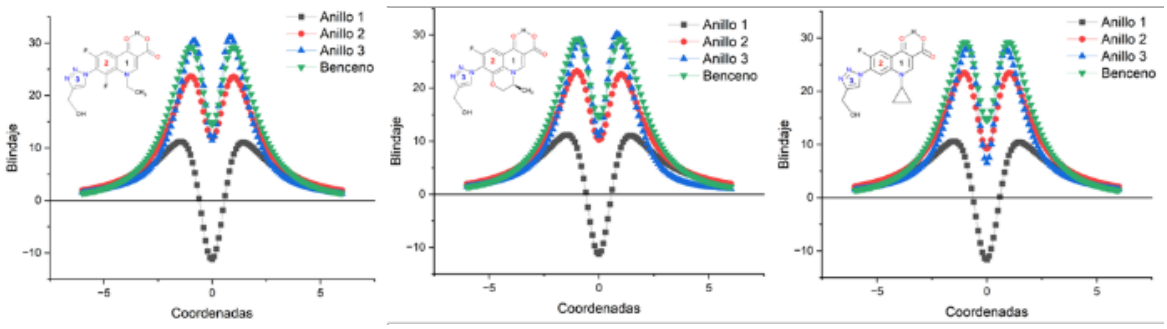


Figura 1. Perfiles de blindaje magnético calculados mediante el método GIAO para los anillos presentes en los híbridos fluoroquinolona–triazol FQT-01, FQT-02 y FQT-03, utilizando benceno como referencia aromática

Los mapas de densidad electrónica (Figura 2) muestran una distribución heterogénea de carga en los tres híbridos estudiados. Las regiones de mayor densidad electrónica se localizan principalmente alrededor de los átomos de oxígeno y nitrógeno, mientras que las zonas asociadas al núcleo quinolínico presentan una distribución más uniforme. La incorporación del anillo 1,2,3-triazólico modifica la polarización electrónica de la molécula, generando una redistribución de carga que se hace más evidente en FQT-03, donde se observa una separación más marcada entre regiones electrónicamente ricas y deficientes.

Los mapas de contorno confirman esta tendencia y evidencian que la densidad electrónica no se distribuye homogéneamente a lo largo de toda la estructura. La localización preferencial de carga sobre los heteroátomos y grupos carbonilo sugiere que estas regiones constituyen los principales centros de interacción intermolecular y potenciales sitios de reconocimiento biológico.

El análisis de los orbitales moleculares fronteras (Figura 3) muestra que los orbitales HOMO se localizan sobre regiones asociadas al sistema heterocíclico y a los sustituyentes nitrogenados, mientras que los orbitales LUMO se distribuyen principalmente sobre el núcleo quinolínico y los grupos carbonilo. Esta separación espacial favorece procesos de transferencia electrónica intramolecular y pone de manifiesto el efecto modulador del anillo triazólico sobre la estructura electrónica de la molécula.

Los descriptores cuánticos obtenidos a partir de las energías HOMO y LUMO indican que los híbridos FQT poseen una mayor reactividad electrónica que Norfloxacino y Levofloxacino. Los tres compuestos presentan valores de LUMO considerablemente más bajos y menores intervalos energéticos que las fluoroquinolonas de referencia. En particular, FQT-03 exhibe el HOMO de mayor energía (-6.4043 eV), el LUMO más estabilizado (-2.6676 eV) y el menor gap energético (3.7367 eV), lo que indica una mayor facilidad para participar en procesos de transferencia electrónica (Tabla 2).

De manera consistente, FQT-03 presenta el mayor valor de suavidad global (S = 0.2676) y el índice de electrofilicidad más elevado (ω = 5.5060 eV), mientras que Norfloxacino y Levofloxacino muestran mayores valores de dureza química y menores capacidades de redistribución electrónica. Estos resultados sugieren que la incorporación del anillo 1,2,3-triazol incrementa la flexibilidad electrónica de los híbridos y favorece la estabilización de estados cargados.

En conjunto, los mapas de densidad electrónica, los orbitales frontera y los descriptores cuánticos indican que el anillo triazólico actúa como un modulador electrónico capaz de alterar la distribución de carga y aumentar la reactividad molecular de los derivados FQT. Entre ellos, FQT-03 destaca como el compuesto electrónicamente más reactivo, resultado consistente con su menor separación HOMO-LUMO y sus mayores valores de suavidad y electrofilicidad.

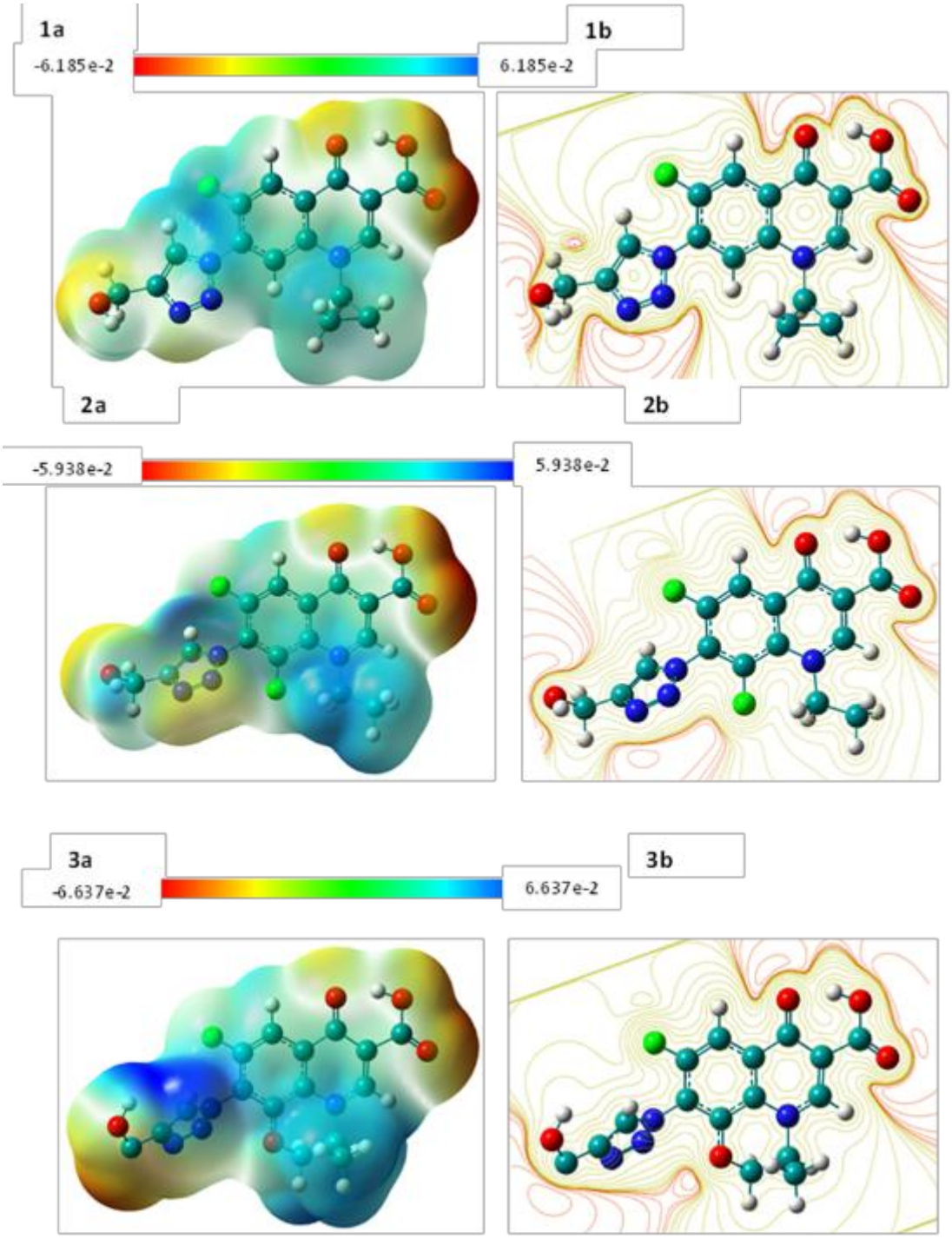


Figura 2. Mapeos de densidad electrónica de híbridos FQT-01 (1a) y contorno (1b), híbridos FQT-02 (2a ,b) y FQT-03 (3 a,b)

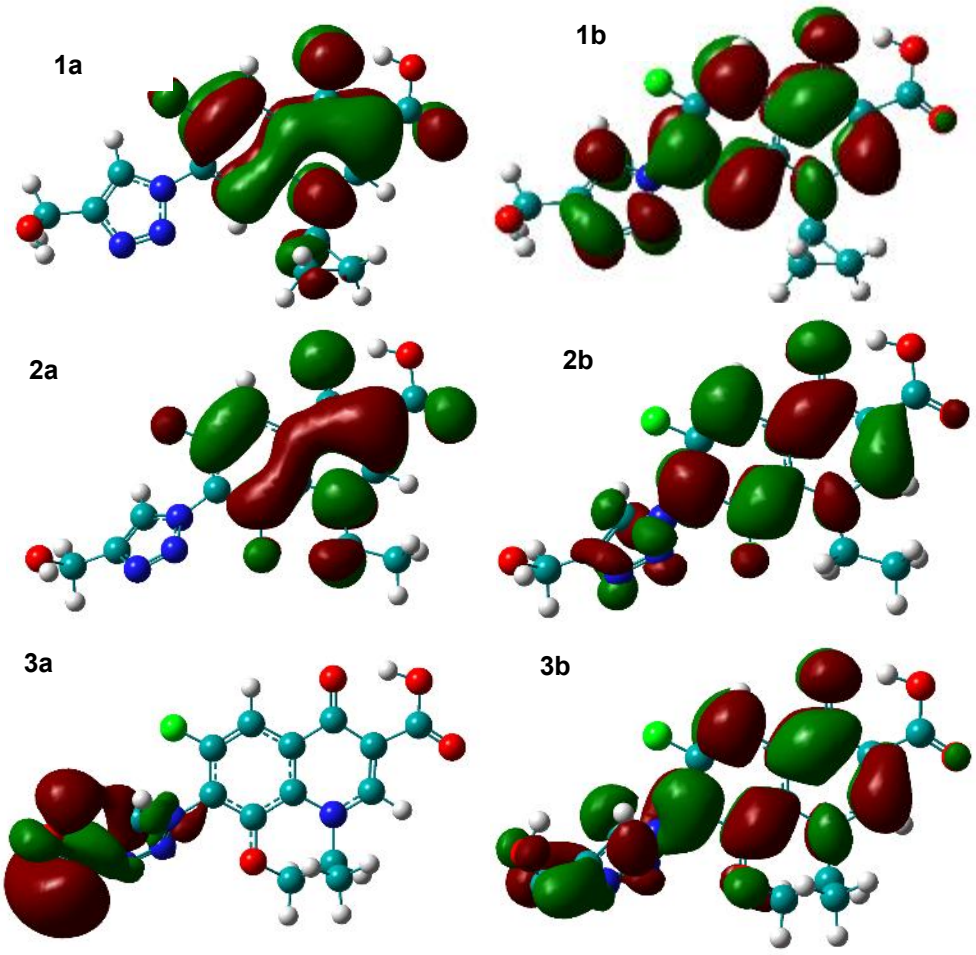


Figura 3. Orbitales moleculares frontera HOMO (a) y LUMO (b) de los híbridos fluoroquinolona–triazol FQT-01 (1), FQT-02 (2) y FQT-03 (3), calculados al nivel PBE0/def2-TZVP.

Tabla 2. Energías de los orbitales frontera (HOMO y LUMO) y descriptores cuánticos globales de reactividad para los híbridos FQT y las fluoroquinolonas de referencia[6].

	FQT-01	FQT-02	FQT-03	Norfloxacino	Levofloxacino
E_{HOMO}	-7.22767	-7.29841	-6.4043	-7.740	-7.450
E_{LUMO}	-2.55027	-2.55394	-2.6676	-1.114	-1.077
E_{GAP}	4.67740	4.74448	3.7367	6.626	6.373
nsigma	2.33870	2.37224	1.8683	3.313	3.186
x	4.88897	4.92617	4.5359	4.427	4.425
CP	-4.88897	-4.92617	-4.5359	-4.427	-4.264
w	5.11011	5.11483	5.5060	2.958	2.852
N	0.19569	0.19551	0.1816	0.338	0.351
S	0.21379	0.21077	0.2676	0.151	0.157

CONCLUSIONES

La optimización geométrica de los híbridos fluoroquinolona–triazol reveló que el anillo 1,2,3-triazólico adopta una orientación no coplanar respecto al núcleo quinolínico, con ángulos diedros que aumentan de FQT-01 a FQT-03. Esta disposición limita la conjugación electrónica directa entre ambos sistemas aromáticos y restringe la aromaticidad extendida del conjunto.

Los cálculos de aromaticidad mostraron que, aunque la falta de coplanaridad reduce la interacción electrónica entre el triazol y la quinolona, el anillo triazólico conserva su carácter aromático intrínseco. Los perfiles de blindaje magnético indican que la aromaticidad permanece principalmente localizada en los diferentes fragmentos aromáticos de la molécula, siendo el Anillo 3 el que presenta el comportamiento más cercano al observado para el benceno.

El análisis de densidad electrónica, orbitales moleculares frontera y descriptores cuánticos evidenció que la incorporación del anillo 1,2,3-triazol modifica significativamente la distribución electrónica de las fluoroquinolonas. Los híbridos FQT presentan una mayor reactividad electrónica que Norfloxacino y Levofloxacino, reflejada en menores valores de gap energético, mayor suavidad y mayores índices de electrofilicidad.

Entre los compuestos estudiados, FQT-03 destacó por presentar el HOMO de mayor energía, el LUMO más estabilizado y la menor separación HOMO–LUMO, características asociadas a una mayor flexibilidad electrónica y capacidad de transferencia de carga. En conjunto, los resultados indican que el anillo 1,2,3-triazol actúa como un modulador electrónico de las propiedades de las fluoroquinolonas, alterando su distribución de densidad electrónica y aumentando su reactividad sin integrarse completamente al sistema aromático del núcleo quinolínico. Estos hallazgos proporcionan información útil para el diseño racional de nuevos derivados fluoroquinolónicos con propiedades electrónicas ajustables.

BIBLIOGRAFÍA

1 Zhang B. Comprehensive review on the anti-bacterial activity of 1,2,3-triazole hybrids. Eur. J. Med. Chem. 2019; 168: 357–372.
2 Schulze B, Schubert US. Beyond click chemistry-supramolecular interactions of 1,2,3-triazoles. Chem. Soc. Rev. 2014; 43: 2522–2571.
3 Pham TDM, Ziora ZM, Blaskovich MAT. Quinolone antibiotics. Medchemcomm. 2019; 10: 1719–1739.
4 Vaishnani MJ, Bijani S, Rahamathulla M, Baldaniya L, Jain V, Thajudeen KY *et al.* Biological importance and synthesis of 1,2,3-triazole derivatives: a review. Green Chem. Lett. Rev. 2024; 17. doi:10.1080/17518253.2024.2307989.
5 Ghasedi N, Ahmadi S, Ketabi S, Almasirad A. DFT based QSAR study on quinolone-triazole derivatives as antibacterial agents. *Journal of Receptors and Signal Transduction* 2022; 42: 418–428.
6 Sayin K, Karakaş D, Kariper SE, Sayin TA. Computational study of some fluoroquinolones: Structural, spectral and docking investigations. *J Mol Struct* 2018; 1156: 172–181.

APORTE AL CONOCIMIENTO DE LA DINÁMICA POBLACIONAL DE LA BIZNAGA DE FLORES ROSADAS (*Mammillaria Rhodantha* Link & Otto) EN UN ÁREA PROTEGIDA EN EL ESTADO DE HIDALGO, MÉXICO

Gabriela Selene Ortiz Burgos[1], Rocío Zárate Hernández [2], Mónica Rodríguez Palacio[2], Jhoana Díaz Larrea[2], Laura Núñez García[2], Andrés Sánchez Morales[2], Ricardo Campos Verduzco[2] y Janet Elizabeth Osnaya Becerril[2]

[1] Facultad de Estudios Superiores Zaragoza, UNAM, [2] Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa.
gsob@ciencias.unam.mx

RESUMEN

México posee una gran diversidad biológica y de esta uno de los grupos que más llama la atención son las cactáceas, plantas modificadas fisiológica y morfológicamente, lo que les ha permitido establecerse en ambientes de extrema aridez. Estas adaptaciones principalmente se enfocan en un aprovechamiento eficiente del agua, debido a la cantidad limitada en que se encuentra. No obstante, estas características que les permite sobrevivir también las hacen vulnerables a diversos factores causados por perturbación natural y antropogénica. Nuestro país alberga la mayor riqueza en el mundo de la familia Cactaceae contando con 913 taxa y, 80% de estas especies son endémicas del territorio mexicano y una de estas es *Mammillaria rhodantha* también llamada biznaga de flores rosadas, que a pesar de su gran importancia es escasa la información de esta especie. El objetivo de este trabajo es realizar un análisis de la población de M*. rhodantha* en el Parque Nacional el Chico, Hidalgo. Se realizó un muestreo por tiempo, ya que la distribución de los individuos no es homogénea, se registraron todos los individuos observados durante una hora tomando en cuenta su diámetro. Con esta información se realizó un análisis descriptivo y se construyó un histograma mediante la Regla de Sturges para determinar el número de clases, utilizando el diámetro de los individuos. Se midió un total de 100 individuos, con un promedio de 9.045 cm, y con un mínimo de 2.5 y un máximo de 27cm. Se obtuvo un total de ocho clases de tamaño utilizando el diámetro. Se observo que el número de individuos de la primera clase es muy bajo, en comparativo con la clase 2 y 3. En este sentido, la información recabada parece indicar que hay pocos organismos de pequeños tamaños, siendo más abundantes los individuos de los tamaños intermedios y escasos individuos de diámetros grandes. La distribución de tamaños en este estudio se puede concluir que hay un crecimiento diferencial para esta población de la Biznaga de flores rosadas, donde hay que resaltar el bajo número de individuos pequeños, lo que puede influir de manera importante en el reclutamiento y dar como resultado una disminución en el tamaño poblacional. Es importante resaltar la escasa o inexistente la información de *M. rhodantha* distribuida en el Parque Nacional el Chico, por lo que este trabajo busca contribuir a este conocimiento debido a que este grupo de plantas se encuentra fuertemente sometido a presiones por su alta demanda como plantas de ornato, lo que la vuelve blanco de extracción ilegal que junto con la pérdida de su hábitat la coloca en inminente peligro de extinción.

INTRODUCCIÓN

México se caracteriza por poseer una privilegiada posición geográfica y la confluencia de dos regiones biogeográfica, así como su compleja orografía hacen del territorio un ambiente que alberga una amplia biodiversidad. Dentro de esta diversidad encontramos al grupo de las cactáceas que son un grupo de plantas que poseen características morfológicas y fisiológicas, que les han permitido establecerse en ambientes de extrema aridez donde la pérdida de hojas en el estado adulto, una capa serosa y tejido suculento que les permite almacenar agua y evitar su perdida por evaporación, las hace un ejemplo claro de adaptación a condiciones extremas (Schwertner-Charão et al., 2023). Estas adaptaciones principalmente se enfocan en un aprovechamiento eficiente del agua, no obstante, estas características que les permite sobrevivir también las hacen vulnerables a diversos

factores causados por perturbación natural y antrópica. Dentro de este importante grupo vegetal encontramos a *Mammillaria rhodantha* también llamada biznaga de flores rosadas, especie endémica la cual se distribuye en varios estados donde se incluyen, a Guanajuato, Hidalgo, Jalisco, Michoacán, Morelos, Querétaro y Zacatecas. En el estado de Hidalgo encontramos El Parque Nacional El Chico es un sistema ampliamente heterogéneo por sus condiciones ambientales únicas donde se encuentra desde bosque de oyameles hasta cactáceas y suculentas. Debido a estas características y gran diversidad este trabajo tiene el objetivo de realizar un análisis de algunos aspectos poblacionales de la población de *M. rhodantha* en el Parque Nacional el Chico, Hidalgo, para así conocer aspectos de su dinámica.

PARTE EXPERIMENTAL

Area de estudio. Este trabajo se llevó a cabo en una zona dentro del Parque Nacional El Chico ubicado en el extremo occidental de la Sierra de Pachuca entre las coordenadas extremas de los 20° 10' 10'' a 20° 13' 25'' de latitud Norte y los 98° 41' 50'' a 98° 46' 02'' de longitud Oeste (Figura 1), comprende una superficie total de 2739 ha (CONANP, 2005, Razo-Zárate et al., 2013). Con base al sistema de Köppen modificado por García (1981), en el Parque Nacional se presenta un clima C(m) (w) b (i') gw" templado subhúmedo con lluvias en verano, la temperatura se encuentra entre los 12 y 18 °C, existiendo influencia de monzón y presentándose un porcentaje de lluvia invernal menor de 5 % de la total anual. El verano es fresco y largo, con inviernos fríos con poca oscilación térmica y presencia de canícula. La vegetación en la mayor parte del parque está formada por bosques de oyamel, con distintas condiciones de productividad. Las principales especies arbóreas son Abies religiosa, *Quercus* spp. y *Pseudotsuga macrolepis*, además de zonas donde predominan especies de matorral crassicaule (Razo-Zárate et al., 2013).

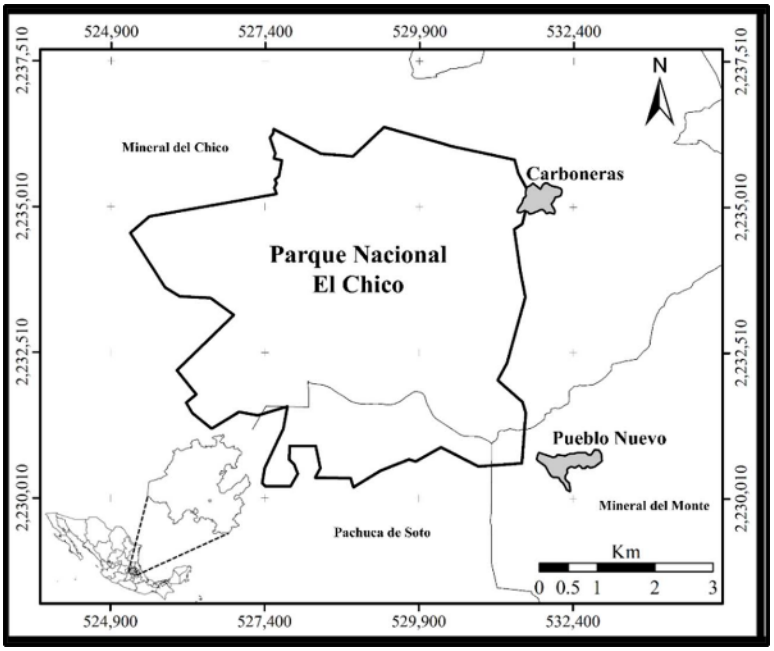


Figura 1. Toponimia del Parque Nacional el Chico (Tomado de Ortega-Meza et al., 2021).

Para este estudio se llevó a cabo un muestreo sin área debido a que la distribución de *M. rhodantha* se realizó el registro y medición de los organismos durante una hora. A los ejemplares observados se les registró el diámetro para evaluar la estructura de tamaños. Posteriormente mediante el programa estadístico NCSS se realizó un análisis descriptivo para la elaboración de un histograma que se utilizó la Regla de Sturges para determinar el número de clases utilizando el diámetro.

RESULTADOS

De acuerdo al muestreo realizado en la zona se registró un total de 100 individuos de *M. rhodantha*, en los cuales se encontraron diámetros con un intervalo entre los 2.5 cm y 27 cm, con un promedio 25.92 cm. Considerando el diámetro y mediante la regla de Sturges se determinaron ocho clases de tamaño, para esta población (Figura 2). De acuerdo a la estructura de tamaños se observa que existen pocos individuos de la primera clase de tamaño, mientras que en las clases 2 y 3 se concentra un alto número de individuos y posteriormente para el resto de las clases se registraron un número relativamente bajo de organismos.

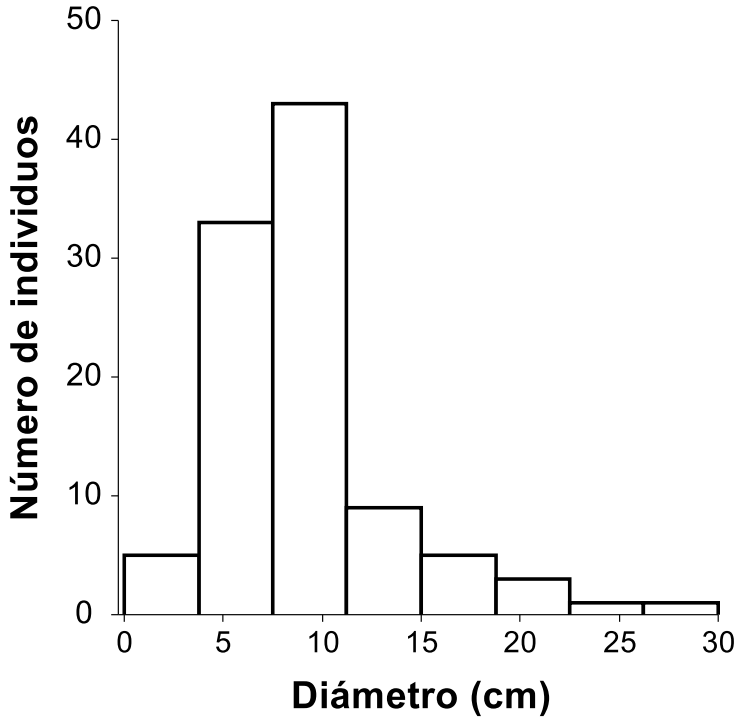


Figura 2. Estructura de tamaños mediante el diámetro de *M. rhodantha* en el Parque Nacional el Chico.

CONCLUSIONES

La distribución de tamaños en este estudio se puede concluir que hay un crecimiento diferencial para esta población de la Biznaga de flores rosadas, donde hay que resaltar el bajo número de individuos pequeños, lo que puede influir de manera importante en el reclutamiento y dar como resultado una disminución en el tamaño poblacional. La variación del número de individuos entre clases también podría ser un probable reflejo a condiciones favorables y desfavorables que puedan influir en la germinación de las semillas de la especie. Esta primera aproximación resalta la importancia de estudios que se enfoquen en el análisis de la estructura de tamaños de organismos tan especializados como lo son las cactáceas, ya que como pudimos observar la presencia de juveniles puede tener un efecto a corto plazo en las clases de tamaño consecutivas al tener una fuerte disminución de adultos reproductores. También es importante resaltar la escasa o inexistente información de las poblaciones de *M. rhodantha* que se encuentra distribuida en el Parque Nacional el Chico, por lo que este trabajo busca contribuir a este conocimiento debido a que este grupo de plantas se encuentra fuertemente sometido a presiones por su alta demanda como plantas de consumo y de ornato, lo que la vuelve blanco de extracción ilegal que junto con la pérdida de su hábitat la coloca en inminente peligro de extinción. Este aspecto se puede sustentar debido a que la

especie se encuentra en la categoría de acuerdo a la NOM-059-SEMARNAT-2010 como Sujeta a protección especial (Pr).

BIBLIOGRAFÍA

1. D. Ortega-Meza, M. T. Pulido Silva, J. Costa de Arruda, C. J. da Silva, N. Leal Sander & Adriana Gómez Aiza, “Conocimiento local acerca del laurel silvestre (*Litsea glaucescens* Kunth) en el Parque Nacional El Chico, Hidalgo, México”, Madera bosques, Vol.27, 2, 2021, pp. 1-15.
2. R. Razo-Zárate, A. J. Gordillo-Martínez, R. Rodríguez-Laguna, C. C. Maycotte-Morales & O. A. Acevedo-Sandoval. “Escenarios de carbono para el bosque de oyamel del Parque Nacional El Chico, Hidalgo, México”, Revista Latinoamericana de Recursos Naturales, Vol. 9, 1, 2013, pp. 17-21.
3. L. Schwertner-Charão, Leandro, J. Treviño-Carreón & R. Delgado Martínez, “Las fascinantes adaptaciones de las cactáceas y su historia evolutive”, CIENCIA ergo-sum, Vol. 30, 2, 2023, pp. 1-6.

ANÁLISIS DESCRIPTIVO DEL PODER REFRACTIVO EN OJOS DE QUELONIOS BAJO CONDICIONES DE CAUTIVERIO

Roberto Moreno Colín[1]; Jessica Aragón Guzman[1]; Alejandra Carrillo Bucio[2]; Gabriela Sánchez Fabila[1]*

[1] Laboratorio de Anatomía de Vertebrados y Educación Científica (LAVEC), FESI, UNAM.
[2] Secretaria de planeación y cuerpos colegiados
romorenoc@gmail.com

RESUMEN

La estructura y función en los seres vivos están vinculadas per se y son manifestación de un proceso evolutivo, manifestándose en una amplia gama de adaptaciones, entre las cuales están los ojos, órganos de vital importancia para la visión de los sistemas vivos, cómo las tortugas. Dos aspectos sustanciales entre otros, relacionados con la visión son la obtención de alimentos y la detección de depredadores. Los ojos de reptiles como los quelonios poseen un sistema óptico con poder dióptrico, capaz de refractar los rayos de luz y enfocarlos sobre la retina, este sistema presenta un estado refractivo medible en dioptrías el cual indica la convergencia o divergencia de los rayos luminosos en relación con el plano retiniano. El propósito de este trabajo es analizar el poder refractivo de los ojos de quelonios en cautiverio, para lo cual se consideró una muestra de 66 tortugas (12 especies), en cautiverio en el vivario de la FES Iztacala, UNAM a las cuales se les registró el poder refractivo de ambos ojos en Dioptrías, utilizando un retinoscopio Welch Allyn modelo WEA-18320C. Se consideraron dos medidas morfométricas: Longitud y Ancho de la cabeza, realizadas con vernier electrónico. Posteriormente se realizó un análisis de los datos con Excel para determinar similitudes o diferencias en Dioptrías de los ojos derecho e izquierdo. Fue realizado un análisis de correlación de Pearson y la elaboración de modelos con la ecuación alométrica, integrando las medidas morfométricas. Estos últimos análisis, se llevaron a cabo considerando las especies *Trachemys scripta elegans* y *Trachemis venusta*, por ser las especies con mayor número de organismos (37 organismos equivalente al 56% del total). Los resultados mostraron que la frecuencia de organismos con dioptrías positivas en la primera de las dos especies fue del 73.3% y 26.7% con valores de D (-), lo cual indica que un 73.3% presentan hipermetropía, y en *Trachemis venusta* el 72.7% presentan D (+). El resto de las especies mostraron un 64.9% de D(+) y un 35.1% de D(-). La correlación entre ojos derecho e izquierdo con la longitud del cráneo en ambas especies osciló en valores de R= 0.80 a R=0.96 la cual se considera fuerte y para la anchura del cráneo con el poder refractivo en ambos ojos osciló entre 0.81 a 0.87 valores de R. Los valores de R2 para las ecuaciones alométricas de predicción oscilaron entre 0.83 a 0.94 lo que indica un alto nivel de confianza en la predicción del poder refractivo de los ojos de estas especies. Para estos organismos los valores en Dioptrias + oscilaron entre 0.5 a 2.0 lo cual reafirma hipermetropía; se concluye que las tortugas revisadas presentan en un alto porcentaje hipermetropía y que hay una fuerte asociación entre la longitud y ancho de la cabeza con el poder refractivo de sus ojos.

Palabras clave: Poder refractivo, quelonios, Dioptrías, Hipermetropía, Morfometría, Correlación, regresión.

INTRODUCCIÓN

Los ojos de las tortugas son un ejemplo del proceso de adaptación al ambiente tanto terrestre como acuático. Dichos organismos se han adaptado maravillosamente para favorecer su supervivencia estrechamente relacionada con su capacidad de respuesta a dos aspectos esencialmente: la búsqueda y obtención del alimento, la detección y evasión de sus depredadores y los procesos de reproducción.

El proceso de visión en las tortugas es un proceso complejo donde son evidentes varios aspectos fundamentales: su anatomía ocular especializada, el proceso de visión y sus adaptaciones y algunos problemas oculares comunes en estos organismos.

Las tortugas como sistemas biológicos son sistemas abiertos que intercambian materia, energía e información; en el caso de los ojos de las tortugas son un medio excelente que permiten que tales organismos se desenvuelvan en su ambiente con las respuestas pertinentes ante los cambios que están en manifestándose y que implican su supervivencia.

Los quelonios habitan en medios terrestres, dulceacuícolas y marinos, y poseen adaptaciones visuales fundamentales para su supervivencia (Loew y Govardovskii, 2001). Por ello, el estudio de su refracción ocular y de las ametropías asociadas resulta relevante tanto para la biología comparada como para la clínica veterinaria. Asimismo, Northmore y Granda (1991) demostraron que la óptica ocular de estas especies varía según el entorno —aire o agua—, lo que evidencia que el medio influye decisivamente en la interpretación de las mediciones clínicas y experimentales de su visión.

Diversos autores han sugerido que ciertos rasgos cefálicos pueden servir como indicadores indirectos de la estructura interna del ojo, tal como se describe en la alometría ocular de los vertebrados. No obstante, hasta el momento solo se ha establecido que la longitud axial del ojo guarda una relación predecible con el tamaño corporal; específicamente en reptiles, se observa que sus ojos tienden a ser relativamente pequeños en proporción a su masa (Howland et al., 2004).

A pesar de estos avances, la vinculación entre la morfometría cefálica y la refracción en quelonios sigue siendo un campo poco estudiado. Por ello, identificar indicadores morfológicos sencillos como la longitud y el ancho de la cabeza resulta de gran utilidad en contextos clínicos, de manejo y de conservación, especialmente en especies donde la evaluación ocular directa presenta limitaciones.

OBJETIVO

Analizar el estado refractivo ocular de los ojos de tortugas en condiciones de cautiverio. Generar modelos alométricos de los valores refractivos obtenidos y las dimensiones morfometricas, mostrando su nivel de correlación.

METODOLOGÍA

Este estudio de tipo descriptivo fue realizado en el Laboratorio de Anatomía de Vertebrados y Educación Científica (LAVEC) de la FES Iztacala, UNAM, para ello se revisaron un total de 66 quelonios en cautiverio de 12 especies. A cada quelonio se le realizó retinoscopia en aire para cuantificar y estimar el poder dióptrico en Dioptrías*(D)* de cada ojo con ayuda de lentes esféricas y de un retinoscopio del Equipo de Diagnóstico Oftálmico 3.5V Welch Allyn modelo WEA-18320C, el cual sirve para valorar la refracción ocular, detectar irregularidades en la córnea, el cristalino y opacidades en los medios. Se realizaron las medidas morfométricas ancho y largo de la cabeza las cuales fueron obtenidas mediante el uso de un calibrador vernier, con estas medidas se realizaron análisis de correlación, regresión alométrica. Para el análisis de la correlación y realización de modelos de regresión alométrica fueron consideradas las especies de quelonios con mayor cantidad de organismos, las cuales fueron *Trachemys scripta elegans y Trachemys venusta con 15 y 22 tortugas*, lo cual corresponde al 56% de los organismos estudiados.

RESULTADOS

Son presentados los resultados obtenidos en el siguiente orden:

Poder dióptrico en Dioptrías; los valores de R como coeficiente de correlación de varias variables asociadas como el Ojo derecho y la longitud de la cabeza, Ojo izquierdo y la longitud de la cabeza, el Ojo derecho y la Anchura de la cabeza, Ojo izquierdo y la Anchura de la cabeza, y de estas mismas las ecuaciones alométricas correspondientes.

Poder dióptrico.

Tabla 1. Registro de Poder Dióptrico (PD) en 12 especies de tortuga. (OD=Ojo derecho; OI=Ojo izquierdo.

Especie	PDOD(D)	PDOI (D)	Largo de cabeza (LC)	Ancho de cabeza (AC)
Claudius angustatus	+1.50	+1.75	43	35
	+1.25	No evaluable	53	40
Kinosterno integrum	+1.50	+1.00	29	13
	-1.00	-0.75	40	29
	-1.25	-1.00	46	35
	-1.75	-1.25	49	36
Kinosterno leucostomum	-1.75	-1.50	22	13
	-1.00	-1.50	32	25
	+1.00	+0.50	35	23
	-0.50	-0.50	36	20
	+1.00	+0.75	38	29
Kinosternon herrerai	-1.00	-1.00	32	22
	+0.50	+1.00	34	22
	+0.50	+0.75	35	23
Kinosterno oaxacae	-1.00	-1.25	36	28
	+1.00	+1.50	40	34
	+0.75	+1.00	41	29
	+0.50	+0.75	44	22
	+1.75	+1.50	44	31
	+1.75	+2.00	47	33
Kinosterno sp.	+1.25	+1.00	32	18
	+0.75	+1.00	32	23
	+1.00	+1.25	37	25
	+1.25	+1.75	40	32
	-1.00	-1.25	46	37
Apalone Spiniferus	+1.25	+1.00	38	25
Kinosterno Hirtipes	-0.75	-1.52	23	15
Platemys Platicephala	+1.50	+1.50	28	20
Kinosterno Sonoriense	+1.25	+1.00	34	26
Trachemys scripta elegans	+0.5	+0.75	19	14
	-1.00	-0.75	29	21
	+1.25	+1.00	29	20
	-0.75	+0.25	31	22
	+0.75	+1.25	31	23
	+0.75	+1.00	32	20
	+1.75	+2.00	33	24
	+1.00	+0.75	35	25
	+0.75	+0.75	41	33
	+0.50	+0.75	43	32
	-1.00	-0.75	44	32
	+1.50	+1.00	44	37
	-1.25	-0.75	46	33
	+0.50	+0.75	50	34
	+1.25	+0.75	52	40
Trachemys venusta	+0.75	+0.50	26	43
	+1.00	+0.50	26	19
	-0.50	-0.75	32	19

	+1.25	+1.50	33	18
	+1.25	+1.50	33	24
	-0.75	-1.00	34	21
	-1.25	-1.50	34	22
	-1.50	-1.25	34	23
	-2.75	-3.00	35	24
	-1.00	-0.75	37	29
	+1.00	+1.25	37	25
	+0.75	+1.25	38	20
	+1.00	+0.75	40	21
	+1.00	+1.25	40	27
	+0.75	+1.00	40	25
	+1.50	+1.00	44	21
	+1.25	+1.50	44	31
	+0.50	+0.75	44	26
	+1.25	+1.00	45	34
	+1.75	+2.00	45	30
	+2.00	+2.00	47	34
	+1.25	+1.00	50	29

CORRELACIÓN Y REGRESIÓN ALOMÉTRICA

En la tabla 2 se muestran los modelos alométricos de los ojos derecho e izquierdo y su relación con la anchura de la cabeza y longitud de la cabeza.

Especie	Modelo Alométrico	R (Coeficiente de correlación)	R^2 (Coeficiente de determinación)
Trachemys scripta elegans	$OD = 38.886LC^{0.5757}$	0.94	0.90
	$OI = 37.804LC^{0.705}$	0.80	0.64
	$OD = 28.833AC^{0.6696}$	0.97	0.94
	$OI = 27.882AC^{0.8108}$	0.81	0.65
Trachemys venusta	$OD = 24.711AC^{0.6486}$	0.95	0.91
	$OI = 24.838AC^{0.5402}$	0.93	0.8703

OD=Ojo Derecho OI=Ojo Izquierdo Ecuación alométrica $y=aX^b$

ANÁLISIS DE RESULTADOS

Los datos respectivos se encuentran en la tabla 1.

En el caso de los ejemplares de *Kinosternon integrum* y *Kinosternon leucostomum* mostraron una tendencia hacia la miopía baja, sin embargo, este patrón no ha sido documentado previamente en estas especies ya que la literatura disponible está enfocada mayoritariamente a tortugas acuáticas o en modelos ampliamente estudiados como *Trachemys*. Dado que *K. integrum* y *K. leucostomum* son especies predominantes de zonas someras y de baja corriente que pasan gran parte del tiempo desplazándose y forrajeando a corta distancia del sustrato, la ligera tendencia a miopía observada podría estar relacionada con demandas visuales propias de su ecología. Si bien la literatura existente no reporta directamente el estado refractivo de estas dos especies, la combinación de su ecología documentada y la morfología ocular comparativa descrita para otros quelonios permite plantear esta posible relación funcional (Vázquez Gómez, 2014).

Por otro lado, Vázquez-Gómez, *op cit* ha documentado que, en su hábitat, *K. oaxacae* ocupa predominantemente cuerpos de agua dulce de escasa profundidad, como estanques temporales,

pozas, humedales efímeros o secciones de corrientes lentas. Estos ambientes se caracterizan por presentar variaciones estacionales significativas en el nivel y la turbidez del agua, resultando en un medio óptico dinámico donde la visibilidad y el índice de refracción entre agua y aire cambian con alta frecuencia. Dichas diferencias permiten proponer que *K. oaxacae* y K. herrerai debido a que la ecología de esas especies es similar, podrían estar expuestas a un entorno visual más cambiante entre aire y agua, lo cual influye en la forma en que sus sistemas ópticos se comportan cuando se miden en aire, a su vez, esta idea encaja con la tendencia observada a valores refractivos más positivos o hipermetrópicos. Aunque algunos ejemplares de *Kinosternon* examinados en la *Tabla 1* no habían sido especificados previamente, sus resultados refractivos fueron coherentes con los patrones observados en las especies discutidas anteriormente. Esto puede atribuirse a que las especies del género *Kinosternon* comparten una combinación de rasgos ecológicos y morfológicos relativamente conservados, debido a estas similitudes funcionales, no es inesperado que presenten valores refractivos comparables, aun cuando provengan de poblaciones o microhábitats distintos. Hay presencia de ametropías bajas en el grupo de las *T. Scripta Elegans*, que en este caso la hipermetropía leve es predominante en ambos ojos, lo cual es consistente con lo que se conoce sobre la fisiología ocular de la especie, cuya arquitectura visual está adaptada para funcionar tanto en ambientes acuáticos como terrestres. Con sustento del trabajo de Loew y Govardovskii (2001) que describe la diversidad de fotopigmentos y la capacidad adaptativa del sistema visual de esta especie, es posible interpretar la idea de que *T. scripta elegans* posee un sistema visual versátil y bien ajustado a cambios en la calidad del medio óptico, por lo que esta versatilidad podría contribuir a que los errores refractivos se mantengan dentro de rangos bajos como se observó en las mediciones realizadas. Por otro lado, Somma et al. (2014) describen que *T. scripta elegans* presenta una morfología ocular estable y valores biométricos muy consistentes entre individuos, lo que refleja un sistema visual anatómicamente bien conservado. En *T. venusta* se observó que la mayoría de los individuos presentó valores refractivos dentro de un rango de hipermetropía leve (entre ±0.50 *D* y ±2.00 *D*), con un número reducido de casos con ligera miopía. Al evaluar la posible relación entre estos valores y las dimensiones cefálicas, los datos mostraron un patrón consistente donde los organismos con mayor longitud y anchura de cabeza tendieron a presentar dioptrías más positivas, mientras que aquellos con cabezas más pequeñas mostraron valores refractivos más cercanos a la emetropía o incluso ligeramente miopes. Esta tendencia encuentra sustento tomando como referencia a Northmore y Granda (1991) quienes demostraron que, en tortugas, la combinación entre la forma esférica del cristalino, el poder óptico elevado y la longitud axial tiende a producir resultados cercanos a la emetropía. Finalmente, Rasys et al. (2021) describen procesos de elongación y remodelación del globo ocular en reptiles durante su desarrollo, por lo que es razonable pensar que directamente pueda influir el error refractivo final.

En la tabla 2, se muestran los modelos alométricos obtenidos, en los cuales los valores de R están por arriba de 0.8 (asociación entre variables fuerte de acuerdo a Durán et al, 2017) y los de R2 solo dos estuvieron por debajo de 0.8, el resto muestra valores del coeficiente de determinación de alto nivel de confianza en la predicción.

CONCLUSIONES

Especies del género ***Kinosternon*** presentan patrones refractivos asociados a su ecología y hábitat. Las especies de zonas someras y sustrato (***K. integrum y K. leucostomum***) tienden a la miopía baja, mientras que aquellas de ambientes variables y turbios (***K. oaxacae y K. herrerai***) muestran tendencia a la hipermetropía.

T. scripta elegans, predomina la hipermetropía leve, lo cual es coherente con su adaptación anatómica y fisiológica para desenvolverse eficientemente tanto en agua como en aire, manteniendo errores refractivos dentro de rangos bajos.

T. venusta, la mayoría presenta hipermetropía leve. Se observó una correlación directa con el tamaño de la cabeza: individuos con dimensiones cefálicas mayores tienden a tener dioptrías más positivas, mientras que los más pequeños se acercan más a la emetropía o ligera miopía. Se

encontró una correlación fuerte entre la anchura y largo de la cabeza y los ojos derecho e izquierdo, predominando modelos de predicción de alta confianza.

BIBLIOGRAFÍA

1. Baden T. Vertebrate vision: Lessons from non-model species. Elsevier, Seminars in Cell and Developmental Biology.106 (2020) 1-4
2. Durán D. A. et al (2017). Bioestadística, editorial FES Iztacala, UNAM, México.
3. Guzmán P. R. et al. (2010) Secretos de los reptiles. Museo de Historia Natural, Universidad Ricardo Palma, Lima.
4. Howland, H. C., Merola, S., & Basarab, J. R. (2004). The allometry and scaling of the size of vertebrate eyes. Vision research, 44(17), 2043–2065. https://doi.org/10.1016/j.visres.2004.03.023
5. Loew, E. R., & Govardovskii, V. I. (2001). Photoreceptors and visual pigments in the red-eared turtle, Trachemys scripta elegans. Visual neuroscience, 18(5), 753–757. https://doi.org/10.1017/s0952523801185081
6. Macip-Ríos R. (2024) Estudios sobre la biología y conservación de tortugas de México. Sociedad Herpetológica Mexicana A. C.; S. G. Editores, México
7. Northmore, D. P. M., & Granda, A. M. (1991). Ocular dimensions and schematic eyes of freshwater and sea turtles. Visual Neuroscience, 7(6), 627–635. https://doi:10.1017/S0952523800010415
8. Rasys, A. M., Pau, S. H., Irwin, K. E., Luo, S., Kim, H. Q., Wahle, M. A., Trainor, P. A., Menke, D. B., & Lauderdale, J. D. (2021). Ocular elongation and retraction in foveated reptiles. Developmental dynamics: an official publication of the American Association of Anatomists, 250(11), 1584–1599. https://doi.org/10.1002/dvdy.348
9. Somma, A. T., et al. The eye of the red-eared slider turtle: morphologic observations and reference values for selected ophthalmic diagnostic tests. Veterinary Ophthalmology (2014). https://doi.org/10.1111/vop.12213
10. Tovar B. B. M. O. El concepto de ecología visual. Revista de Facultad de Ciencias Básicas. 2009,Volumen 5 , Número 1, Páginas 24-41
11. Vázquez Gómez, A. (2014). Ecología poblacional y conservación de Kinosternon oaxacae en la costa de Oaxaca. https://hdl.handle.net/20.500.12371/6317

EVALUACIÓN DE LA REDUCCIÓN DE NITROANILINAS CON DITIONITO DE SODIO

Diana Karen Félix Aranda, Hiram Hernández López

Universidad Autónoma de Zacatecas "Francisco García Salinas"
Unidad Académica de Ciencias Químicas, Programa de Químico Farmacéutico Biólogo.
37184056@uaz.edu.mx

RESUMEN

La reducción de grupos nitro aromáticos a aminas constituye una transformación importante en síntesis orgánica debido a la amplia aplicación de las aminas aromáticas como intermediarios en la preparación de fármacos, colorantes y compuestos funcionales. Tradicionalmente, la reducción de nitrocompuestos se realiza mediante sistemas metálicos en medio ácido, como el método clásico Sn/HCl, reconocido por su alta eficiencia y conversión completa[2]. Sin embargo, se han explorado alternativas de fácil manejo y menos contaminantes, como el ditionito de sodio, reportado como agente reductor selectivo en sistemas aromáticos[1].

En el presente trabajo se evaluó la reducción de *p*-nitroanilina y 4-fluoro-3-nitroanilina con ditionito de sodio bajo diferentes condiciones de reacción y se compararon los resultados con el método de reducción con estaño. Las reacciones se realizaron variando la temperatura y la cantidad de agente reductor, utilizando sistemas etanol/agua y monitoreo mediante cromatografía en capa fina. La caracterización preliminar se efectuó mediante determinación de punto de fusión.

En el caso de la p-nitroanilina se observó conversión parcial utilizando ditionito de sodio, mientras que la 4-fluoro-3-nitroanilina no mostró cambios significativos bajo las condiciones evaluadas. En contraste, el método Sn/HCl permitió la reducción efectiva de ambos compuestos. Los resultados indican que el ditionito de sodio presenta limitaciones importantes bajo las condiciones estudiadas y que la naturaleza estructural del compuesto influye de manera determinante en la eficiencia de la reacción.

INTRODUCCIÓN

La reducción de grupos nitro aromáticos a aminas representa una de las transformaciones más importantes en síntesis orgánica, esto se debe a que las aminas aromáticas constituyen intermediarios clave en la obtención de fármacos, colorantes, agroquímicos y diversos compuestos funcionales que tienen interés industrial y farmacéutico. Además, este tipo de transformación permite la incorporación de grupos amino en estructuras aromáticas, los cuales pueden participar posteriormente en reacciones de acilación, alquilación y formación de heterociclos, ampliando así las posibilidades sintéticas de estos compuestos.

Tradicionalmente, la reducción de nitrocompuestos aromáticos se ha llevado a cabo mediante sistemas metálicos en medio ácido, entre los cuales destacan Sn/HCl, Fe/HCl y Zn/HCl. De manera particular, el método Sn/HCl ha sido ampliamente utilizado, esto se debe a su alta eficiencia y capacidad para lograr la conversión completa del grupo nitro a amina. Sin embargo, estos métodos presentan desventajas relacionadas con la generación de residuos metálicos y el manejo de medios fuertemente ácidos, lo cual ha impulsado la búsqueda de alternativas reductoras más manejables y con menor impacto ambiental.

Dentro de estas alternativas, el ditionito de sodio ($Na_2S_2O_4$) ha sido reportado como un agente reductor útil para diversos compuestos aromáticos. Este compuesto presenta ventajas asociadas a su disponibilidad, facilidad de manejo y selectividad bajo determinadas condiciones de reacción. No obstante, la eficiencia del proceso puede verse afectada por factores como temperatura, el medio de reacción, la cantidad de agente reductor y la naturaleza estructural del compuesto.

En compuestos aromáticos sustituidos, los efectos electrónicos ejercidos por determinados grupos funcionales pueden modificar de manera significativa la reactividad química del sistema. En particular, el átomo de flúor presenta un efecto inductivo electroatractor que disminuye la densidad electrónica del anillo aromático, lo cual podría influir en la eficiencia de la reducción cuando se emplea ditionito de sodio como agente reductor.

En el presente trabajo se evaluó la reducción de *p*-nitroanilina y 4-fluoro-3-nitroanilina utilizando ditionito de sodio bajo diferentes condiciones de reacción y se comparó su desempeño con el método tradicional Sn/HCl mediante monitoreo por cromatografía en capa fina.

TEORÍA

La reducción de nitrocompuestos aromáticos es un proceso complejo que involucra múltiples transferencias de electrones y protones hasta la formación de la amina correspondiente. Diversos estudios han propuesto la participación de especies intermedias, tales como derivados nitroso e hidroxilamina, antes de alcanzar el producto final. La velocidad y eficiencia de esta transformación dependen tanto del agente reductor empleado como de las condiciones experimentales bajo las cuales se desarrolla la reacción.

Entre los reactivos utilizados para este tipo de transformaciones se encuentra el ditionito de sodio ($Na_2S_2O_4$), un agente reductor soluble en agua ampliamente empleado en procesos químicos e industriales. Su capacidad reductora ha permitido su aplicación en la transformación de diversos grupos funcionales, incluyendo nitrocompuestos aromáticos. Sin embargo, la eficiencia del proceso puede verse afectada por factores como la temperatura, el tiempo de reacción, la concentración del agente reductor y la estabilidad del propio ditionito en solución.

Las nitroanilinas constituyen una familia de compuestos aromáticos que contienen simultáneamente grupos amino y nitro unidos al anillo bencénico. La presencia de grupos funcionales adicionales puede modificar las propiedades electrónicas de la molécula y, en consecuencia, influir en su comportamiento químico frente a procesos de reducción. Por esta razón, compuestos estructuralmente similares pueden presentar diferencias en su reactividad cuando son sometidos a las mismas condiciones experimentales.

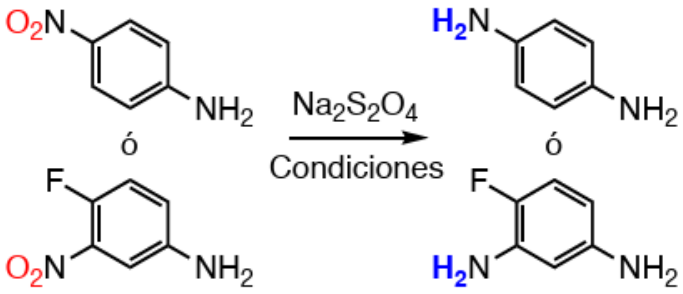


Figura 1. Reducción de nitroanilinas con $Na_2S_2O_4$.

PARTE EXPERIMENTAL

Reducción con ditionito de sodio

Se evaluó la reducción de *p*-nitroanilina y 4-fluoro-3-nitroanilina empleando ditionito de sodio en una mezcla etanol/agua (3:1). Se estudiaron diferentes cantidades de agente reductor (4, 8 y 12 equivalentes) a temperatura ambiente y con calentamiento. El avance de las reacciones fue monitoreado mediante cromatografía en capa fina.

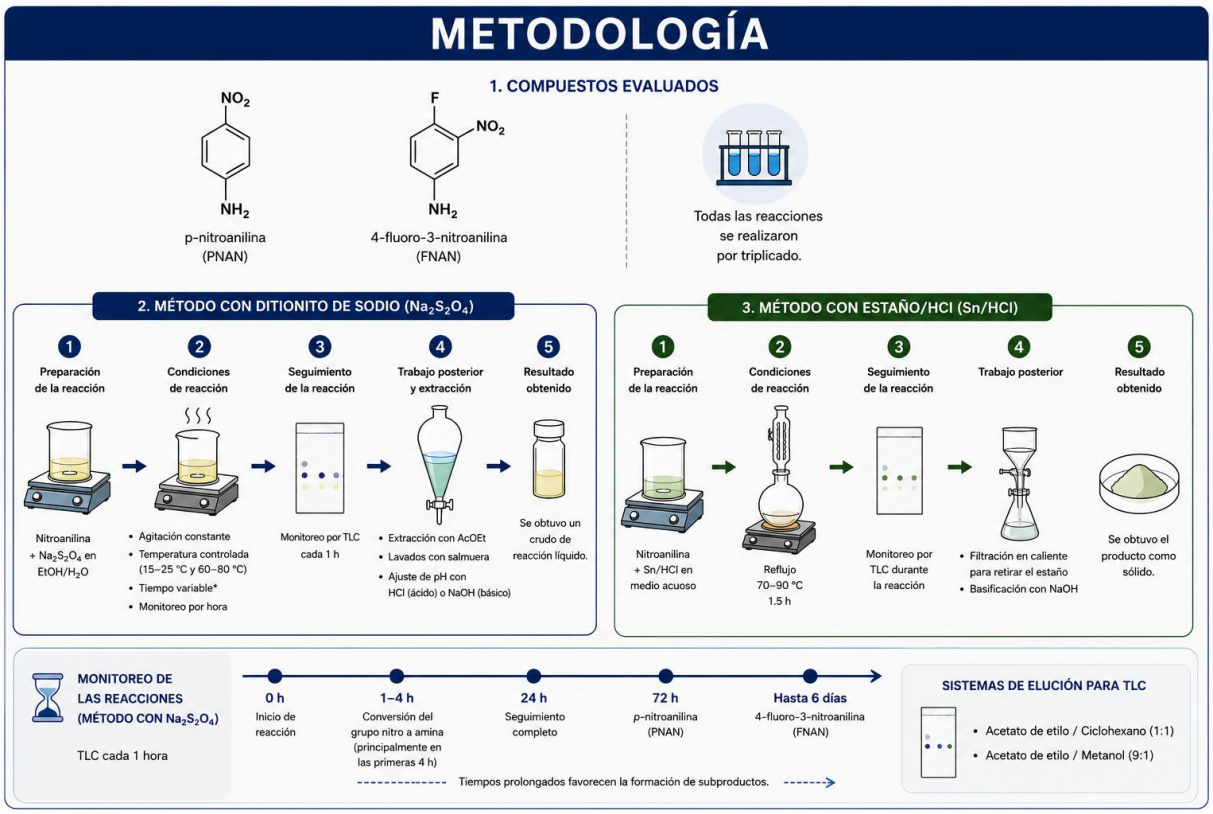


Figura 2. Esquema general de la metodología experimental empleada.

Reducción con Sn/HCl

Como método de referencia, se realizaron reacciones de reducción utilizando estaño y ácido clorhídrico concentrado bajo condiciones de reflujo. El avance de la reacción se evaluó mediante cromatografía en capa fina y, una vez concluida, se procedió al aislamiento del producto obtenido.

RESULTADOS

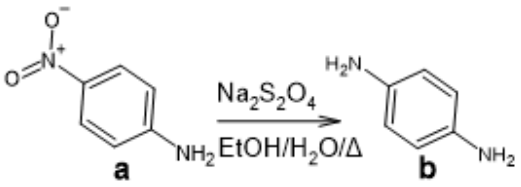


Figura 3.- Reacción de reducción *p*-nitroanilina

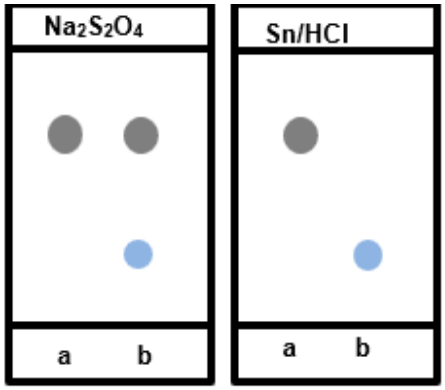


Figura 6.- TCL reducción *p*-nitroanilina con Na2S2O4 Y Sn/HCl

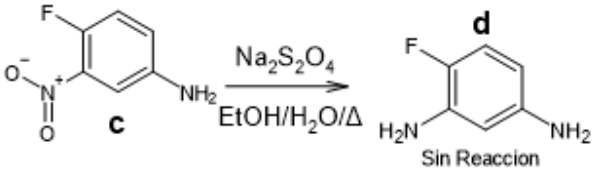


Figura 4.- Reacción de reducción 4-fluoro-3-nitroanilina

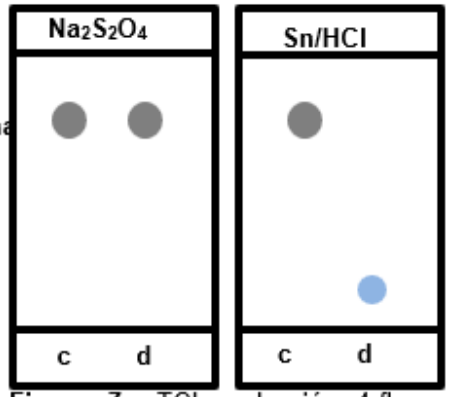


Figura 7.- TCL reducción 4-fluoro-3-nitroanilina con Na2S2O4 Y Sn/HCl



Figura 5.- Reacción de reducción Sn/HCl

La p-nitroanilina presentó conversión parcial con 4 eq. de Na2S2O4; con 2 eq. no se observó reacción y con 8 eq. la conversión fue menor. El aumento de temperatura favoreció ligeramente el proceso sin lograr conversión completa. La 4-fluoro-3-nitroanilina no mostró reacción, lo que se atribuye a la presencia del flúor, que reduce la densidad electrónica del sistema y dificulta la reducción en condiciones suaves. El método Sn/HCl permitió la reducción completa de ambos compuestos, evidenciando mayor eficiencia.

CONCLUSIONES

El Na2S2O4 presentó baja eficiencia en la reducción de nitroanilinas bajo las condiciones evaluadas, mostrando conversión parcial en la p-nitroanilina y ausencia de reacción en la 4-fluoro-3-nitroanilina. La cantidad de agente reductor y la estructura de los compuestos influyen en el desarrollo de la reacción. En comparación, el método Sn/HCl permitió la reducción completa de ambos compuestos, evidenciando una mayor efectividad.

BIBLIOGRAFÍA

1. J. M. Khurana, S. Singh, “Reduction of Nitroarenes with Sodium Dithionite”, J. Indian Chem. Soc., Vol. 73, 1996, pp. 487–488.
2. A. I. Vogel, Vogel's Textbook of Practical Organic Chemistry, 5th ed., Longman Scientific & Technical, Essex, 1989.

3. R. O. C. Norman, J. M. Coxon, Principles of Organic Synthesis, 3rd ed., Chapman & Hall, London, 1993.
4. M. B. Smith, J. March, March's Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms and Structure, 6th ed., Wiley, New York, 2007.
5. F. A. Carey, R. J. Sundberg, Advanced Organic Chemistry, Part B: Reactions and Synthesis, 5th ed., Springer, New York, 2007.
6. J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, Organic Chemistry, 2nd ed., Oxford University Press, Oxford, 2012.
7. T. W. Greene, P. G. M. Wuts, Protective Groups in Organic Synthesis, 4th ed., Wiley, New York, 2007.
8. P. N. Rylander, Catalytic Hydrogenation in Organic Syntheses, Academic Press, New York, 1979.
9. J. Clayden, N. Greeves, S. Warren, Organic Chemistry, 2nd ed., Oxford University Press, Oxford, 2012.

Moringa Oleífera COMO COAGULANTE-FLOCULANTE NATURAL PARA EL TRATAMIENTO DE AGUAS RESIDUALES PROVENIENTES DE UNA EMPRESA LAVADORA DE MEZCLILLA

Teodoro Rodríguez Pineda[1], María del Carmen Diaz Nava[1], Luis Antonio Castillo Suarez[2], Teresa Torres Blancas[1], Martha Manjarrez Olvera [1] y Maribel Verónica Albiter López[1]

[1] Instituto Tecnológico de Toluca, [2] Tecnológico de Estudios Superiores de Tianguistenco.
mm25282230@toluca.tecnm.mx

RESUMEN

Los efluentes de la industria textil se caracterizan por presentar elevada turbidez y coloración intensa, lo que dificulta su tratamiento mediante procesos convencionales y genera impactos ambientales negativos si es descargado sin tratamiento previo en cuerpos de agua naturales. El uso de coagulantes naturales representa una alternativa sostenible debido a su biodegradabilidad, bajo costo y menor generación de lodos secundarios en comparación con los coagulantes químicos tradicionales. En el presente trabajo se evaluó la eficiencia de las semillas de *Moringa oleífera* como coagulante-floculante (C-F) natural para la remoción de turbidez en agua residual textil, proveniente de un cárcamo de una lavandería industrial. Las semillas de moringa con cáscara fueron trituradas, tamizadas (malla 0.45 mm) y secadas a 60 °C durante 8h. Las muestras de agua residual se caracterizaron determinando: pH, turbidez, conductividad eléctrica, temperatura, demanda química de oxígeno (DQO), carbono orgánico oxidable y cloruros. Los experimentos se diseñaron aplicando un modelo Box-Behnken de tres factores utilizando el software Statgraphics Centurion XIX, considerando como variables independientes: dosis de moringa (g/L), velocidad de agitación rápida (rpm) y tiempo de agitación rápida (min). Los ensayos de coagulación-floculación se realizaron mediante la prueba de jarras, seguida de un período de sedimentación de 2h, midiendo la turbidez (NTU) del sobrenadante como variable de respuesta. Con los datos experimentales se realizó un análisis de varianza (ANOVA) y diagramas de Pareto para determinar la significancia estadística de los factores y evaluar el ajuste del modelo. Los resultados indicaron que la dosis de moringa tuvo un efecto significativo sobre la remoción de turbidez ($p<0.05$), mientras que la velocidad y el tiempo de agitación rápida no presentaron efectos estadísticamente significativos dentro de los rangos evaluados. Asimismo, el término cuadrático de la dosis mostró significancia, evidenciando un comportamiento no lineal asociado a la existencia de una dosis óptima. El modelo estadístico presentó un coeficiente de determinación elevado (R^2 = 97.98 %) y un R^2 ajustado de 94.35 %, lo que indica un ajuste adecuado y una alta capacidad para describir la variabilidad experimental observada. El modelo obtenido predice una eficiencia de remoción de 82.2% de turbidez, con 1.04 g/L del coagulante, 170 rpm y 3 (min) de agitación rápida, el agua tratada bajo estas condiciones tuvo un pH final de 6.2, turbidez de 10.1 NTU, conductividad eléctrica de 1683 µS/cm, temperatura 16.8°C, 258.75 mg/L de DQO, 162.86 mg/L de carbono orgánico oxidable y 40.8 mg/L de cloruros. La *Moringa oleífera* es un C-F natural eficiente para la reducción de la turbidez en agua residual textil, siendo la dosis el factor más influyente en el proceso. Estos resultados demuestran su potencial como una alternativa sostenible, eficiente y de bajo impacto ambiental para el tratamiento de efluentes industriales, contribuyendo al desarrollo de tecnologías de tratamiento más amigables con el medio ambiente.

Palabras clave: coagulante natural, Moringa oleífera, tratamiento de aguas residuales, turbidez, diseño experimental

INTRODUCCIÓN

La contaminación de cuerpos de agua por descargas de aguas residuales industriales constituye un problema ambiental relevante, particularmente en regiones con alta actividad textil. En la zona de Almoloya del Río, Estado de México, los efluentes generados por el lavado y teñido de mezclilla contienen elevadas concentraciones de colorantes sintéticos como el azul índigo y el azul de

metileno, los cuales se caracterizan por su alta estabilidad química y baja biodegradabilidad. Estas descargas han contribuido al deterioro de la calidad del agua en la Laguna de Almoloya del Río, provocando la disminución del oxígeno disuelto, la alteración del equilibrio ecológico y afectaciones a la biodiversidad acuática, así como a actividades socioeconómicas locales. Esta problemática se ve agravada por la presión sobre los recursos hídricos en la Cuenca Alta del Río Lerma y por el incumplimiento de la NOM-001-SEMARNAT-2021 en parámetros como color verdadero y demanda bioquímica de oxígeno.

Los tratamientos convencionales empleados para la remoción de estos contaminantes, basados en coagulantes químicos como el sulfato de aluminio y el cloruro férrico, presentan limitaciones asociadas a los costos, generación de lodos con contenido metálico y posibles alteraciones en las características fisicoquímicas del agua tratada. En este contexto, surge la necesidad de desarrollar alternativas sostenibles, eficientes y accesibles que permitan mejorar la calidad del efluente sin generar impactos secundarios.

Una opción es el uso de *Moringa oleífera* como una alternativa sustentable, este material presenta ventajas como su biodegradabilidad, bajo costo y disponibilidad local en el Estado de México, lo que lo convierte en una alternativa viable para pequeñas y medianas empresas del sector textil. Asimismo, la optimización del proceso de coagulación-floculación mediante herramientas estadísticas como el diseño Box-Behnken permite evaluar la influencia de variables operativas y maximizar la eficiencia de remoción de contaminantes.

Por lo anterior, el objetivo de esta investigación es evaluar el proceso de coagulación-floculación para el tratamiento de aguas residuales provenientes de una empresa lavadora de mezclilla, empleando semillas de *Moringa oleífera* como coagulante natural. Se realizó el muestreo del efluente conforme a la normatividad vigente, se determinaron sus propiedades fisicoquímicas antes y después del tratamiento, se optimizaron las condiciones de operación mediante un diseño experimental Box-Behnken considerando variables como dosis de coagulante (g/L), pH y tiempo de agitación (min) y finalmente, se validaron experimentalmente las condiciones óptimas obtenidas.

Se planteó como hipótesis que la aplicación de *Moringa oleífera* como coagulante natural permite alcanzar una reducción significativa (≥ 50 %) de la turbiedad y del color verdadero en aguas residuales de lavado de mezclilla, bajo condiciones óptimas de operación. En este sentido, la presente investigación se justifica ante la necesidad de generar alternativas de tratamiento más limpias y sostenibles, que contribuyan a la reducción del impacto ambiental de la industria textil y al cumplimiento de la normatividad vigente, promoviendo el uso de recursos naturales y tecnologías accesibles para la protección de los recursos hídricos.

TEORÍA

Las aguas residuales provenientes de la industria textil se caracterizan por presentar una elevada complejidad química debido a los procesos de lavado, blanqueo, teñido y acabado de telas. Durante estas etapas se emplean grandes volúmenes de agua y diversos productos químicos, entre los que destacan colorantes sintéticos, surfactantes, sales inorgánicas, agentes oxidantes, dispersantes y aditivos orgánicos. La presencia de colorantes con estructuras aromáticas complejas y grupos funcionales que les confiere alta estabilidad y resistencia a la degradación biológica y fotoquímica, lo que dificulta su eliminación mediante tratamientos convencionales (Sonal y Mishra, 2021).

Uno de los principales problemas asociados a estos efluentes es la presencia de color, el cual puede clasificarse como color aparente o color verdadero. El color aparente se relaciona con partículas suspendidas o coloidales que pueden removerse parcialmente mediante sedimentación o filtración, mientras que el color verdadero corresponde a colorantes disueltos que permanecen en solución incluso después de la clarificación. En aguas residuales textiles, este último representa uno de los principales desafíos de tratamiento, debido a la persistencia de los colorantes sintéticos disueltos (Goudjil et al., 2021).

Además del color, los efluentes textiles suelen presentar valores elevados de demanda química de oxígeno, sólidos suspendidos, sólidos disueltos y turbidez. Estas características indican la presencia de materia orgánica biodegradable y recalcitrante, así como de partículas que reducen la transparencia del agua. La disminución en la penetración de la luz puede afectar la fotosíntesis de los organismos acuáticos y alterar el equilibrio ecológico de los cuerpos receptores. Asimismo, se ha señalado que los efluentes textiles no tratados pueden contener compuestos con potencial tóxico o mutagénico, lo que evidencia la necesidad de aplicar tecnologías de tratamiento eficientes antes de su descarga (Badawi et al., 2023).

El comportamiento fisicoquímico de estos efluentes depende de factores como el tipo de fibra procesada, la clase de colorante utilizado, el pH, la concentración de sales, la temperatura y las condiciones operativas de la planta. Por ello, la caracterización previa del agua residual constituye una etapa fundamental para el diseño del tratamiento. Parámetros como color verdadero, turbidez, pH, DQO, sólidos suspendidos totales, conductividad y temperatura permiten identificar el tipo de contaminación predominante y seleccionar las condiciones de tratamiento más adecuadas. El conocimiento detallado de la composición del agua también permite ajustar la dosis de coagulante, reducir el consumo de reactivos y minimizar la generación de residuos secundarios (Correa Mahecha et al., 2021).

Entre los métodos utilizados para el tratamiento de aguas residuales textiles se encuentran los procesos físicos, químicos, biológicos e híbridos. Los procesos físicos, como sedimentación, filtración y adsorción, se emplean principalmente como tratamientos primarios o de pretratamiento. La adsorción puede remover colorantes y compuestos orgánicos persistentes mediante materiales de alta área superficial; sin embargo, su limitante principal es la regeneración y disposición del adsorbente saturado, lo que incrementa los costos de operación (Correa Mahecha et al., 2021).

Dentro de estos procesos se incluye la coagulación-floculación y las oxidaciones avanzadas, como ozonización, uso de peróxido de hidrógeno, fotocatálisis con dióxido de titanio y radiación ultravioleta. Estas técnicas pueden favorecer la degradación de estructuras aromáticas complejas mediante especies oxidantes de alta reactividad. Sin embargo, su aplicación requiere control de variables como pH, dosis de oxidante y tiempo de reacción, además de implicar un consumo energético considerable (Goudjil et al., 2021).

La coagulación-floculación destaca como uno de los métodos más utilizados en el tratamiento de efluentes textiles debido a su simplicidad operativa, bajo costo y capacidad para remover color, turbidez y sólidos suspendidos. Este proceso fisicoquímico tiene como finalidad desestabilizar partículas coloidales y compuestos disueltos mediante la neutralización de cargas eléctricas, favoreciendo la formación de agregados o flóculos que posteriormente pueden separarse por sedimentación (El-Taweel et al., 2023).

El fundamento de la coagulación-floculación se relaciona con la química coloidal y la teoría de la doble capa eléctrica. Las partículas presentes en las aguas residuales textiles, como colorantes, surfactantes y compuestos orgánicos, suelen presentar cargas negativas que generan repulsión electrostática entre ellas, impidiendo su aglomeración y manteniendo la estabilidad del sistema coloidal (Goudjil et al., 2021). Al adicionar un coagulante, los iones o grupos cargados positivamente interactúan con la superficie de las partículas, reducen el potencial zeta y permiten que las fuerzas de atracción favorezcan su unión.

El proceso puede dividirse en tres etapas principales: agitación rápida, agitación lenta y sedimentación. Durante la agitación rápida, el coagulante se dispersa homogéneamente en el agua mediante agitación intensa. En la agitación lenta, las partículas desestabilizadas colisionan y se agrupan para formar flóculos de mayor tamaño. Finalmente, durante la sedimentación, estos flóculos se depositan por acción de la gravedad. La eficiencia del proceso depende de variables como pH, dosis de coagulante, temperatura, concentración de contaminantes, velocidad de agitación y tiempo de floculación (Goudjil et al., 2021).

Los mecanismos que explican la coagulación incluyen la compresión de la doble capa eléctrica, la neutralización de carga, el barrido y el puenteo polimérico. La compresión de la doble capa disminuye la repulsión entre partículas; la neutralización de carga se produce por la interacción entre especies positivas del coagulante y partículas negativas; el barrido ocurre cuando precipitados formados durante el proceso arrastran impurezas al sedimentar; y el puenteo polimérico se presenta cuando cadenas poliméricas enlazan partículas individuales para formar flóculos estables (El-Taweel et al., 2023).

En el tratamiento de aguas residuales textiles, los coagulantes pueden reaccionar con colorantes orgánicos para formar complejos insolubles o precipitados, contribuyendo a la eliminación del color y de la materia orgánica. Por ello, la coagulación-floculación no solo actúa como un proceso de neutralización de cargas, sino también como un mecanismo de adsorción y precipitación química (Sonal y Mishra, 2021; Hussein, 2023).

Los coagulantes empleados en el tratamiento de aguas residuales pueden clasificarse en inorgánicos y orgánicos, así como en sintéticos y naturales. Los coagulantes inorgánicos sintéticos, como el sulfato de aluminio, sulfato ferroso y cloruro férrico son ampliamente utilizados por su disponibilidad, bajo costo y rápida eficacia. Estos compuestos liberan iones metálicos capaces de neutralizar cargas negativas y formar hidróxidos metálicos que favorecen la remoción de partículas por barrido. No obstante, su uso puede generar grandes volúmenes de lodos y residuos de baja biodegradabilidad (Goudjil et al., 2021).

En contraste, los coagulantes y floculantes naturales han adquirido relevancia debido a su biodegradabilidad, baja toxicidad y origen renovable. Estos materiales pueden provenir de fuentes vegetales, animales o microbianas, y actúan mediante neutralización de cargas, adsorción o puenteo polimérico, dependiendo de su composición química. Entre los biofloculantes más estudiados se encuentran materiales derivados de *Opuntia ficus-indica*, *Cicer arietinum*, okra, café y *Moringa oleífera* (Badawi et al., 2023; Abujazar et al., 2022).

La *Moringa oleífera* se ha estudiado ampliamente como coagulante natural debido a la composición de sus semillas. Estas contienen aceite y proteínas solubles, entre las cuales se encuentran proteínas catiónicas de bajo peso molecular capaces de actuar como agentes coagulantes. Dichas proteínas poseen grupos amino cargados positivamente que neutralizan las cargas negativas de partículas coloidales y colorantes aniónicos, favoreciendo la formación de flóculos sedimentables (Muñoz Leyva et al., 2023).

El mecanismo de acción de la *Moringa oleífera* se basa principalmente en la neutralización de cargas, el puenteo polimérico y la adsorción superficial. La neutralización se produce por la interacción de las proteínas catiónicas con contaminantes cargados negativamente; el puenteo polimérico ocurre cuando las cadenas proteicas enlazan partículas adyacentes; y la adsorción superficial se relaciona con la interacción de grupos funcionales, como $–NH_2$ y –OH, con moléculas orgánicas disueltas (Rasheed et al., 2023). Estas características permiten que la moringa sea considerada una alternativa viable para la remoción de turbidez, color y materia orgánica en aguas residuales textiles. El uso de *Moringa oleífera* presenta ventajas frente a los coagulantes convencionales, ya que es biodegradable, de baja toxicidad y puede generar menor cantidad de lodos. Además, no altera significativamente el pH ni la alcalinidad del agua tratada, lo que reduce la necesidad de ajustes químicos posteriores. Su disponibilidad en regiones cálidas y su bajo costo la convierten en una opción adecuada para aplicaciones locales o descentralizadas (Muñoz Leyva et al., 2023; Abujazar et al., 2022).

Para evaluar experimentalmente la eficiencia de la coagulación-floculación se emplea la prueba de jarras, la cual permite simular a escala de laboratorio el comportamiento del proceso en condiciones controladas. Este ensayo consiste en someter muestras de agua residual a diferentes dosis de coagulante, aplicando etapas de mezcla rápida, mezcla lenta y sedimentación. A partir de los resultados obtenidos, se determina la dosis óptima y se evalúan parámetros como color, turbidez, DQO, pH y conductividad (El-Taweel et al., 2023).

En aguas residuales textiles, la prueba de jarras resulta especialmente útil para comparar el desempeño de coagulantes naturales frente a coagulantes químicos tradicionales. Diversos estudios han demostrado que materiales como *Moringa oleífera* pueden alcanzar eficiencias de remoción de turbidez superiores al 90 % bajo condiciones óptimas de pH y agitación, con resultados comparables a los obtenidos mediante sulfato de aluminio (Rasheed et al., 2023). Asimismo, se ha reportado la efectividad de extractos vegetales como okra y *Colocasia antiquorum* en la remoción de colorantes presentes en aguas industriales (Hussein, 2023; Shende y Chidambaram, 2023).

En el caso de los efluentes asociados al lavado o teñido de mezclilla, los colorantes índigo, azul/negro y otros colorantes sintéticos representan una fuente importante de contaminación. Estos compuestos presentan estructuras aromáticas conjugadas y grupos funcionales que les confieren estabilidad frente a la oxidación y foto-degradación, dificultando su eliminación por tratamientos convencionales (Sonal y Mishra, 2021). Cuando son vertidos en cuerpos de agua, pueden reducir la penetración lumínica, afectar la fotosíntesis, alterar la cadena alimenticia acuática, incrementar la DQO y generar toxicidad para organismos acuáticos.

La eficiencia de la coagulación-floculación de colorantes textiles depende de factores como el pH, la dosis del coagulante, la velocidad de agitación, el tiempo de mezcla, la temperatura y la concentración del colorante. En particular, una dosis insuficiente puede provocar una desestabilización incompleta, mientras que una dosis excesiva puede generar reestabilización coloidal por inversión de carga (El-Taweel et al., 2023). En el caso de la *Moringa oleífera*, se ha reportado un rango óptimo de pH entre 6 y 8, lo que favorece su aplicación en efluentes textiles sin requerir ajustes drásticos del medio (Rasheed et al., 2023).

PARTE EXPERIMENTAL

Para el desarrollo de este proyecto se realizó a partir de muestras de agua residual textil recolectadas en el cárcamo de una empresa dedicada al lavado de mezclilla, ubicada en Almoloya del Río, Estado de México. La toma de muestras se realizó considerando lo establecido en la NMX-AA-003-1980, referente al muestreo de aguas residuales provenientes de canales y colectores.

Para la caracterización del efluente y postratamiento se analizaron parámetros fisicoquímicos seleccionados con base en la NOM-001-SEMARNAT-2021, como temperatura, pH, sólidos suspendidos, demanda química de oxígeno, carbono orgánico total y color verdadero. Adicionalmente, se determinaron turbidez, cloruros, conductividad y alcalinidad, con el propósito de obtener una caracterización más completa del agua residual. La DQO se evaluó mediante un método a microescala de Carbajal-Palacio 2014, el cual permitió reducir el consumo de reactivos, el volumen de muestra y la generación de residuos, manteniendo resultados comparables con el método convencional.

Como biocoagulante-floculante se empleó semillas de *Moringa oleífera* con cáscara. Las semillas fueron lavadas, posteriormente trituradas en una licuadora convencional y tamizadas a malla 40, correspondiente a un tamaño de partícula de 0.425 mm. Finalmente, el material fue secado en estufa a 60 °C durante 8 horas y utilizado para preparar las dosis aplicadas en las pruebas de coagulación-floculación.

Las pruebas de coagulación-floculación se realizaron mediante prueba de jarras, utilizando un agitador múltiple AM-4 de cuatro posiciones y volúmenes de 500 mL de muestra. El procedimiento consistió en una etapa de agitación rápida para dispersar el coagulante, seguida de una agitación lenta a 40 rpm durante 15 minutos para favorecer la formación de flóculos. Posteriormente, las muestras se dejaron sedimentar durante 2 horas y se tomó el sobrenadante para su análisis.

Para la evaluación y optimización del proceso se empleó la metodología de superficie de respuesta mediante diseños Box-Behnken. Se plantearon dos diseños experimentales independientes, cada

uno conformado por 15 corridas experimentales y tres factores. Se evaluaron como variables independientes la velocidad de agitación rápida, el tiempo de agitación rápida y la dosis de semilla de *Moringa oleífera*, considerando la turbidez como variable de respuesta.

Los resultados obtenidos fueron analizados mediante modelos cuadráticos ajustados al diseño Box-Behnken. Se aplicó análisis de varianza para determinar la significancia de los factores, sus interacciones y su efecto sobre las variables de respuesta. La calidad del ajuste se evaluó mediante coeficientes de determinación y análisis de residuos. Finalmente, las condiciones óptimas de operación se establecieron mediante criterios de minimización de turbidez, DQO y color verdadero, con el fin de identificar las condiciones más eficientes para el tratamiento del agua residual textil mediante coagulación-floculación con *Moringa oleífera*.

RESULTADOS

El efluente inicial (*Tabla 1*), presenta incumplimiento severo en parámetros clave. La DQO (1946.25 mg/L) excede ampliamente el límite permisible (150 mg/L) de la NOM-001.SEMARNAT-2021, evidenciando alta carga orgánica. El color verdadero también sobrepasa los valores normativos en las tres longitudes de onda evaluadas (27.6, 29.33 y 46.6 m^{-1} contra 7, 5 y 3 m^{-1}), indicando elevada presencia de colorantes. En contraste, el pH (6.37) y la temperatura (17.4 °C) se encuentran dentro de los rangos permitidos (6–9 y ≤35 °C, respectivamente).

Para el primer diseño experimental de las Pruebas de Jarras se utilizó la moringa secada 8h y se consideraron como variables independientes:

- Dosis de Moringa oleífera con cáscara (1.0-5.0 g/L)
- Velocidad de agitación rápida (120-170 rpm)
- Tiempo de agitación rápida (1-5 min)

La variable de respuesta fue la turbidez (NTU).

Para las pruebas de coagulación floculación se utilizó la turbidez como variable de respuesta para evaluar la eficiencia del tratamiento aplicado, se utilizó la matriz experimental de la *Tabla 1*

Tabla 1. Matriz experimental 1

Experimento	Dosis (g/L)	Velocidad de agitación rápida (rpm)	Tiempo de agitación rápida (min)	Turbidez (UNT)
1	1	120	3	16.6
2	5	120	3	62.8
3	1	170	3	10.1
4	5	170	3	86.1
5	1	145	1	21.6
6	5	145	1	89.1
7	1	145	5	16.7
8	5	145	5	88.1
9	3	120	1	37.5
10	3	170	1	25.3
11	3	120	5	31.5
12	3	170	5	22.6
13	3	145	3	27.4
14	3	145	3	28.3
15	3	145	3	26.5

Los resultados mostraron que hay una alta dependencia de la dosis de moringa. Se alcanzaron valores mínimos cercanos a 10 NTU, mientras que en condiciones de sobredosificación se observaron incrementos significativos en la turbidez.

El efluente tratado presentó una reducción de contaminantes. La DQO disminuyó a 258.75 mg/L (86.71%), aunque permanece por encima del límite de 150 mg/L, indicando incumplimiento en carga orgánica. El color verdadero se redujo a 3.7, 2.4 y 2.6 m^{-1} (436, 525 y 620 nm), cumpliendo con los límites de la norma, lo que evidencia una remoción eficiente de colorantes. El pH (6.2) y la temperatura (16.8 °C) se mantienen dentro de los rangos permisibles.

El tratamiento permite cumplimiento parcial de la norma, limitado por la DQO residual, por lo que se requiere una etapa adicional para alcanzar condiciones de descarga.

Tabla 2. Caracterización pre y postratamiento del efluente textil con M8

PARÁMETRO	INICIAL	POSTRATAMIENTO	EFICIENCIA %
DQO (mg/L)	1946.25	258.75	86.71
pH	6.37	6.2	
Temperatura (°C)	17.4	16.8	
Turbidez (NTU)	56.8	10.1	82.22
CONDUCTIVIDAD (µs/cm)	1718	1683	2.04
Color verdadero			
436 nm=7m-1	27.6	3.7	86.59
525 nm=5m-1	29.33	2.4	91.82
620 nm=3m-1	46.6	2.6	94.42
Cloruros (mg/L)	103.67	40.8	60.64
Carbono orgánico oxidable (mg/L)	244.28	162.86	33.33

El análisis estadístico (*Tabla 3)* indicó que la dosis de moringa (A) fue el factor dominante ($p < 0.05$), con un efecto altamente significativo en la reducción de turbidez, confirmando que la eficiencia del proceso está controlada por la acción coagulante de sus proteínas catiónicas. La velocidad (B, 120-170 rpm) y el tiempo de agitación rápida (C) no mostraron efectos significativos ($p > 0.05$), indicando que, en los rangos evaluados, no influyen en la remoción.

Tabla 3. Análisis de varianza del tratamiento de Coagulación-Floculación

FUENTE	SUMA DE CUADRADOS	GL	CUADRADO MEDIO	RAZÓN-F	VALOR-P
A: Dosis (g/L)	8521.65	1	8521.65	196.34	0
B: Velocidad de agitación rápida (rpm)	2.311	1	2.31	0.05	0.827
C: Tiempo de agitación rápida	26.645	1	26.65	0.61	0.469
AA	1563.07	1	1563.07	36.01	0.002
AB	222.01	1	222.01	5.12	0.073
AC	3.8025	1	3.80	0.09	0.779
BB	61.3131	1	61.31	1.41	0.288
BC	2.723	1	2.7225	0.06	0.812
CC	128.529	1	128.53	2.96	0.146
Error total	217.012	5	43.40		
Total	10761.3	14			

Parámetro	Valor
R-cuadrada	97.98%
R-cuadrada ajustada por g.l.	94.35%
PRESS	3449.92
Error estándar del est.	6.59
Error absoluto medio	3.20

El término cuadrático A² fue significativo, evidenciando una relación no lineal con comportamiento parabólico, típico de coagulación floculación: existe una dosis óptima, mientras que valores bajos o excesivos disminuyen la eficiencia.

En cuanto a la calidad del modelo, el R^2 = 97.98% indica una alta capacidad de ajuste a los datos experimentales. El R^2 ajustado = 94.35% confirma la robustez del modelo al considerar sus términos, adecuada para fines de optimización experimental.

La optimización del modelo de superficie de respuesta (*Figura 1*) permitió identificar las condiciones que minimizan la turbidez del efluente tratado. El valor óptimo predicho fue de 3.10 NTU, correspondiente a una dosis de moringa de 1.04 g/L, cercana al límite inferior del rango evaluado, en concordancia con el ANOVA ($p < 0.05$). La velocidad de agitación rápida óptima fue 170 rpm, en el límite superior del rango; aunque no resultó significativa. El tiempo óptimo fue 3.33 min, indicando que un periodo moderado es suficiente para la adecuada distribución del coagulante floculante.

Bajo estas condiciones, se confirma una turbidez mínima cercana a 3.10 NTU, evidenciando la eficiencia del coagulante natural. La alta capacidad explicativa del modelo (R^2 = 97.98%) respalda la confiabilidad de las condiciones óptimas determinadas.

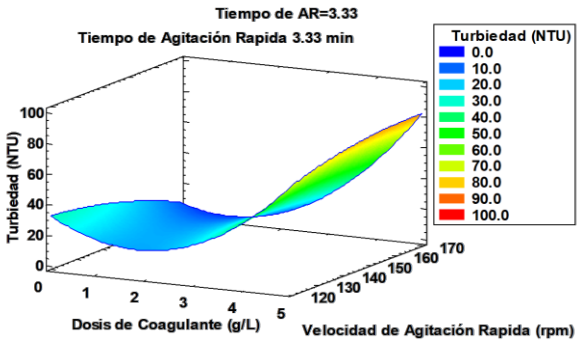


Figura 1. Gráfica de superficie de respuesta del tratamiento de Coagulación-Floculación

En general estos resultados indican que la velocidad de agitación rápida no fue un factor significativo, por lo que es necesario replantear el diseño experimental. Para ello, se propone otro Diseño Experimental sustituyendo la velocidad rápida por el pH, con el fin de evaluar la influencia de esta nueva variable en la eficiencia del proceso y mejorar la capacidad predictiva del modelo.

CONCLUSIONES

El uso de *Moringa oleífera* demostró ser eficaz como coagulante-floculante natural, logrando altas eficiencias en la remoción de turbidez (hasta 82%) y color (>86–94%), confirmando su viabilidad para el tratamiento preliminar de aguas residuales textiles. La dosis de moringa fue el factor más influyente en el proceso de coagulación-floculación en todos los diseños experimentales, presentando un

comportamiento cuadrático con una dosis óptima; dosis bajas o excesivas disminuyen la eficiencia debido a sobredosificación.

El modelo experimental confirmó que la dosis controla el proceso ($p < 0.05$), mientras que la velocidad y el tiempo de agitación no fueron significativos. Se logró una reducción importante de DQO (86.71%), aunque sin cumplir normativa.

En conjunto, los modelos estadísticos (Box–Behnken) mostraron buen ajuste ($R^2 > 80\%$), confirmando su utilidad para la optimización del proceso, aunque con menor capacidad predictiva en variables como DQO.

El tratamiento permitió el cumplimiento en parámetros como color y turbidez, pero no en la remoción de materia orgánica (DQO y carbono total), lo que indica que la coagulación-floculación con moringa debe complementarse con un tratamiento adicional.

AGRADECIMIENTOS

Al Proyecto TecNM 25820.26-P “Sistema híbrido sostenible para la remediación de efluentes textiles mediante el uso de moringa (coagulación-floculación) y zeolita férrica (POA)” por el financiamiento otorgado para el desarrollo de este trabajo. Rodríguez Pineda (CVU 1135677) agradece a la SECIHTI por la beca para estudios de posgrado.

BIBLIOGRAFÍA

1. El-Taweel, R. M., Mohamed, N., Alrefaeay, K. A., Husien, S., Abdel-Aziz, A. B., Salim, A. I., Mostafa, N. G., Said, L. A., Fahim, I. S., & Radwan, A. G. (2023). A review of coagulation explaining its definition, mechanism, coagulant types, and optimization models; RSM, and ANN. *Current Research in Green and Sustainable Chemistry, 6*(3), 1–9. https://doi.org/10.1016/j.crgsc.2023.100358
2. Muñoz Leyva, M. A., Vegas Tamayo, J. A., & Velásquez Marin, M. (2023). Use of *Moringa oleifera* as a natural coagulant for turbidity removal in surface waters in the last 10 years: A review of the scientific literature. *LACCEI, 1*(8), 1–23. https://doi.org/10.18687/LACCEI2023.1.1.575
3. Goudjil, S., Guergazi, S., Masmoudi, T., & Achour, S. (2021). Effect of reactional parameters on the elimination of Congo Red by the combination of coagulation–flocculation with aluminum sulfate. *Desalination and Water Treatment, 209*, 429–436. https://doi.org/10.5004/dwt.2021.26474
4. Badawi, A. K., Salama, R. S., & Mostafa, M. M. M. (2023). Natural-based coagulants/flocculants as sustainable market-valued products for industrial wastewater treatment: A review of recent developments. *RSC Advances, 13*(28), 19335–19355. https://doi.org/10.1039/D3RA01999C
5. Rasheed, F. A., Alkaradaghi, K., & Al-Ansari, N. (2023). The potential of *Moringa oleifera* seed in water coagulation-flocculation technique to reduce water turbidity. *Water, Air, & Soil Pollution, 234*, 250. https://doi.org/10.1007/s11270-023-06238-3
6. Abujazar, M. S. S., Karaağaç, S. U., Abu Amr, S. S., Alazaiza, M. Y., Fatihah, S., & Bashir, M. J. (2022). Recent advancements in plant-based natural coagulant application in the water and wastewater coagulation-flocculation process: Challenges and future perspectives. *Global Nest Journal, 24*, 685–705. https://doi.org/10.30955/gnj.004380
7. Sonal, S., & Mishra, B. K. (2021). Role of coagulation/flocculation technology for the treatment of dye wastewater: Trend and future aspects. In A. Singh, M. Agrawal, & S. B. Agrawal (Eds.), *Water pollution and management practices*. Springer.
8. Shende, A. P., & Chidambaram, R. (2023). Cocoyam powder extracted from *Colocasia antiquorum* as a novel plant-based bioflocculant for industrial wastewater treatment: Flocculation performance and mechanism. *Heliyon, 9*(4). https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2023.e15228

9. Hussein, T. K. (2023). Removal of Vat Green 3 dye from aqua solution using chemical coagulants and okra pods as natural coagulant by coagulation-flocculation process. *Pollution, 9*(4), 1638–1652. https://doi.org/10.22059/poll.2023.358029.1875
10. Correa Mahecha, F., Cuesta Parra, D., Sandoval, J. A., Mayorga, M. A., & Ortiz, S. A. (2021). Removal of cationic dyes utilizing natural coffee pulp coagulant. *Chemical Engineering Transactions, 87*, 487–492. https://doi.org/10.3303/CET2187082
11. NOM-001-SEMARNAT-2021. Secretaria de Medio Ambiente y Recursos Naturales. Que establece los limites permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales en cuerpos receptores propiedad de la nación.

EVALUACIÓN EXPERIMENTAL DE GEOPOLÍMEROS A BASE CASCARILLA DE ARROZ PARA ADSORCIÓN DE PLOMO Y COBRE EN AGUA

Paloma Eloísa Ramírez Zúñiga[1,2], Martín Oscar Armando Pacheco Álvarez[1,2], Emmanuel Mendoza Hernández[2], Jairo Francisco Juárez Vera[1],Ramón Antonio Zárraga Núñez[1], Araceli Jacobo Azuara[1]

[1]Universidad de Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Departamento de Química,
[2]Tecnológico Nacional de México / Instituto Tecnológico Superior de Guanajuato.
palomarazu@gmail.com

RESUMEN

El desarrollo de materiales adsorbentes sostenibles, a base de residuos agroindustriales, utilizados para el tratamiento de agua ha cobrado relevancia en los últimos años, particularmente mediante el uso de geopolímeros con capacidad de remoción de iones metálicos. Diversos estudios han señalado el potencial de estos materiales como alternativas eficientes frente a adsorbentes comerciales, destacando el interés creciente por su aplicación ambiental. En este contexto, la valorización de residuos agroindustriales representa una estrategia prometedora para reducir costos y promover la economía circular. La cascarilla de arroz es uno de los subproductos agrícolas más abundantes a nivel mundial; se estima que la producción anual de arroz genera grandes volúmenes de este residuo1, gran parte se desecha o se quema, ocasionando impactos ambientales, lo que ha impulsado su aprovechamiento como fuente renovable de sílice para la síntesis de materiales funcionales. En este trabajo se evaluó la obtención de dióxido de silicio (SiO_2) a partir de cascarilla de arroz mediante un tratamiento químico con ácido clorhídrico, seguido de calcinación a 800 °C durante 6 horas para eliminar la fracción orgánica residual y obtener sílice de alta pureza. La caracterización de la materia prima, del material tratado y del SiO_2 obtenido se realizó mediante espectroscopía infrarroja, confirmando la desaparición de bandas orgánicas. Con la sílice obtenida se sintetizaron geopolímeros por activación alcalina utilizando NaOH, silicato de sodio y metacaolín, con curado asistido por microondas y posterior lavado ácido para estabilizar la estructura. La capacidad adsorbente de los materiales se evaluó mediante experimentos por lote para las isotermas de adsorción empleando plomo II y cobre II como contaminantes modelo, a pH 4 y 25 °C. Las concentraciones iniciales y finales se determinaron por absorción atómica. Los resultados evidenciaron una capacidad máxima de 55 mg/g y una remoción promedio del 56 % para cobre II, mientras que para plomo II se obtuvo 66 mg/g y 90 % de remoción. Estos hallazgos demuestran que los geopolímeros derivados de cascarilla de arroz constituyen adsorbentes prometedores, sostenibles y económicamente viables para aplicaciones en el tratamiento de aguas contaminadas.

INTRODUCCIÓN

La contaminación de recursos hídricos por metales pesados constituye uno de los principales problemas ambientales a nivel mundial debido a la toxicidad, persistencia y capacidad de bioacumulación de estos contaminantes. Entre los metales más frecuentemente encontrados en efluentes industriales destacan el plomo (Pb^{2+}) y el cobre (Cu^{2+}), cuya presencia en concentraciones elevadas puede generar graves consecuencias sobre los ecosistemas acuáticos y la salud humana [1]. Por lo que existe una creciente necesidad de desarrollar tecnologías eficientes y sustentables para su remoción de aguas contaminadas.

La adsorción ha sido ampliamente reconocida como una de las tecnologías más prometedoras para el tratamiento de aguas residuales debido a su simplicidad operativa, alta eficiencia y bajo costo en comparación con otros métodos convencionales, como la precipitación química, el intercambio iónico y los procesos de membrana [1]. En los últimos años, la investigación se ha orientado hacia el desarrollo de adsorbentes obtenidos a partir de residuos agroindustriales, con el propósito de reducir costos de producción y promover estrategias alineadas con los principios de la economía circular.

Entre los residuos agroindustriales de mayor interés se encuentra la cascarilla de arroz, un subproducto generado en grandes cantidades por la industria arrocera. Se estima que aproximadamente el 20 % del peso del arroz corresponde a la cascarilla, generándose millones de toneladas anualmente a nivel mundial [2]. Tradicionalmente, este residuo ha sido eliminado mediante incineración o disposición en vertederos, ocasionando problemas ambientales asociados a emisiones atmosféricas y acumulación de residuos sólidos. Sin embargo, su elevado contenido de sílice ha despertado un creciente interés científico debido a su potencial como materia prima para la síntesis de materiales funcionales [2].

La sílice obtenida a partir de cascarilla de arroz puede emplearse en la producción de geopolímeros, materiales compuestos de aluminosilicatos sintetizados mediante activación alcalina que han demostrado excelentes propiedades estructurales y adsorbentes [3]. La elevada estabilidad química, resistencia mecánica y presencia de grupos funcionales activos convierten a los geopolímeros en candidatos atractivos para la remoción de contaminantes presentes en medios acuosos. Diversos estudios han reportado resultados favorables en la adsorción de metales pesados utilizando geopolímeros sintetizados a partir de residuos ricos en sílice, incluyendo cenizas de cascarilla de arroz [4,5]. En este contexto, el presente trabajo evalúa la obtención de dióxido de silicio (SiO_2) a partir de cascarilla de arroz mediante tratamiento químico y térmico, así como su posterior utilización en la síntesis de geopolímeros para la remoción de Pb^{2+} y Cu^{2+} en solución acuosa. Esta estrategia integra la valorización de residuos agroindustriales con el desarrollo de materiales adsorbentes sostenibles para aplicaciones ambientales.

TEORÍA

La adsorción es un fenómeno superficial mediante el cual moléculas o iones presentes en una fase líquida o gaseosa se acumulan sobre la superficie de un sólido. En el tratamiento de aguas, este proceso permite la retención de contaminantes mediante mecanismos físicos y químicos, tales como fuerzas electrostáticas, intercambio iónico y formación de enlaces químicos específicos [1]. La eficiencia del proceso depende de características intrínsecas del adsorbente, como área superficial, volumen de poro, distribución de tamaños de poro y naturaleza química de los grupos funcionales presentes en su superficie.

La búsqueda de adsorbentes de bajo costo ha impulsado el aprovechamiento de residuos agrícolas y agroindustriales como materias primas alternativas a los carbones activados comerciales. Estos materiales presentan ventajas asociadas a su disponibilidad, bajo costo y contribución a la reducción de impactos ambientales derivados de su disposición final [1].

Los geopolímeros son materiales inorgánicos obtenidos mediante la activación alcalina de precursores ricos en sílice y alúmina. Durante el proceso de geopolimerización, los reactivos se disuelven en un medio altamente alcalino y posteriormente se reorganizan para formar una estructura tridimensional constituida por enlaces Si–O–Al [3]. La estructura resultante presenta una elevada estabilidad química y una red porosa que favorece los procesos de adsorción e intercambio iónico. Adicionalmente, la presencia de cargas negativas en su estructura permite la interacción con cationes metálicos presentes en solución, facilitando la remoción de contaminantes como Pb^{2+}, Cu^{2+}, Cd^{2+} y Zn^{2+} [3]. Investigaciones recientes han demostrado que los geopolímeros pueden alcanzar altas capacidades de adsorción, posicionándolos como una alternativa sostenible frente a adsorbentes convencionales [4].

La cascarilla de arroz es considerada uno de los residuos agrícolas más abundantes a nivel mundial. Su composición química incluye celulosa, hemicelulosa, lignina y una importante proporción de sílice, que puede alcanzar hasta un 25 % de su peso seco [2]. Debido a este elevado contenido mineral, la cascarilla constituye una fuente renovable y económicamente viable para la producción de sílice de alta pureza. La obtención de sílice generalmente implica tratamientos químicos con ácido para eliminar impurezas metálicas, seguidos de procesos de calcinación controlada que permiten eliminar la materia orgánica residual y favorecer la formación de sílice amorfa. Este material presenta alta

reactividad y puede emplearse como precursor en la síntesis de geopolímeros, adsorbentes, catalizadores y materiales compuestos [2].

La incorporación de sílice proveniente de cascarilla de arroz en la síntesis de geopolímeros representa una estrategia de valorización de residuos alineada con los principios de sustentabilidad y economía circular. Diversos estudios han reportado que los geopolímeros obtenidos a partir de ceniza o sílice derivada de cascarilla de arroz presentan una estructura altamente porosa y una distribución adecuada de sitios activos para la adsorción de contaminantes [4], [5].

Asimismo, se ha observado que estos materiales pueden remover eficientemente iones metálicos presentes en soluciones acuosas mediante mecanismos combinados de adsorción superficial, intercambio iónico y precipitación intracristalina [3], [4]. Estas características convierten a los geopolímeros basados en cascarilla de arroz en materiales prometedores para el tratamiento sostenible de aguas contaminadas, al tiempo que contribuyen al aprovechamiento integral de residuos agroindustriales.

PARTE EXPERIMENTAL

La cascarilla de arroz se sometió a tratamiento químico con ácido clorhídrico 0.1 molar para eliminar impurezas, se utilizó una mezcla al 30% en masa y se sometió a reflujo durante 4 horas, al final se filtró, lavó con agua destilada y se secó a 90 °C. Para la obtención de la sílice, la cascarilla de arroz se sometió a tratamiento térmico en una mufla a 800°C durante 8 horas para retirar la fracción orgánica. La sílice obtenida se utilizó como reactivo en la síntesis de los geopolímeros. Para estos se hizo la activación alcalina con hidróxido de sodio 8 molar junto con el metacaolín durante 1.5 horas, la mezcla se vertió en moldes de silicón para el proceso de fraguado en un horno de microondas convencional durante un minuto y obtener cubos de 1 centímetro de lado, estos se lavaron con solución de ácido clorhídrico hasta pH 5 (Figura 1).



Figura 1: Síntesis de los geopolímeros a base de cascarilla de arroz.

Para la obtención de las isotermas de adsorción se probaron las concentraciones de 5,10.20,50 y 100 ppm de soluciones estándar de plomo II y cobre II, a un volumen de 40 mL y 0.5 g del adsorbente, durante 7 días se controló la temperatura a 25°C y el pH 4 ($Pb^{2+)}$ y 5 (Cu^{2+}). Se midió la concentración inicial y final de los iones metálicos por medio de espectroscopia de absorción atómica para obtener el porcentaje de remoción y la capacidad de adsorción del adsorbente (Figura 2).

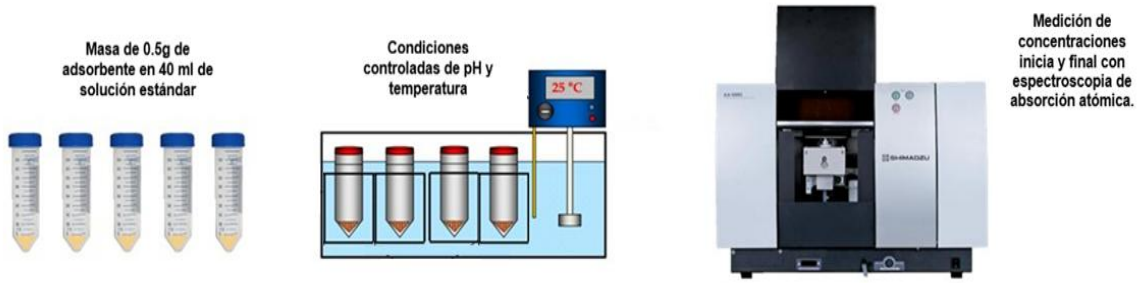


Figura 2: Experimentos por lote para la obtención de las isotermas de adsorción.

RESULTADOS

En la obtención de la sílice a partir de la cascarilla de arroz se obtuvo una eficiencia del 23 %, se caracterizó por medio de FTIR la cascarilla pura, después del tratamiento químico y después del tratamiento térmico. Los espectros FTIR muestran cambios estructurales significativos asociados a los tratamientos aplicados a la cascarilla de arroz. La cascarilla pura sin tratamiento (a) presenta bandas características de materiales lignocelulósicos, incluyendo señales en ~3400 cm^{-1} y ~2900 cm^{-1} atribuidas a grupos hidroxilo y enlaces C–H, respectivamente. Tras el tratamiento ácido (b), se observa una disminución en la intensidad de estas bandas, lo que indica la eliminación parcial de materia orgánica y de impurezas minerales. La banda en la región de 1000–1100 cm^{-1} se vuelve más definida, evidenciando un enriquecimiento en la fracción de sílice. En la muestra calcinada a 800 °C (c), desaparecen completamente las señales asociadas a compuestos orgánicos, mientras que se intensifica la banda correspondiente a enlaces Si–O–Si, confirmando la formación de sílice amorfa (figura 3). Estos resultados demuestran que el tratamiento químico seguido de calcinación permite obtener un material rico en sílice para utilizarlo en la síntesis de geopolímeros y procesos de adsorción.

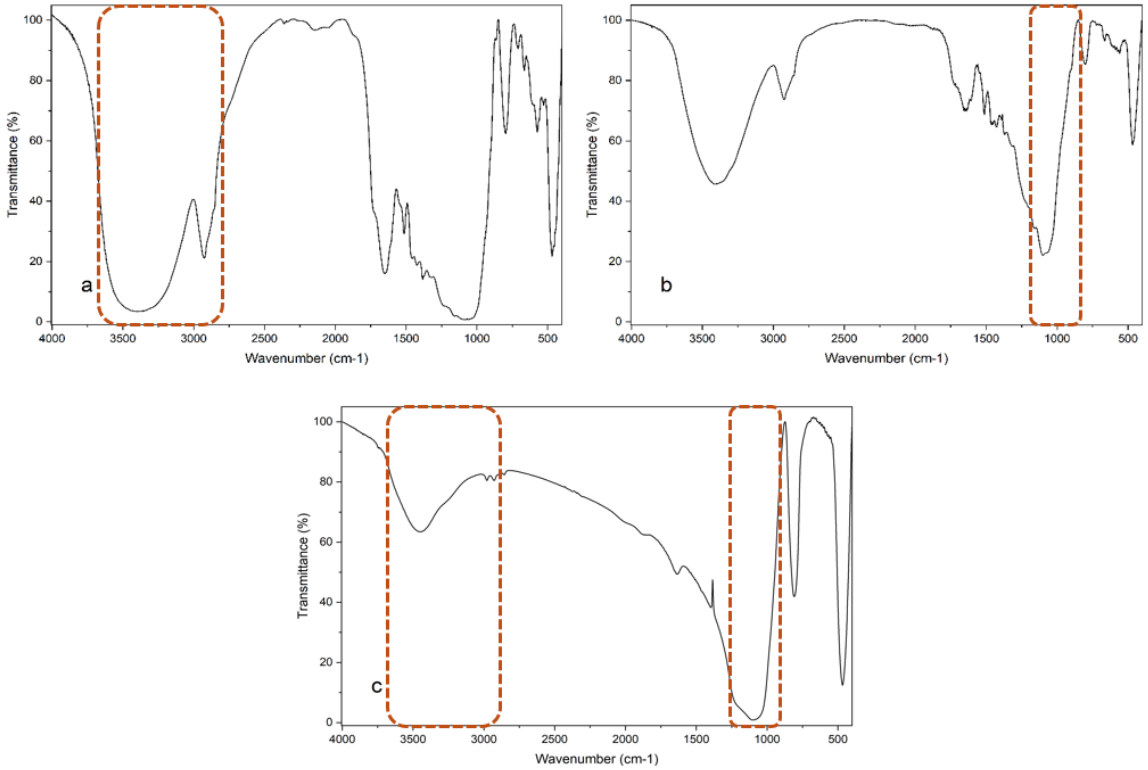


Figura 3: Análisis FTIR de (a)cascarilla sin tratamiento, (b) cascarilla con tratamiento químico con HCl y (c)cascarilla con tratamiento químico y térmico.

En la figura 4 se muestran las isotermas de adsorción con diferencias significativas entre el comportamiento de Pb^{2+} y Cu^{2+}. El Pb^{2+} presenta un incremento rápido en la capacidad de adsorción a bajas concentraciones, alcanzando valores cercanos a 66 mg/g, lo que indica una alta afinidad del geopolímero por este ion y un posible mecanismo de adsorción en monocapa, característico del modelo de Langmuir.

Por otro lado, el Cu^{2+} presenta un incremento más gradual, alcanzando aproximadamente 55 mg/g a concentraciones más elevadas, lo que sugiere un proceso de adsorción sobre una superficie heterogénea, compatible con el modelo de Freundlich.

Estos resultados sugieren que el geopolímero presenta una mayor afinidad inicial hacia Pb^{2+}, mientras que el Cu^{2+} muestra una adsorción progresiva dependiente de la concentración, lo cual puede atribuirse a diferencias en los mecanismos de interacción entre los iones metálicos y los grupos funcionales del material.

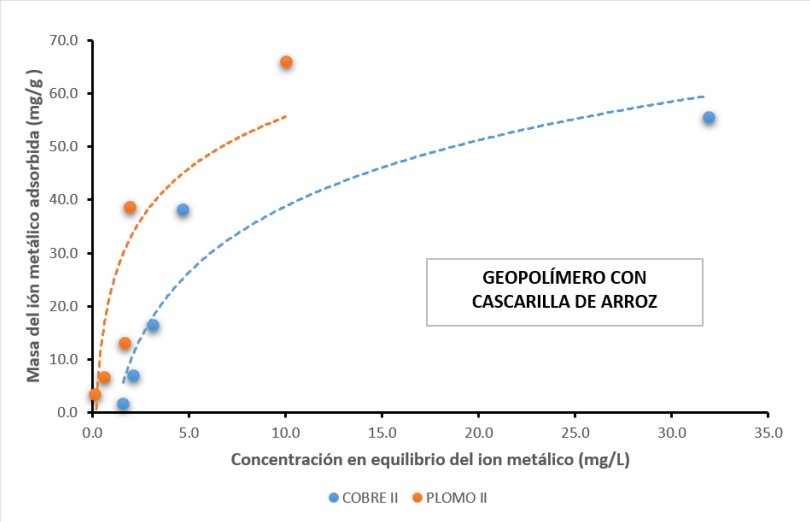


Figura 4: Isotermas de adsorción de los geopolímeros a base de cascarilla de arroz de los iones plomo II y cobre II.

CONCLUSIONES

Se desarrolló una metodología confiable y reproducible para la síntesis de geopolímeros a partir de cascarilla de arroz mediante activación alcalina. Los materiales obtenidos presentan grupos funcionales superficiales como Si–OH, Al–OH y Fe–OH, los cuales favorecen la generación de cargas negativas y, por ende, la interacción con especies catiónicas en solución. La capacidad adsorbente del material se atribuye principalmente a mecanismos de interacción electrostática, intercambio iónico y complejación superficial, más que a interacciones débiles tipo Van der Waals. Los estudios de equilibrio mostraron que la adsorción de Cu^{2+} se ajusta al modelo de Freundlich, lo que sugiere una superficie heterogénea, mientras que el Pb^{2+} sigue el modelo de Langmuir, indicando la formación de una monocapa sobre sitios activos homogéneos. El Pb^{2+} presentó una mayor afinidad inicial y capacidad de adsorción en comparación con el Cu^{2+}, lo que muestra diferencias en los mecanismos de interacción entre los iones metálicos y la matriz del geopolímero. Estos resultados demuestran que los geopolímeros derivados de cascarilla de arroz constituyen materiales adsorbentes prometedores, sustentables y económicamente viables para su aplicación en el tratamiento de aguas contaminadas.

BIBLIOGRAFÍA

1. H. E. Reynel-Avila, D. I. Mendoza-Castillo, V. Hernández-Montoya y A. Bonilla-Petriciolet, “Multicomponent removal of heavy metals from aqueous solution using low-cost sorbents”, Nova Science Publisher, New York, 2011, pp. 69-99.
2. H. K. Okoro, S. M. Alao, S. Pandey, I. Jimoh, K. A. Basheeru, Z. Caliphs y J. C. Ngila, “Recent potential application of rice husk as an eco-friendly adsorbent for removal of heavy metals”, Appl. Water Sci., Vol. 12, 2022, Art. 259.
3. M. Alhajri et al., “Geopolymer-based stabilization of heavy metals: The role of chemical agents in encapsulation and adsorption”, Polymers, Vol. 17, 5, 2025, Art. 670.
4. Y. Ge et al., “Ternary geopolymer synthesized using rice husk ash-based water glass for removing Cu^{2+} and Cr^{3+} from wastewater”, Mater. Lett., Vol. 367, 2024, Art. 136556.
5. F. J. López, S. Sugita y T. Kobayashi, “Cesium-adsorbent geopolymer foams based on silica from rice husk and metakaolin”, Chem. Lett., Vol. 43, 1, 2014, pp. 128-130.

EVALUACIÓN DE LA TOXICIDAD DE EFLUENTES TEXTILES TRATADOS MEDIANTE PROCESOS GALVÁNICOS DE OXIDACIÓN AVANZADA A TRAVÉS DE BIOENSAYOS CON *Allium Fistulosum*

V. Lugo-Lugo, M. Varon Rodea, A. -L. Sabine Bussy-Beaurain, H. García-Arellano

Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Lerma.
v.lugo@correo.ler.uam.mx, violelugol@gmail.com

RESUMEN

La industria textil es una de las más contaminantes en el mundo, debido a que produce grandes cantidades de aguas residuales y utiliza colorantes tóxicos que dañan ecosistemas acuáticos y suelo. Actualmente se han desarrollado tratamientos eficientes y económicos que no utilizan energía externa (Galvano-Fenton) que además utilizan electrodos sencillos, hierro como ánodo y cobre o grafito cómo cátodo y presentan eficiencias mayores al 99% con baja producción de lodos. Sin embargo, el reto es obtener efluentes no tóxicos para su disposición o reúso. Así, el objetivo de este trabajo fue tratar un efluente textil contaminado con colorantes indigoides usando un sistema Galvano Fenton heterogéneo, caracterizarlo fisicoquímicamente y realizar bioensayos con *Allium fistulosum* para determinar su toxicidad. Para este trabajo se propusieron 2 etapas: en la primera, 1 L de efluente textil contaminado con colorantes indigoides (pH 2.8), se trató con un sistema Galvano Fenton Heterogéneo (Fe/Residuos Grafíticos), con 2 ánodos tipo electro-deflectores y 2 g de partículas de RG. El efluente se caracterizó por concentración de colorante, SST, DQO, nitratos, color verdadero, conductividad, pH y hierro total. En la segunda etapa se propuso un bioensayo utilizando *Allium fistulosum* empleando varias diluciones del efluente tratado y analizando estadísticamente el crecimiento de la raíz (crecimiento y número de raíces). La degradación del 99% del colorante presente en solución acuosa se llevó a cabo en 35 min, con velocidad de 0.978 s^{-1} (primer orden, R_2= 0.9881) y no se observaron lodos residuales. Los resultados de la caracterización fisicoquímica del efluente mostraron que los parámetros (SST=5 mg/L, DQO=75.5 mg/L, Nitratos=65 mg/L, Conductividad=329 µS/cm^2) se encuentran debajo de los límites máximos permisibles de la NOM-001-SEMARNAT-2021 a excepción del color verdadero a 620 nm (3.10 m^{-1}) y el valor del pH (2.8). A partir de los bioensayos se observó que la metodología propuesta tuvo buena correlación en crecimiento y numero de raíces antes (R^2=0.9689) y después (R^2=0.942) de los bioensayos. Sin embargo, los resultados mostraron un marcado crecimiento de raíces en contacto con las diluciones del efluente tratado (20-80 %), ello debido a la presencia de amonio como subproducto de la oxidación de los colorantes presentes. Por otra parte, pudo observarse estrés fisiológico (raíces cafés) en las raíces expuestas al efluente sin dilución.

Por lo anterior se puede concluir que el tratamiento de efluentes textiles por procesos galvánicos de oxidación avanzada es eficiente y no requiere periodos extensos de tiempo, asimismo la caracterización del efluente muestra que se cumple con parámetros clave para su disposición en cuerpos de agua o reúso en riego, siempre y cuando sea ajustado el pH del efluente. En cuanto a los bioensayos se observa que las diferencias de número y longitud de raíz, indicadores clásicos, no son adecuados, ya que las raíces crecen al entrar en contacto con los efluentes tratados. Sin embargo, se observó daño en los tejidos de las raíces de manera proporcional a las diluciones del efluente, lo que permitiría cuantificar la influencia del efluente y de sus diluciones en la toxicidad sobre las cebollas.

INTRODUCCIÓN

La industria textil es una de las industrias que más contamina el medio ambiente y esto se debe principalmente al proceso de tintura o teñido de las telas, en el cual se utilizan grandes cantidades de agua y colorantes orgánicos, los cuales son difícilmente biodegradables (Khan et al., 2014)

Cabe destacar que la industria textil hace uso de más de 10,000 diferentes colorantes que contaminan el agua, sin embargo, uno de los más utilizados es el colorante índigo carmín, el cual es ampliamente utilizado en el teñido de la mezclilla, y al año se producen más de 140 millones de toneladas de agua contaminada con esta molécula (Chowdhury et al.,2020). El colorante índigo carmín (IC) o también conocido como azul ácido 74, es un pigmento de origen vegetal, el cual forma parte de los principales colorantes de tinta para teñido de fibras poliéster y vaqueros, compuesto por indigotina y una serie de compuestos minoritarios entre ellos indirubina, flavonoides, sales inorgánicas, entre otros (Castañeda, 2019). Su descarga en cuerpos de agua provoca alteraciones fisicoquímicas significativas, como la reducción de la penetración de la luz y del oxígeno disuelto, afectando los procesos fotosintéticos y la biodiversidad acuática. Además, estos efluentes presentan efectos citotóxicos, fitotóxicos, genotóxicos y mutagénicos sobre diversos organismos. Inclusive, la degradación incompleta de los colorantes puede generar compuestos aún más tóxicos y potencialmente cancerígenos, favoreciendo su persistencia ambiental, bioacumulación y transferencia a la cadena alimentaria (Kallawar et al., 2024).

Actualmente se han desarrollado tratamientos galvánicos eficientes y económicos que no utilizan energía externa y que están basados en la reacción Fenton, denominados Galvanic-Fenton, que además utilizan electrodos sencillos, hierro como ánodo y cobre o grafito cómo cátodo y presentan eficiencias mayores al 99% con baja producción de lodos (Castillo-Suárez et al., 2019). Para incrementar la eficiencia de estos sistemas en esta investigación se proponen varias rutas 1) utilizar partículas de grafito cómo cátodo heterogéneo, 2) proponer ánodos tipo electro deflectores y 3) mejorar la dispersión de las partículas catódicas utilizando agitación con paletas inclinadas evaluando la velocidad de agitación.

De esta manera, se espera obtener efluentes no tóxicos para su disposición o reúso. Sin embargo, es importante evaluar si los productos de degradación son inocuos, y para ello se buscó establecer bioensayos eficientes para determinar la toxicidad de los efluentes obtenidos con este tipo de tratamientos galvánicos

El uso de *Allium cepa* (la cebolla común) para medir la toxicidad del agua ofrece múltiples ventajas, consolidándose como uno de los métodos más eficientes y reconocidos en el monitoreo ambiental y la toxicología. Sus ventajas incluyen: 1) Ventajas Genéticas y Biológicas (perfil cromosómico ideal, sensibilidad, similitud con mamíferos), 2) Eficiencia y practicidad (Bajo costo y rapidez, Alternativa a pruebas con animales y finalmente, 3) Capacidad de Medición Multidimensional, evaluando capacidades macroscópicas y microscópicas (inhibición del crecimiento de las raíces y capacidad de determinar aberraciones cromosómicas) (Samuel et al., 2010). Así, el objetivo de este trabajo fue tratar un efluente textil contaminado con colorantes indigoides usando un sistema galvánico denominado Galvano Fenton Heterogéneo (GFH), caracterizar el efluente fisicoquímicamente y realizar bioensayos con *Allium fistulosum* para determinar su toxicidad.

PARTE EXPERIMENTAL

Para este trabajo se propusieron 3 etapas (Figura 1): la primera etapa constó de dos propuestas de tratamiento de agua contaminada con colorantes indigoides sintéticos (colorante Indigo carmín) y agua textil azul real (lavanderías de mezclilla), con un sistema Galvanic Fenton Heterogéneo (GFH) (Etapa 1A), a un pH de trabajo de 2.8. El sistema cuenta con 2 ánodos de hierro tipo electro-deflectores (4.5 cm^2) y 2 g de partículas de residuos grafíticos (RG) y agitación con paletas a diferentes velocidades (200,300 y 400 rpm). Adicionalmente para la primera etapa también se propuso el tratamiento por coagulación-floculación (Etapa 1B) del agua textil azul real empleando dos dosis de cloruro de hierro (5 y 20 mg/L) e hidróxido de sodio para neutralizar la acidez y empleando la metodología de prueba de jarras. Los efluentes se caracterizaron por concentración de colorante utilizando un espectrofotómetro UV-Vis marca Thermo scientific, modelo multiskan Go (610 y 662 nm). También se determinó la concentración final de sólidos suspendidos totales (NMX-AA-034-SCFI-2015), demanda química de oxígeno (DQO) (Hach 8000), nitratos (Doane y Horwath, 2003), color verdadero (NMX-AA-017-SCFI-2021), pH (NMX-AA-008-SCFI-2016), temperatura y hierro total (ISO 6685-1982 (E)).

En la segunda etapa de este trabajo se propuso un bioensayo para evaluar la toxicidad de los efluentes tratados utilizando *Allium fistulosum* (cebolla cambray) a diferentes diluciones (0, 20, 40, 60 y 80 %) y analizando estadísticamente el crecimiento de la raíz (crecimiento y el número de raíces) (Shashank y Suresh, 2013). Los bioensayos se llevaron a cabo por 72 horas en completa oscuridad y humedad y temperatura controladas (T= 21°C) (Parvan et al., 2020). Finalmente se calculó la concentración que produce el 50% de inhibición (CI_{50}/CE_{50}) para cada punto final evaluado. Con estos valores se construyó una gráfica de concentración en función del porcentaje de inhibición y se calculó la CI_{50} mediante el método Probit.



Figura 1. Metodología general

RESULTADOS

Etapa 1A. Tratamiento de agua contaminada con colorantes por oxidación avanzada

Se realizó el tratamiento para el agua preparada con índigo carmín mediante el reactor galvanic Fenton heterogéneo (Fe/RG), a velocidades de agitación fijas de 200 rpm, 300 rpm y 400 rpm (Figura 2). Posteriormente, se obtuvieron las cinéticas de oxidación del índigo carmín en duplicado, tomando alícuotas de la solución tratada cada cinco minutos y analizando las muestras por UV-Vis. Los puntos representan los datos experimentales, y las líneas el ajuste no lineal (*Statística* ®) para una cinética de primer orden. Como puede observarse en la tabla 1, la mayor velocidad de remoción de IC se obtuvo a 200 rpm de agitación con paletas (K_1=0.978 s^{-1}), con un % de remoción del IC de 96.5% al cabo de 35 minutos (R^2= 0.9881), por lo que se mantuvieron estas condiciones de tratamiento para obtener un agua tratada que pueda someterse a bioensayos.

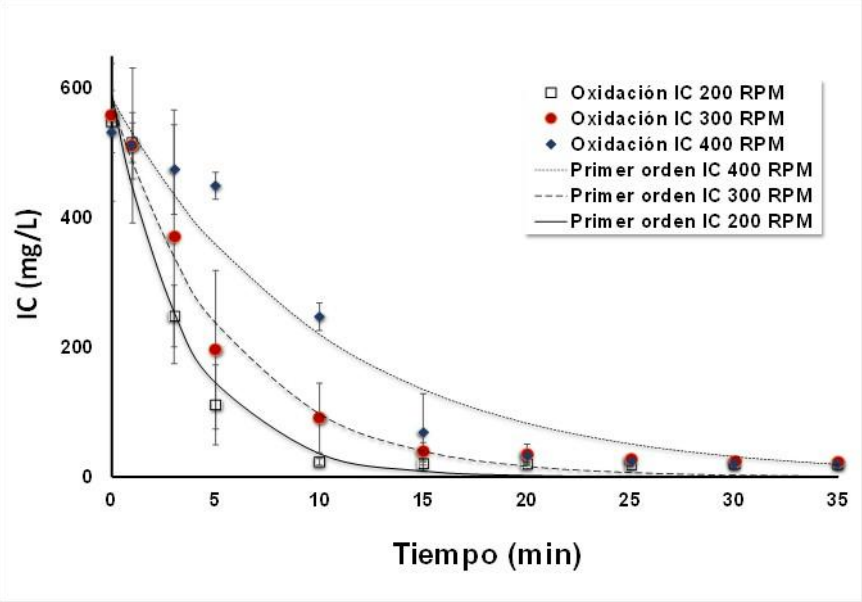


Figura 2. Oxidación del índigo carmín con un sistema GFH (Fe/RG) a diferentes velocidades de agitación

Tabla 1. Constantes de velocidad de remoción de IC utilizando u proceso GFH agitado con paletas

Velocidad de agitación (rpm)	K (1/s)	% degradación	Tiempo (min)	R^2
200	0.978	96.5	35	0.9881
300	0.179	99.9		0.9933
400	0.200	96.4		0.9772

La figura 3 muestra la cinética de oxidación de agua textil azul real, proveniente de lavanderías de pantalones de mezclilla, utilizando el mismo sistema de oxidación avanzada (GFH), propuesto para agua sintética y a las mejores condiciones de operación (pH 2.8 y agitación con paletas a 300 rpm). La cinética muestra que la oxidación del colorante a 662 nm se llevó a cabo de manera más lenta en comparación con el colorante IC, obteniendo un porcentaje de oxidación del 77.5 % a un tiempo de 120 minutos con una constante de velocidad de oxidación de primer orden de k_1=0.0118 (R^2=0.9935), mucho menor que el sistema con colorante sintético. Lo anterior debido probablemente a que el colorante presente en el agua real es de diferente naturaleza y a la formación de coágulos y fibras de tela, presentes en la muestra (observadas de manera macroscópica). Asimismo, la presencia de otros contaminantes derivados de jabones, suavizantes y acondicionadores utilizados en el acondicionamiento de la tela podría incrementar el contenido de materia orgánica oxidable en el efluente textil real (DQO=396.6-1002.88 mg/L).

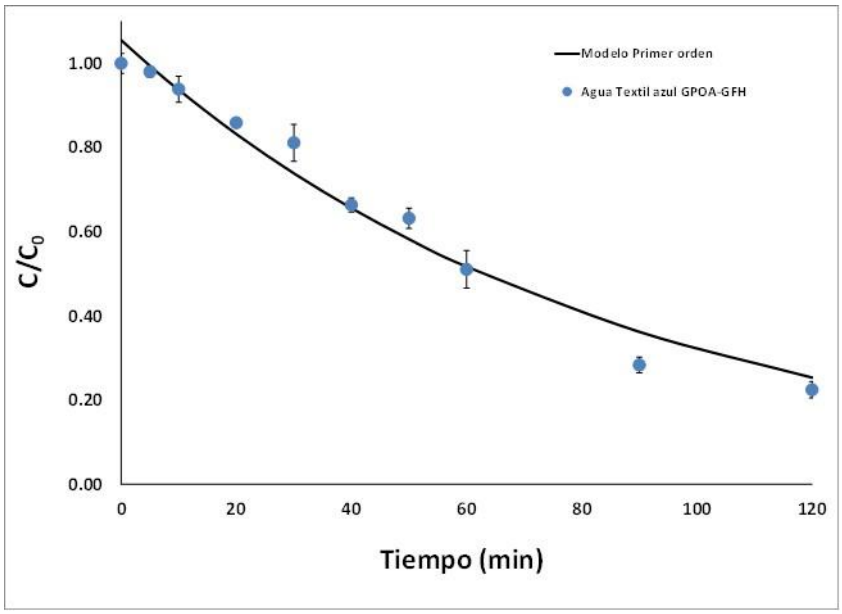


Figura 3. Oxidación de agua textil real con un sistema GFH (Fe/RG), pH 2.8 y agitación con paletas a 300 rpm.

Etapa 1B. Tratamiento de Agua contaminada con colorantes por Coagulación floculación

Como tratamiento alternativo para eliminar la presencia de colorante textil, coágulos de este y fibras de la tela dispersas en el agua (Figura 4a), se propuso un sistema de coagulación-floculación clásico, utilizando hierro como coagulante, los resultados mostraron buena remoción del colorante, coágulos y fibras presentes en la muestra original, a un pH de 11 y dosis de 5 y 20 mg/L de $FeCl_3$, como se muestra en la figura 4.

a) **b)**



Figura 4 a) Agua textil real y b) agua textil real tratada con $FeCl_3$, dosis de 5 y 20 mg/L

Ambas muestras de colorantes textiles (IC y agua textil cruda presentan una absorbancia elevada en toda la región visible (400–800 nm) (Figura 5), con un máximo amplio alrededor de 660-680 nm, característico de colorantes azules textiles. Esto indica una alta concentración de cromóforos responsables del color. Las muestras de agua textil tratadas por coagulación-floculación muestran una disminución importante de la absorbancia en toda la región visible, obteniendo porcentajes de remoción de 75.4% y 82.1 % para las dosis de 5 y 20 mg/L de $FeCl_3$, respectivamente. Sin embargo, todavía existe una señal residual cercana a 650-700 nm, sugiriendo que parte del colorante permanece en solución.

a) b)

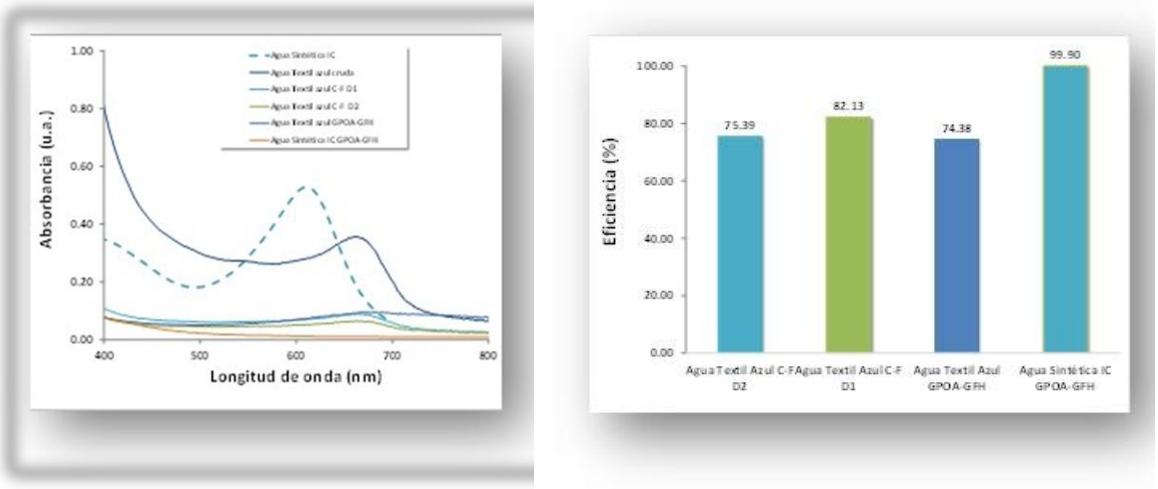


Figura 5 a) espectros UV-Vis y b) Eficiencia de remoción de agua sintética (IC) y textil cruda tratada por coagulación floculación y sistema GFH

Por otra parte, el tratamiento del agua textil azul mediante el sistema galvánico de oxidación avanzada (GPOA) GFH (Figura 5a) presentó una absorbancia muy baja en todo el intervalo espectral de 400 a 800 nm. Este resultado sugiere que el colorante no solo fue removido, sino que además se produjo la destrucción parcial de los grupos cromóforos responsables de la coloración. Por su parte, el tratamiento por oxidación avanzada aplicado al agua sintética que contenía colorante índigo carmín mostró una absorbancia prácticamente coincidente con la línea base, lo que indica una eliminación casi completa del colorante en una matriz sintética de menor complejidad.

Los porcentajes de remoción del colorante presentes en el agua textil azul alcanzaron una eficiencia del 74.4 % mediante el sistema de oxidación avanzada propuesto (GFH), mientras que en el agua sintética se obtuvo una eficiencia cercana al 99.9 %. Esta diferencia puede atribuirse a que el agua textil real contiene compuestos adicionales, tales como sales, materia orgánica, surfactantes y otros colorantes, que consumen las especies oxidantes generadas durante el proceso. Como consecuencia, la oxidación avanzada presenta una menor eficiencia debido a la competencia por las especies reactivas y a la disminución de radicales disponibles para la degradación del colorante objetivo.

La caracterización de los efluentes obtenidos de los tratamientos anteriores se muestra en la Tabla 2, que resume los parámetros fisicoquímicos que se determinaron en el efluente antes de utilizarlo en los bioensayos. Como puede observarse, el agua textil cruda presentó una concentración de 126 mg/L de sólidos suspendidos totales (SST), valor que supera el límite permisible de 84 mg/L según la NOM-001-SEMARNAT-2021, evidenciando una elevada carga de partículas suspendidas provenientes de fibras textiles, colorantes y aditivos del proceso de lavado de mezclilla.

Después de los tratamientos, los SST disminuyeron a 9.52 mg/L mediante coagulación-floculación (dosis 2) y a 7.5 mg/L mediante el sistema galvánico de oxidación avanzada GFH, alcanzando eficiencias de remoción superiores al 92 %. Estos resultados indican una alta capacidad de ambos tratamientos para eliminar material particulado y mejorar la calidad física del efluente. En cuanto a las temperaturas registradas oscilaron entre 20 y 30 °C, encontrándose todas por debajo del límite de 35 °C. Esto indica que ninguno de los tratamientos genera un incremento térmico significativo que pudiera afectar la solubilidad del oxígeno o alterar las condiciones ecológicas del cuerpo receptor. La DQO máxima del agua textil azul cruda fue de 1002.88 mg/L (Tabla 2), aproximadamente cinco veces superior al límite normativo de 210 mg/L, lo que confirma una elevada concentración de materia orgánica y compuestos oxidables. Tras el tratamiento con coagulación-floculación, la DQO disminuyó un 93.95%, mientras que el sistema GPOA-GFH logró una remoción cercana al 98 %.

Estos resultados demuestran que el sistema galvánico de oxidación avanzada GFH presenta una mayor capacidad de oxidación de los contaminantes orgánicos presentes en el agua residual textil. Por otra parte, el agua textil cruda presentó coeficientes de absorción muy elevados que determinan la presencia de color verdadero en el agua (Tabla 2), excediendo ampliamente los límites establecidos en la NOM 001. Esto confirma la presencia de altas concentraciones de colorantes residuales. Después del tratamiento por coagulación-floculación, los valores disminuyeron considerablemente, respectivamente, mientras que el tratamiento galvánico de oxidación avanzada GFH produjo valores de color verdadero similares. Ambos tratamientos removieron eficientemente el color; sin embargo, a 525 y 620 nm los valores permanecieron por encima del límite establecido en NOM 001, sugiriendo la persistencia de algunos compuestos coloreados o productos intermedios de degradación después de los tratamientos propuestos.

En cuanto a los valores de pH, como se muestra en la Tabla 2, el agua textil cruda presentó un pH de 4.01, valor inferior al intervalo permitido en la NOM 001 (6-9), reflejando una condición ácida. El tratamiento por coagulación-floculación incrementó el pH hasta 11.06, excediendo el límite superior debido al uso de reactivos alcalinos durante el proceso. Por otra parte, el tratamiento galvánico de oxidación avanzada GFH produjo un pH de 3.2, manteniendo condiciones altamente ácidas asociadas a las necesidades de la reacción Fenton. En consecuencia, ninguno de los tratamientos generó un efluente con pH adecuado para descarga directa, siendo necesaria una etapa posterior de neutralización.

Las concentraciones detectadas de nitratos fueron relativamente bajas en el agua textil cruda y en el agua tratada mediante coagulación-floculación.

Sin embargo, el sistema GPOA-GFH mostró un incremento hasta 72.8 mg/L, probablemente asociado a la oxidación de compuestos nitrogenados orgánicos presentes en el efluente y su transformación a especies más oxidadas. Aunque la NOM-001-SEMARNAT-2021 no establece un límite para este parámetro, concentraciones elevadas pueden contribuir a fenómenos de eutrofización en cuerpos receptores.

Finalmente, el agua textil cruda presentó una concentración baja de hierro (0.2404 mg/L). Después del tratamiento por coagulación-floculación, la concentración aumentó a 2.03 mg/L, mientras que en el sistema GPOA-GFH alcanzó 81.2 mg/L (Tabla 2).

Este incremento se atribuye a la disolución del hierro proveniente de los electrodos y a la formación de especies ferrosas y férricas durante el proceso. Aunque la NOM-001-SEMARNAT-2021 no establece un límite específico para hierro total, esta concentración es considerablemente alta y podría generar problemas de coloración, sedimentación y toxicidad en organismos acuáticos, por lo que sería recomendable incorporar una etapa de precipitación o separación de hierro antes de la descarga final.

Los resultados muestran que tanto el tratamiento por coagulación-floculación como el sistema galvánico de oxidación avanzada GFH fueron altamente efectivos para la remoción de SST, DQO y color. Sin embargo, el proceso GFH destacó por alcanzar la mayor reducción de materia orgánica y sólidos suspendidos. No obstante, este tratamiento también produjo los valores más elevados de hierro total y mantuvo un pH ácido, aspectos que requieren tratamiento complementario antes de su disposición final. Por tanto, desde una perspectiva integral, el sistema GPOA-GFH ofrece una mayor eficiencia de oxidación, pero demanda etapas adicionales de neutralización y remoción de hierro para cumplir plenamente con los criterios de calidad ambiental.

Tabla 2. Caracterización fisicoquímica del agua textil sintética, cruda y tratada por coagulación floculación y sistemas galvánicos de oxidación avanzada GFH.

	Agua sintética IC GPOA-GFH	Agua Textil Azul cruda	Agua Textil Azul C-F	Agua Textil Azul GPOA-GFH	LMP (NOM-001-SEMARNAT-2021)
Parámetro	**Concentración**				**Ríos, arroyos, uso en riego de áreas verdes**
SST	5 mg/L	126 mg/L	9.52 mg/L	7.5 mg/L	84 mg/L
Temperatura	20°C	30°C	21°C	23°C	35°C
DQO	75.5 mg/L	1002.88 mg/L	60.66 mg/L	19.89 mg/L	210 mg/L
Color verdadero	6.74 m^{-1} (436 nm) 4.27 m^{-1} (525 nm) 3.10 m^{-1} (620 nm)	295 m^{-1} (436 nm) 137.5 m^{-1} (525 nm) 63.8 m^{-1} (620 nm)	5.3 m^{-1} (436 nm) 4.5 m^{-1} (525 nm) 5.5 m^{-1} (620 nm)	5.9 m^{-1} (436 nm) 5.4 m^{-1} (525 nm) 7.8 m^{-1} (620 nm)	7 m^{-1} (436 nm) 5 m^{-1} (525 nm) 3 m^{-1} (620 nm)
pH	2.8	4.01	11.06	3.2	6-9
Nitratos	65 mg/L	18.63 mg/L	17.56 mg/L	72.8 mg/L	NA
Hierro total	12.46 mg/L	0.2404 mg/L	2.03 mg/L	81.2 mg/L	NA

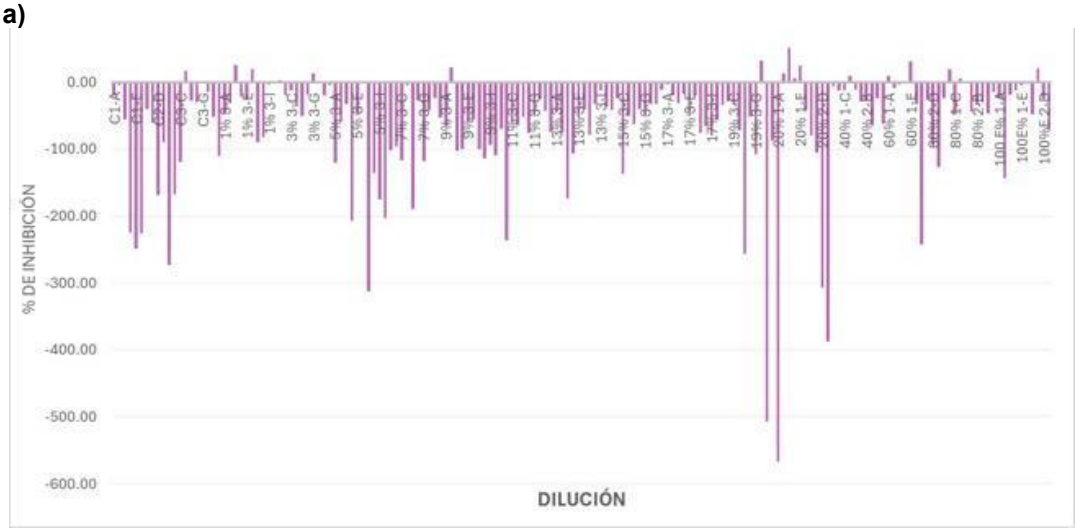
Etapa 3. Bioensayos con Allium fistulosum

Los resultados del ensayo de fitotoxicidad en *Allium fistulosum* utilizando el efluente sintético contaminado con IC y tratado por oxidación avanzada se resumen en la figura 6a. Estos resultados mostraron una marcada predominancia de valores negativos de inhibición radicular en la mayoría de las diluciones del efluente, lo que indica una estimulación del crecimiento de las raíces en comparación con el control. Este comportamiento sugiere la ocurrencia de un efecto hormético, caracterizado por respuestas biológicas estimuladoras ante la exposición a concentraciones subletales de compuestos potencialmente tóxicos (Cedergreen et al., 2007). Aunque se observaron algunos valores positivos de inhibición en determinadas diluciones, no se evidenció una relación directa entre el aumento de la concentración del efluente y la disminución del crecimiento radicular. Por el contrario, varias diluciones presentaron incrementos significativos en la elongación de las raíces, alcanzando porcentajes de inhibición negativos de gran magnitud.

Estos resultados indican que el índigo carmín y/o los compuestos presentes en el efluente evaluado no ejercieron una fitotoxicidad aguda significativa sobre *Allium fistulosum* bajo las condiciones experimentales empleadas. La estimulación del crecimiento radicular observada en *Allium fistulosum* podría estar relacionada con la formación de iones amonio (NH_4^+) durante la degradación del índigo carmín, los cuales pueden actuar como una fuente disponible de nitrógeno para las plántulas. En consecuencia, el efecto nutricional asociado a estas especies nitrogenadas pudo contribuir a los valores negativos de inhibición registrados en varios tratamientos (Cedergreen et al., 2007).

La Figura 6b, muestra el porcentaje de inhibición del crecimiento radicular de *Allium fistulosum* (cebollas cambray) expuestas a diferentes diluciones de agua textil real cruda sin tratar y tratada mediante coagulación-floculación (C-F) y mediante un sistema galvánico de oxidación avanzada (GFH). El agua textil cruda presentó una inhibición cercana al 73 %, confirmando la elevada fitotoxicidad del efluente original, asociada a la presencia de colorantes, compuestos orgánicos persistentes y otras sustancias químicas empleadas durante los procesos textiles.

a)



b)

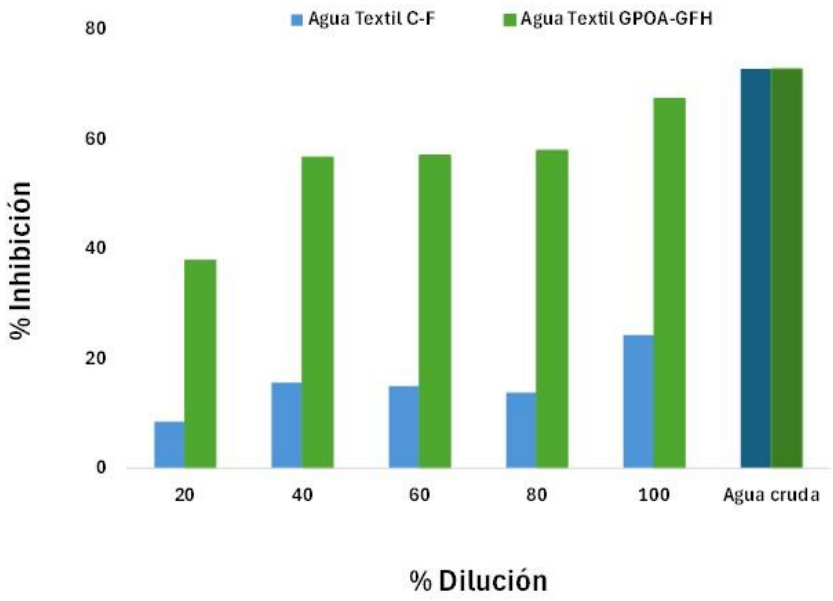


Figura 6. Porcentaje de inhibición de crecimiento radicular de *Allium Fistulosum* empleando a) efluente de agua sintética con IC tratad por procesos galvánico de oxidación avanzada (GFH) y b) efluentes textiles azules reales tratados por coagulación-floculación y procesos galvánico de oxidación avanzada (GFH).

Por otra parte, el tratamiento por coagulación-floculación del agua textil cruda redujo significativamente la inhibición radicular, alcanzando valores entre 8 y 24.3%. Estos resultados sugieren una remoción efectiva de los compuestos responsables de la toxicidad. La baja inhibición observada indica una mejora sustancial de la calidad del efluente y una menor afectación sobre el desarrollo vegetal.

En contraste, el efluente tratado mediante procesos galvánicos de oxidación avanzada GFH, presentó porcentajes de inhibición entre 38 y 67.4 %, considerablemente superiores a los observados para C-F. Aunque este sistema logró una mayor reducción de DQO y color, la persistencia de la toxicidad puede estar relacionada con la formación de productos intermedios de oxidación con actividad biológica residual. Adicionalmente, el efluente presentó un pH ácido (3.2) y una elevada

concentración de hierro total (81.2 mg/L), condiciones que pueden generar estrés fisiológico, afectar la absorción de nutrientes y limitar o incrementar el crecimiento radicular (Correa,1964).

Los resultados obtenidos para la concentración inhibitoria media (CI_{50}) que se resumen en la Tabla 3, muestran diferencias significativas entre los tratamientos evaluados. Por ejemplo, el agua textil azul tratada mediante coagulación-floculación presentó una CI_{50} de 82.8 %, lo que indica una baja toxicidad residual, debido a que se requiere una concentración elevada del efluente para provocar una inhibición del 50 %. Este comportamiento sugiere que el proceso de coagulación-floculación removió eficazmente una parte importante de los compuestos responsables de los efectos fitotóxicos.

En contraste, el agua textil azul tratada mediante el proceso galvánico de oxidación avanzada GFH presentó una CI_{50} de 20.7 %, aproximadamente cuatro veces menor que la obtenida para el tratamiento de coagulación-floculación. Este resultado evidencia una mayor toxicidad biológica, ya que concentraciones relativamente bajas del efluente son suficientes para generar una reducción significativa del crecimiento radicular. De acuerdo con los criterios eco toxicológicos, valores bajos de CI_{50} se asocian con una mayor peligrosidad ambiental, mientras que valores elevados indican una menor capacidad inhibitoria.

Por otra parte, para el agua sintética de índigo carmín tratada mediante procesos galvánicos de oxidación avanzada GFH no fue posible determinar una CI_{50}, debido a que no se observó inhibición del crecimiento radicular dentro del intervalo de concentraciones evaluado. Este comportamiento sugiere la ausencia de efectos fitotóxicos detectables e incluso una respuesta de estimulación del crecimiento. En conjunto, los valores de CI_{50} demuestran que el tratamiento de coagulación-floculación produjo el efluente menos tóxico, mientras que el sistema GFH aplicado al agua textil real mantuvo una toxicidad residual considerable, evidenciando la influencia de la complejidad de la matriz del efluente sobre la respuesta biológica.

Tabla 3. Porcentajes de inhibición de crecimiento radicular y CI50 para efluentes tratados

Tratamiento	% de inhibición máximo	CI_{50}
Agua Textil azul Coagulación-Floculación D2	24.3	82.8
Agua sintética IC GPOA-GFH	-550	----
Agua Textil azul GPOA-GFH	67.4	20.7

CONCLUSIONES

El tratamiento basado en coagulación-floculación con hierro (pH 11) y el sistema GPOA-GFH (pH 2.8) demostraron ser eficientes para la remoción de colorantes textiles (74 % -99.9 %) tanto en agua sintética como en agua textil real proveniente de lavanderías de mezclilla. Por otra parte, los tiempos de tratamiento propuestos no requieren periodos prolongados ni condiciones de operación extremas, lo que favorece su aplicación práctica. La caracterización del efluente indicó el cumplimiento de parámetros clave para su disposición en cuerpos de agua o su posible reúso en riego (DQO); sin embargo, es necesario ajustar el pH final del efluente y reducir el color residual (620 nm).

En los bioensayos, el agua sintética tratada mediante el sistema GFH no presentó efectos inhibitorios sobre el crecimiento radicular; por el contrario, se observó un incremento de hasta 550 % en el crecimiento de raíces. En contraste, el agua textil real tratada por ambos métodos sí mostró inhibición del crecimiento radicular, alcanzando valores máximos de 24.3 % para coagulación-

floculación y 67.4 % para GFH. Asimismo, el tratamiento con GFH presentó un mayor efecto inhibitorio (CI_{50} = 20.7) en comparación con coagulación-floculación (CI_{50} = 82.8)

Estos resultados evidencian que una mayor remoción de materia orgánica no necesariamente implica una menor toxicidad biológica. Por ello, la evaluación mediante bioensayos con *Allium fistulosum* constituye una herramienta complementaria indispensable para determinar la calidad ambiental real de los efluentes tratados y verificar la eliminación efectiva de compuestos tóxicos residuales.

BIBLIOGRAFÍA

1. S. Khan and A. Malik, “Environmental and Health Effects of Textile Industry Wastewater”, Environmental Deterioration and Human Health, A. Malik, E. Grohmann and R. Akhtar, Eds., Springer, Dordrecht, 2014, pp. 55–71.
2. M. F. Chowdhury, S. Khandaker, F. Sarker, A. Islam, M. T. Rahman and M. R. Awual, “Current treatment technologies and mechanisms for removal of indigo carmine dyes from wastewater: A review”, J. Mol. Liq., Vol. 318, 2020, Art. 114061.
3. M. Castañeda Delgado, “El índigo en la pintura de caballete novohispana: mecanismos de deterioro”, Intervención, Vol. 10, No. 19, 2019, pp. 25–35.
4. G. A. Kallawar and B. A. Bhanvase, “A review on existing and emerging approaches for textile wastewater treatments: challenges and future perspectives”, Environ. Sci. Pollut. Res., Vol. 31, No. 2, 2024, pp. 1748–1789.
5. L. A. Castillo-Suárez, V. Lugo-Lugo, I. Linares-Hernández, V. Martínez-Miranda, M. Esparza-Soto and M. de los Ángeles Mier-Quiroga, “Biodegradability index enhancement of landfill leachates using a Solar Galvanic-Fenton and Galvanic-Fenton system coupled to an anaerobic–aerobic bioreactor”, Sol. Energy, Vol. 188, 2019, pp. 989–1001.
6. O. B. Samuel, F. I. Osuala and P. G. Odeigah, “Cytogenotoxicity evaluation of two industrial effluents using *Allium cepa* assay”, Afr. J. Environ. Sci. Technol., Vol. 4, No. 1, 2010.
7. NMX-AA-034-SCFI-2015, “Análisis de Agua – Medición de sólidos y sales disueltas en aguas naturales, residuales y residuales tratadas – Método de prueba”, Secretaría de Economía, México, 2015.
8. Hach Chemical Company, “Method 8000. Oxygen Demand, Chemical, Dichromate Method (multi-range: 40.0, 150, 1500, 15,000 mg/L)”, Documento 316.53.01099, 2021, 8 pp.
9. T. A. Doane and W. R. Horwath, “Spectrophotometric determination of nitrate with a single reagent”, Anal. Lett., Vol. 36, No. 12, 2003, pp. 2713–2722.
10. NMX-AA-017-SCFI-2021, “Análisis de Agua – Medición de color verdadero en aguas naturales, residuales, residuales tratadas y marinas – Mediante coeficientes de absorción espectral – Método de prueba”, Secretaría de Economía, México, 2021.
11. NMX-AA-008-SCFI-2016, “Análisis de Agua – Medición del pH en aguas naturales, residuales y residuales tratadas – Método de prueba”, Secretaría de Economía, México, 2016.
12. ISO 6685, “Chemical products for industrial use — General method for determination of iron content — 1,10-Phenanthroline spectrophotometric method”, International Organization for Standardization, Geneva, Switzerland, 1982.
13. B. Shashank and D. Suresh, “Toxicity effects of municipal sewage effluent on onion roots”, J. Environ. Res. Dev., Vol. 7, 2013, pp. 1547–1551.
14. L. G. Parvan, T. G. Leite, T. B. Freitas, P. A. A. Pedrosa, J. S. Calixto and L. A. Agostinho, “Bioensayo con *Allium cepa* revela genotoxicidad de herbicida con flumioxazin”, Rev. Pan Amaz. Saude, Vol. 11, 2020, Art. e202000544.
15. Cedergreen, N., Streibig, J. C., Kudsk, P., Mathiassen, S. K., & Duke, S. O. (2007). The occurrence of hormesis in plants and algae. Dose-response, 5(2), dose-response.
16. CORREA, A. (1964). Efecto del hierro en el desarrollo de las raíces de las plantas. Rev. Fac. Nal. Agron, 24(61), 27.

FACTORES AMBIENTALES QUE DETERMINAN LA DISTRIBUCIÓN POTENCIAL DEL MURCIÉLAGO *Myotis Carteri* (LAVAL, 1973)

Claudia Ballesteros-Barrera[1], Bárbara Vargas-Miranda[1], Rocío Zárate-Hernández[1], Angélica Martínez-Bernal[1], Selene Ortiz-Burgos[2]

[1]Universidad Autónoma Metropolitana. [2]Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México.

bbc7@xanum.uam.mx

RESUMEN

Myotis carteri es un murciélago insectívoro de talla pequeña perteneciente a la familia Vespertilionidae. Es una especie endémica de México con distribución geográfica restringida a la vertiente del Pacífico. Presenta una coloración dorsal que varía de café oscuro a negro, con tonalidades ligeramente más claras en la región ventral. Se distribuye desde Nayarit hasta Michoacán y se extiende a través de la cuenca del río Balsas hasta el sur del Estado de México. Habita principalmente selva tropical caducifolia, matorral xerófilo y bosque mesófilo de montaña. Con el fin de aportar información relevante para su conservación, se modeló el nicho ecológico de *M. carteri* utilizando 31 registros de presencia georreferenciados y 19 variables bioclimáticas con resolución espacial de 1 km² mediante el algoritmo de máxima entropía (MaxEnt). El perfil bioclimático mostró que la especie se asocia con una temperatura media anual de 22.02 °C, temperatura media del trimestre más cálido de 24.40 °C y del trimestre más frío de 19.05 °C. La precipitación media anual fue de 988.39 mm, con 670.03 mm en el trimestre más húmedo y 1.10 mm en el trimestre más seco. El modelo presentó un AUC de 0.93 y predijo una superficie potencial de 162,275 km². Dentro del área predicha se encuentran la Reserva de la Biosfera Sierra de Manantlán, la Reserva de la Biosfera Zicuirán-Infiernillo y la Reserva de la Biosfera Marismas Nacionales Nayarit. Los resultados constituyen una base cuantitativa para evaluar la situación actual de la especie y orientar futuras acciones de monitoreo y manejo.

INTRODUCCIÓN

El género *Myotis* (Vespertilionidae) es uno de los más diversos entre los murciélagos, con representantes en casi todos los continentes (Simmons, 2005). En México se distribuyen numerosas especies, varias de ellas endémicas o con rangos restringidos (Ceballos, 2014).

Myotis carteri LaVal, 1973 fue descrito originalmente como una subespecie de *M. nigricans*; posteriormente Bogan (1978) lo elevó a nivel de especie, estatus que ha sido aceptado por varios autores (Hall, 1981), aunque Koopman (1993) propuso reintegrarlo a *M. nigricans* sin presentar argumentos novedosos. En esta contribución se sigue la clasificación de Bogan (1978), por ser la última revisión taxonómica formal del grupo (Wilson, 2014). En la actualidad, la NOM-059-SEMARNAT-2010 (modificación 2019) lo reconoce como *Myotis nigricans carteri* bajo la categoría de sujeta a protección especial (Pr) (Sánchez-Cordero et al., 2021), mientras que Ceballos (2014) lo reconoce como *M. carteri*.

Este murciélago es una de las especies más pequeñas registradas en México (Wilson, 2014; Ceballos, 2014), que se caracteriza por un pelaje dorsal que varía de café claro a casi negro, con dos franjas ligeramente más oscuras en la región dorsal, mientras que el vientre es de color café claro. Presenta rostro sin ornamentaciones, orejas que no se proyectan más allá del hocico y cola larga que alcanza el borde del uropatagio, bien desarrollado y en forma de V. El cráneo es corto, con cresta sagital ausente, arco cigomático bien desarrollado y trago erecto (Ceballos & Oliva, 2005). Sus medidas externas son: longitud total 68–82 mm, longitud de la cola 28–39 mm, longitud del pie

6–9 mm, longitud de la oreja 10–13 mm y longitud del antebrazo 32.9–36.2 mm; su peso oscila entre 3 y 4 g. La fórmula dental es i 2/3, c 1/1, pm 3/3, m 3/3, con un total de 38 dientes (LaVal, 1973). Se distingue de *M. findleyi* por su mayor tamaño y coloración más oscura.

Es una especie endémica de México, distribuida en la vertiente del Pacífico desde Nayarit hasta Michoacán y a través de la cuenca del río Balsas hasta el sur del Estado de México, en los estados de Colima, Jalisco, Michoacán, Estado de México y Nayarit (LaVal, 1973; Chávez & Ceballos, 2001; Polaco & Muñiz-Martínez, 1987; Wilson, 2014). Habita en climas tropicales Aw y Cw, desde las tierras bajas hasta los 1,500 m (Wilson & LaVal, 1974; Hall, 1981). La especie utiliza como refugios cuevas, grietas de rocas y huecos en árboles (Sánchez-Cordero et al., 2021). Su dieta se basa principalmente en lepidópteros, dípteros y coleópteros (Ceballos & Miranda, 2000; Garduño, 2005). Las hembras tienen una sola cría al año; forman colonias de maternidad durante el otoño y los jóvenes emigran a los 4 o 5 meses de edad (Garduño, 2005). La especie realiza vuelos altos, lentos y erráticos para capturar insectos, y se le observa con frecuencia sobre cauces de ríos y arroyos (Wilson & LaVal, 1974).

Respecto a su estado de conservación, la evaluación del Método de Evaluación del Riesgo (MER) realizada por Sánchez-Cordero et al. (2021) asignó una puntuación total de 13, lo que la clasifica como especie En Peligro de Extinción (P) bajo la NOM-059-SEMARNAT-2010. Los cuatro criterios del MER evidencian su vulnerabilidad: distribución microendémica menor al 5% del territorio nacional, hábitat hostil o muy limitante por altas tasas de deforestación, vulnerabilidad biológica alta por densidades poblacionales bajas e impacto antrópico medio por la acelerada transformación de su hábitat. Actualmente, bajo la modificación del Anexo Normativo III de 2019, está clasificada como sujeta a protección especial (Pr), bajo la sinonimia *Myotis nigricans carteri* (SEMARNAT, 2010). La principal amenaza que enfrenta la especie es la pérdida de hábitat ocasionada por las actividades ganaderas, agrícolas y el acelerado desarrollo turístico en la costa del Pacífico (Arriaga et al., 2000; Masera et al., 1997; Rzedowski, 1986). Dentro de su área de distribución existen áreas naturales protegidas relevantes —como la Reserva de la Biosfera Chamela-Cuixmala— y regiones terrestres prioritarias —Sierra Vallejo-río Ameca en Nayarit y Chamela-Cabo Corrientes en Jalisco—, todas con grandes extensiones de hábitat necesario para la persistencia de la especie (Arriaga et al., 2000). No obstante, es necesario poner especial atención en las zonas asociadas a cuerpos de agua, ya que la especie ha sido registrada exclusivamente en esos sitios y son los que sufren mayor impacto por deforestación y cambio de uso de suelo (Reid, 1997).

El conocimiento sobre la distribución potencial de *M. carteri* sigue siendo escaso. Una evaluación previa mediante modelado de nicho ecológico reportó un AUC de 0.85 (Sánchez-Cordero et al., 2021), pero basada en tan solo 24 registros históricos entre 1976 y 1981. El presente trabajo tiene como objetivos: (1) caracterizar el perfil bioclimático de la especie, (2) generar un modelo de distribución potencial actualizado mediante MaxEnt a escala de 1 km², e (3) identificar las variables ambientales de mayor influencia en su distribución, aportando información que fundamente acciones de conservación y monitoreo.

TEORÍA

Modelado de nicho ecológico

El modelado de nicho ecológico se sustenta en el concepto de nicho hutchinsoniano (Hutchinson, 1957), definido como el conjunto multidimensional de condiciones ambientales que permiten la supervivencia y reproducción de una especie. Los modelos de distribución de especies relacionan registros de ocurrencia con variables ambientales para estimar la distribución geográfica potencial de un taxon, y resultan especialmente útiles para especies con registros escasos y distribución restringida (Soberón & Peterson, 2005; Peterson et al., 2011). MaxEnt estima la distribución de probabilidad de máxima entropía sujeta a las restricciones impuestas por las variables ambientales en los sitios de presencia conocidos (Phillips et al., 2006; Phillips & Dudík, 2008), y ha demostrado un desempeño robusto con tamaños de muestra reducidos (Hernandez et al., 2006; Elith et al., 2011).

El área bajo la curva ROC (AUC) y las tasas de omisión constituyen las métricas estándar para evaluar su capacidad predictiva (Fielding & Bell, 1997).

PARTE EXPERIMENTAL

Obtención y depuración de registros de presencia

Los registros de presencia de *M. carteri* fueron recopilados de: (1) literatura científica especializada, incluyendo LaVal (1973), Wilson (2014) y Ceballos (2014); (2) Global Biodiversity Information Facility (GBIF; http://www.gbif.org, datos obtenidos el 22 de marzo de 2021; GBIF Occurrence Download: https://doi.org/10.15468/dl.juuqhz) y VertNet; y (3) la Colección Nacional de Mamíferos de la UNAM (CNMA). Se eliminaron duplicados espaciales, registros sin coordenadas y aquellos con errores de georeferenciación verificados en Google Earth Pro. Las coordenadas finales fueron proyectadas en WGS84. El conjunto final de 31 localidades supera los 24 registros históricos disponibles hasta 2021 (Sánchez-Cordero et al., 2021), lo que mejora la representatividad del modelado.

Variables ambientales y perfil bioclimático

Se emplearon 19 variables bioclimáticas de WorldClim v2.1 (Fick & Hijmans, 2017) con resolución de 1 km², que sintetizan patrones mensuales de temperatura y precipitación relevantes para los organismos (Cuadro 1). El área accesible (región M) se delimitó con base en los estados con registros confirmados, siguiendo a Peterson et al. (2011). El perfil bioclimático se construyó extrayendo los valores de las 19 variables en cada localidad mediante la herramienta Extract by mask de ArcMap 10.4.1 (ESRI, 2016), calculando mínimo, máximo, promedio y desviación estándar (Fischer et al., 2001).

Generación del modelo de distribución potencial

La selección de variables se realizó en dos etapas: prueba de Jackknife en MaxEnt 3.4.1 para identificar las de mayor contribución, y análisis de correlación de Pearson reteniéndose las con $|r| < 0.70$ (Dormann et al., 2013). Se aplicó un filtro espacial con SDMToolbox (Brown, 2014) con distancia mínima de 1 km. La calibración de MaxEnt evaluó cinco funciones de respuesta (L, LQ, H, LQH, LQHP) con multiplicadores de regularización de 0.5 a 5.0, seleccionando el modelo óptimo por AUC, tasa de omisión mínima y ΔAICc (Muscarella et al., 2014; Merow et al., 2013). La validación se realizó con análisis ROC parcial en Tool for Partial-ROC (Narayani, 2008).

RESULTADOS

Registros de presencia y distribución geográfica

Se obtuvieron 31 localidades únicas de *M. carteri* (Fig. 1): Jalisco 16 (51.6%), Colima 6 (19.4%), Nayarit 6 (19.4%) y Michoacán 3 (9.7%). Los registros confirman la distribución endémica a la vertiente del Pacífico descrita por LaVal (1973) y Wilson (2014), y amplían el conjunto de 24 registros históricos reportados por Sánchez-Cordero et al. (2021). La concentración en Jalisco refleja en parte el mayor esfuerzo de muestreo en esa entidad; la escasez en Michoacán y la ausencia en el Estado de México sugieren un vacío de muestreo en el extremo sur del rango de la especie.

Perfil bioclimático

M. carteri habita en ambientes cálidos y estacionalmente húmedos, asociados a climas tropicales Aw y Cw (Cuadro 1), consistentes con los descritos por Wilson & LaVal (1974) y Hall (1981). La temperatura media anual fue de 22.02 °C (rango: 14.9–26.7 °C; DE = 3.06), la temperatura máxima del mes más cálido promedió 33.45 °C (DE = 2.41) y la temperatura mínima del mes más frío fue de 9.45 °C (DE = 3.56). La precipitación anual promedió 988.39 mm (rango: 639–1,596 mm; DE = 210.22), con marcada estacionalidad: 0 mm en el mes más seco en todas las localidades, 1.10 mm en el trimestre más seco (DE = 6.11) y 670.03 mm en el trimestre más húmedo (rango: 434–1,151 mm; DE = 163.80). La estacionalidad de la precipitación (BIO15 = 112.10; DE = 7.34) confirma la fuerte concentración estival de las lluvias.

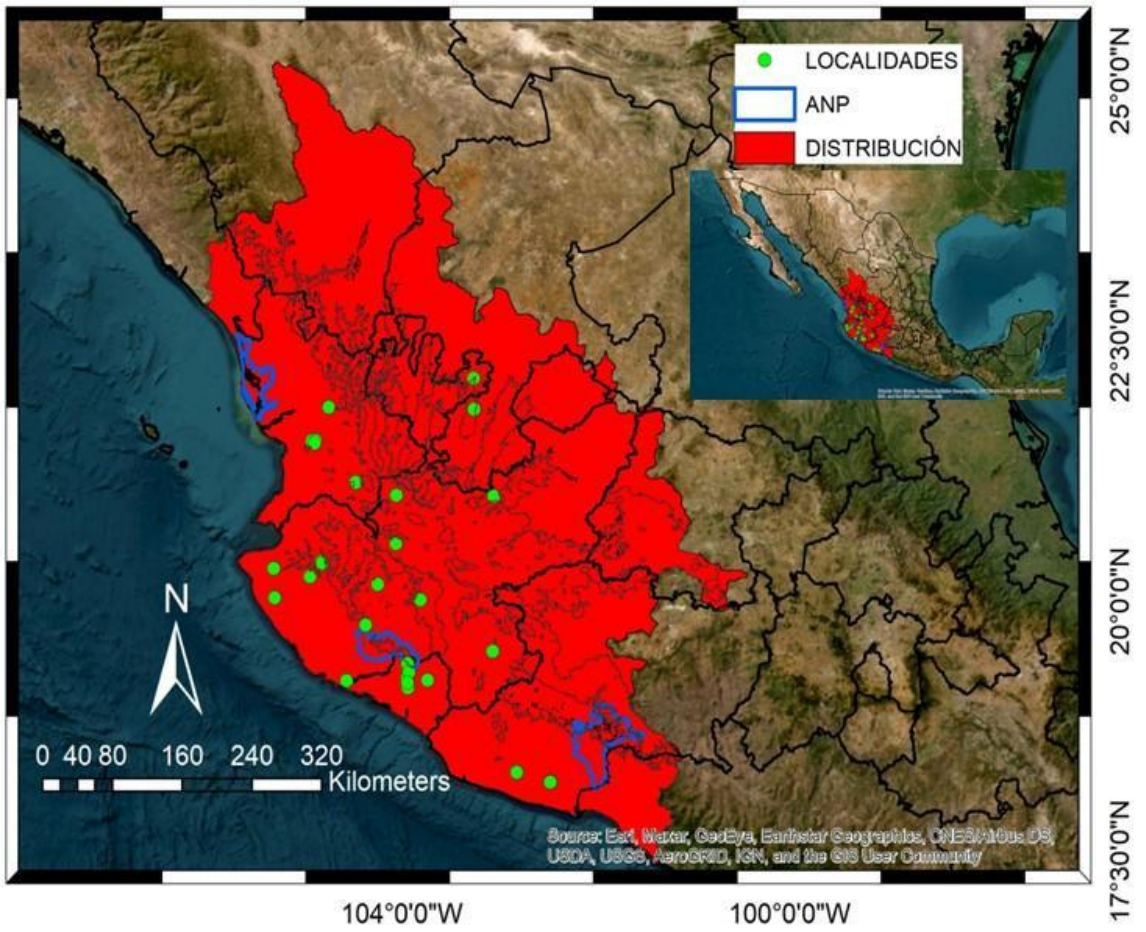


Figura 1. Distribución potencial de *Myotis carteri* en México estimada con MaxEnt (AUC = 0.93). El área roja indica la superficie con condiciones ambientales adecuadas (162,275 km²). Los puntos verdes representan las 31 localidades de presencia utilizadas en el modelado. Los polígonos azules delimitan las Áreas Naturales Protegidas (ANP) dentro del área predicha: Reserva de la Biosfera Sierra de Manantlán, Reserva de la Biosfera Zicuirán-Infiernillo y Reserva de la Biosfera Marismas Nacionales Nayarit.

Modelo de distribución potencial

El modelo MaxEnt presentó AUC promedio de 0.93 (DE = 0.02), superior al AUC = 0.85 reportado por Sánchez-Cordero et al. (2021), lo que refleja la mayor cantidad de registros y la calibración más detallada del presente estudio. Las variables de mayor contribución fueron: precipitación del trimestre más húmedo (BIO16, 34.2%), temperatura media anual (BIO1, 22.8%) y estacionalidad de la precipitación (BIO15, 18.3%). El Jackknife confirmó que BIO16 tiene la mayor importancia independiente, señalando la disponibilidad estacional de agua como el principal determinante de la distribución de la especie.

La distribución potencial abarcó 162,275 km² en Nayarit, Jalisco, Colima y Michoacán, con extensiones hacia la cuenca del Balsas y el sur del Estado de México. Dentro del área predicha se encuentran la Reserva de la Biosfera Sierra de Manantlán, la Reserva de la Biosfera Zicuirán-Infiernillo y la Reserva de la Biosfera Marismas Nacionales Nayarit (Fig. 1). Asimismo, el modelo coincide espacialmente con las regiones terrestres prioritarias Sierra Vallejo-río Ameca (Nayarit) y Chamela-Cabo Corrientes (Jalisco), áreas que mantienen grandes extensiones de hábitat esencial para la persistencia de la especie (Arriaga et al., 2000).

Cuadro 1. Perfil bioclimático de *Myotis carteri* (n = 31 localidades). DE = desviación estándar. Variables de WorldClim v2.1 (Fick & Hijmans, 2017).

Código	Variable bioclimática	n	Mín.	Máx.	Promedio	DE
BIO1	Temperatura media anual (°C)	31	14.9	26.7	22.02	3.06
BIO2	Intervalo de temperatura diurna (°C)	31	12.0	19.0	14.89	1.68
BIO3	Isotermalidad (cociente entre parámetros 2 y 7)	31	0.58	0.68	0.62	0.03
BIO4	Estacionalidad de la temperatura (coef. variación, %)	31	0.52	1.19	0.74	0.17
BIO5	Temperatura máxima del mes más cálido (°C)	31	26.4	37.8	33.45	2.41
BIO6	Temperatura mínima del mes más frío (°C)	31	3.3	14.7	9.45	3.56
BIO7	Intervalo de la temperatura anual (°C)	31	19.3	31.0	23.98	2.93
BIO8	Temperatura prom. trimestre más húmedo (°C)	31	16.7	28.3	23.97	2.87
BIO9	Temperatura prom. trimestre más seco (°C)	31	13.9	27.0	21.58	2.96
BIO10	Temperatura prom. trimestre más cálido (°C)	31	17.2	29.1	24.40	2.81
BIO11	Temperatura prom. trimestre más frío (°C)	31	12.0	23.6	19.05	3.47
BIO12	Precipitación anual (mm)	31	639	1596	988.39	210.22
BIO13	Precipitación del mes más húmedo (mm)	31	44	102	64.06	16.80
BIO14	Precipitación del mes más seco (mm)	31	0	0	0.00	0.00
BIO15	Estacionalidad de la precipitación (coef. variación, %)	31	89	121	112.10	7.34
BIO16	Precipitación del trimestre más húmedo (mm)	31	434	1151	670.03	163.80
BIO17	Precipitación del trimestre más seco (mm)	31	0	34	1.10	6.11
BIO18	Precipitación del trimestre más cálido (mm)	31	313	969	505.29	186.98
BIO19	Precipitación del trimestre más frío (mm)	31	11	76	47.65	18.25

DISCUSIÓN

Perfil bioclimático y asociaciones vegetacionales

El perfil bioclimático obtenido es coherente con las asociaciones de vegetación descritas para *M. carteri*. La especie ha sido registrada en bosque tropical caducifolio, matorral xerófilo y bosque mesófilo de montaña, con una preferencia por los bosques subcaducifolios y caducifolios, y registros incluso en bosques de coníferas y de *Quercus* (Wilson & LaVal, 1974; Sánchez-Cordero et al., 2021). La temperatura media anual de 22.02 °C y la precipitación de 988.39 mm son consistentes con las condiciones que caracterizan la selva tropical caducifolia del occidente mexicano, bioma definido por su marcada estacionalidad hídrica y temperaturas cálidas (Rzedowski, 1986). La asociación exclusiva de los registros con cuerpos de agua —todos los ejemplares conocidos han sido capturados en redes sobre corrientes de agua (Sánchez-Cordero et al., 2021)— subraya la vulnerabilidad de la especie ante la perturbación de estos ecosistemas riparios.

La variable de mayor contribución al modelo (BIO16, precipitación del trimestre más húmedo = 670.03 mm) subraya la importancia de la estacionalidad hídrica para la distribución de *M. carteri*. La ausencia de precipitación en el mes más seco (BIO14 = 0 mm en todas las localidades) refuerza su vínculo con ecosistemas de fuerte estacionalidad, en los que la concentración de recursos

alimenticios —principalmente lepidópteros, dípteros y coleópteros (Ceballos & Miranda, 2000; Garduño, 2005)— coincide con el período de lluvias estivales.

Vulnerabilidad y estado de conservación

La evaluación del MER realizada por Sánchez-Cordero et al. (2021) constituye el referente normativo más reciente para *M. carteri* en México. La puntuación total de 13 sustenta su clasificación como especie En Peligro de Extinción (P) bajo los criterios formales de la NOM-059-SEMARNAT-2010, aunque actualmente figure en la norma como sujeta a protección especial (Pr) por la vía de la sinonimia con *M. nigricans carteri*. Los resultados del presente modelado refuerzan la evaluación del criterio A del MER: la distribución potencial de 162,275 km² representa menos del 1% del territorio nacional, valor consistente con la clasificación de distribución microendémica (< 5% del territorio nacional) que sustenta el valor máximo de 4 puntos en dicho criterio.

Los criterios B, C y D del MER son igualmente preocupantes. El hábitat de *M. carteri* —bosques tropicales subcaducifolios y caducifolios de la costa del Pacífico— presenta elevadas tasas de deforestación y fragmentación asociadas a la ganadería, la agricultura y el desarrollo turístico (Arriaga et al., 2000; Masera et al., 1997; Rzedowski, 1986). A ello se suman la baja densidad poblacional registrada (solo tres individuos capturados en la localidad de Boca de Iguanas, Jalisco, durante el muestreo de 2017; Sánchez-Cordero et al., 2021) y la fecundidad intrínsecamente baja: una sola cría por hembra por año (Garduño, 2005; Nowak, 1999).

Distribución potencial, áreas protegidas y prioridades de muestreo

La distribución potencial estimada (162,275 km²) amplía considerablemente el rango conocido de *M. carteri* respecto a los registros históricos. La presencia dentro del área modelada de la Reserva de la Biosfera Sierra de Manantlán, la Reserva de la Biosfera Zicuirán-Infiernillo y la Reserva de la Biosfera Marismas Nacionales Nayarit, así como la coincidencia con las regiones terrestres prioritarias Sierra Vallejo-río Ameca y Chamela-Cabo Corrientes (Arriaga et al., 2000), constituye un elemento favorable para la protección de su hábitat. Sin embargo, la mayor parte del área predicha (>85%) se encuentra fuera de cualquier figura de protección formal, expuesta a las presiones antrópicas ya descritas.

La escasez de registros en Michoacán (3 localidades) y la ausencia total en el Estado de México —estados incluidos en el rango histórico reportado por LaVal (1973) y Chávez & Ceballos (2001)— indica que las áreas al sur y este del núcleo de distribución en Jalisco representan prioridades urgentes de muestreo. Asimismo, la cuenca del río Balsas y la zona de transición entre la selva caducifolia y el bosque mesófilo en Guerrero merecen atención específica. En estas áreas, la búsqueda debe concentrarse en zonas riparias, donde la especie ha sido registrada exclusivamente (Sánchez-Cordero et al., 2021; Reid, 1997).

Consideraciones taxonómicas

El debate sobre el estatus taxonómico de *M. carteri* tiene implicaciones directas para su conservación. Si la propuesta de Koopman (1993) de tratarla como subespecie de *M. nigricans* fuera adoptada formalmente, la especie perdería los mecanismos de protección específicos derivados de su reconocimiento como entidad válida. La resolución de esta discrepancia mediante análisis moleculares y morfométricos modernos es una prioridad científica con consecuencias directas para la política de conservación (Wilson, 2014).

CONCLUSIONES

Myotis carteri es una especie endémica de México cuya distribución, ecología y estado de conservación han permanecido escasamente documentados. El modelado de nicho ecológico con MaxEnt, sustentado en 31 localidades georreferenciadas y variables bioclimáticas de alta resolución,

demuestra que la estacionalidad hídrica —expresada principalmente en la precipitación del trimestre más húmedo— es el factor ambiental de mayor influencia en la determinación de su distribución geográfica, lo que refleja su estrecha dependencia de los ecosistemas riparios y de la selva tropical caducifolia del occidente mexicano. La distribución potencial estimada incluye áreas bajo protección formal, lo que representa un elemento favorable para la persistencia de la especie. Sin embargo, la mayor parte de ese hábitat potencial se encuentra expuesto a la deforestación y al desarrollo turístico.

La información generada en este trabajo actualiza y fortalece la base cuantitativa disponible para la evaluación de *M. carteri*, y apoya la necesidad de revisar su categoría normativa en la NOM-059-SEMARNAT-2010. Se recomienda intensificar el muestreo en las áreas de distribución potencial identificadas, con énfasis en zonas riparias de Michoacán, Guerrero y la cuenca del río Balsas, así como desarrollar investigación sobre la biología reproductiva y la dinámica poblacional de la especie, aspectos que permanecen sin estudio y son indispensables para una gestión efectiva de su conservación.

BIBLIOGRAFÍA

1. L. Arriaga, J. M. Espinoza, C. Aguilar, E. Martínez, L. Gómez & E. Loa, *Regiones Terrestres Prioritarias de México* (Comisión Nacional para el Conocimiento y Uso de la Biodiversidad, México, 2000).
2. M. A. Bogan, "A new species of *Myotis* from the Islas Tres Marías, Nayarit, México, with comments on variation in *Myotis nigricans*," Journal of Mammalogy, Vol. 59, 3, 1978, pp. 519–530. doi: 10.2307/1380228
3. J. L. Brown, "SDMtoolbox: a python-based GIS toolkit for landscape genetic, biogeographic and species distribution model analyses," Methods in Ecology and Evolution, Vol. 5, 7, 2014, pp. 694–700.
4. G. Ceballos (Ed.), *Mammals of Mexico* (Johns Hopkins University Press, Baltimore, 2014), 974 pp.
5. G. Ceballos & A. Miranda, *Guía de campo de los mamíferos de la costa de Jalisco, México* (Fundación Ecológica Cuixmala, A. C., México, 2000).
6. G. Ceballos & G. Oliva (Eds.), *Los mamíferos silvestres de México*, 1a ed. (Fondo de Cultura Económica / CONABIO, México, 2005).
7. C. Chávez & G. Ceballos, "Diversidad y abundancia de murciélagos en selvas secas de estacionalidad contrastante en el oeste de México," Revista Mexicana de Mastozoología, Vol. 5, 1, 2001, pp. 27–44. doi: 10.22201/ie.20074484e.2001.5.1.78
8. C. F. Dormann, J. Elith, S. Bacher, C. Buchmann, G. Carl, G. Carré, J. R. García-Marquéz, B. Gruber, B. Lafourcade, P. J. Leitão, T. Münkemüller, C. McClean, P. E. Osborne, B. Reineking, B. Schröder, A. K. Skidmore, D. Zurell & S. Lautenbach, "Collinearity: a review of methods to deal with it and a simulation study evaluating their performance," Ecography, Vol. 36, 2013, pp. 27–46. doi: 10.1111/j.1600-0587.2012.07348.x
9. J. Elith, S. J. Phillips, T. Hastie, M. Dudík, Y. E. Chee & C. J. Yates, "A statistical explanation of MaxEnt for ecologists," Diversity and Distributions, Vol. 17, 1, 2011, pp. 43–57. doi: 10.1111/j.1472-4642.2010.00725.x
10. ESRI (Environmental Systems Research Institute), *ArcGIS Desktop: Release 10* (Environmental Systems Research Institute, Redlands, California, 2016).
11. A. H. Fielding & J. F. Bell, "A review of methods for the assessment of prediction errors in conservation presence/absence models," Environmental Conservation, Vol. 24, 1, 1997, pp. 38–49.
12. S. E. Fick & R. J. Hijmans, "WorldClim 2: new 1-km spatial resolution climate surfaces for global land areas," International Journal of Climatology, Vol. 37, 12, 2017, pp. 4302–4315. doi: 10.1002/joc.5086

13. J. Fischer, D. B. Lindenmayer, H. A. Nix, J. L. Stein & J. A. Stein, "Climate and animal distribution: a climatic analysis of the Australian marsupial *Trichosurus caninus*," Journal of Biogeography, Vol. 28, 2001, pp. 293–304.

14. A. Garduño, *Los mamíferos silvestres de Michoacán: diversidad, biología e importancia* (Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, 2005).

15. E. R. Hall, *The Mammals of North America*, 2a ed. (John Wiley & Sons, Nueva York, 1981), Vol. 1.

16. P. A. Hernandez, C. H. Graham, L. L. Master & D. L. Albert, "The effect of sample size and species characteristics on performance of different species distribution modeling methods," Ecography, Vol. 29, 5, 2006, pp. 773–785.

17. G. E. Hutchinson, "Concluding remarks," Cold Spring Harbor Symposia on Quantitative Biology, Vol. 22, 1957, pp. 415–427.

18. K. F. Koopman, "Chiroptera: systematics," in Handbook of Zoology (Walter de Gruyter, Nueva York, 1993), Vol. 8, 60, pp. 1–217.

19. R. K. LaVal, "A revision of the neotropical bats of the genus *Myotis*," Natural History Museum of Los Angeles County, Science Bulletin, Vol. 15, 1973, pp. 1–54.

20. O. R. Masera, M. J. Ordóñez & R. Dirzo, "Carbon emissions from Mexican forests: current situation and long-term scenarios," Climatic Change, Vol. 35, 3, 1997, pp. 265–295.

21. C. Merow, M. J. Smith & J. A. Silander, "A practical guide to MaxEnt for modeling species' distributions: what it does, and why inputs and settings matter," Ecography, Vol. 36, 2013, pp. 1058–1069. doi: 10.1111/j.1600-0587.2013.07872.x

22. R. Muscarella, P. J. Galante, M. Soley-Guardia, R. A. Boria, J. M. Kass, M. Uriarte & R. P. Anderson, "ENMeval: An R package for conducting spatially independent evaluations and estimating optimal model complexity for Maxent ecological niche models," Methods in Ecology and Evolution, Vol. 5, 11, 2014, pp. 1198–1205.

23. B. Narayani, *Tool for Partial-ROC (ver. 1.0)* (Biodiversity Institute, University of Kansas, Lawrence, Kansas, 2008).

24. R. M. Nowak, *Walker's Bats of the World*, 6a ed. (The Johns Hopkins University Press, Baltimore, 1999).

25. R. G. Pearson, C. J. Raxworthy, M. Nakamura & A. T. Peterson, "Predicting species distributions from small numbers of occurrence records: a test case using cryptic geckos in Madagascar," Journal of Biogeography, Vol. 34, 2007, pp. 102–117. doi: 10.1111/j.1365-2699.2006.01594.x

26. A. T. Peterson, J. Soberón, R. G. Pearson, R. P. Anderson, E. Martínez-Meyer, M. Nakamura & M. B. Araújo, *Ecological Niches and Geographic Distributions* (Princeton University Press, Princeton, 2011).

27. S. J. Phillips & M. Dudík, "Modeling of species distributions with MaxEnt: new extensions and a comprehensive evaluation," Ecography, Vol. 31, 2, 2008, pp. 161–175. doi: 10.1111/j.0906-7590.2008.5203.x

28. S. J. Phillips, R. P. Anderson & R. E. Schapire, "Maximum entropy modeling of species geographic distributions," Ecological Modelling, Vol. 190, 3–4, 2006, pp. 231–259.

29. F. Polaco & J. Muñiz-Martínez, "Los murciélagos de la colección mastozoológica del Centro de Investigaciones Biológicas del Noroeste," Anales del Instituto de Biología, UNAM, Serie Zoología, Vol. 58, 1, 1987, pp. 265–270.

30. F. A. Reid, *A Field Guide to the Mammals of Central America and Southeast Mexico* (Oxford University Press, Nueva York, 1997).

31. J. Rzedowski, *Vegetación de México* (Limusa, Ciudad de México, 1986).

32. V. Sánchez-Cordero, A. Rodríguez-Moreno, G. Gutiérrez-Granados & J. Castellanos-Moguel, "Método de evaluación de riesgo para *Myotis carteri*," en Síndrome de nariz blanca: una zoonosis emergente que amenaza los quirópteros de México. Informe final SNIB-CONABIO,

Proyecto No. ME008 (Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Biología, Ciudad de México, 2021).

33. SEMARNAT, "Norma Oficial Mexicana NOM-059-SEMARNAT-2010. Protección ambiental — Especies nativas de México de flora y fauna silvestres — Categorías de riesgo y especificaciones para su inclusión, exclusión o cambio — Lista de especies en riesgo," Diario Oficial de la Federación, 30 de diciembre de 2010; Modificación del Anexo Normativo III, 14 de noviembre de 2019.
34. N. B. Simmons, "Order Chiroptera," in *Mammals of the World: A Taxonomic and Geographic Reference*, 3rd ed. (D. E. Wilson & D. M. Reeder, eds.; Johns Hopkins University Press, Baltimore, 2005), pp. 312–529.
35. J. Soberón & A. T. Peterson, "Interpretation of models of fundamental ecological niches and species' distributional areas," Biodiversity Informatics, Vol. 2, 2005, pp. 1–10.
36. D. E. Wilson, "*Myotis carteri* LaVal, 1973," in *Mammals of Mexico* (G. Ceballos, ed.; Johns Hopkins University Press, Baltimore, 2014), pp. 785–786.
37. D. E. Wilson & R. K. LaVal, "Mammalian Species: *Myotis nigricans*," The American Society of Mammalogists, No. 39, 1974.

COMPORTAMIENTO DE PEROVSKITAS $Cs_2TiCl_xBr_{6-x}$-EVA APLICADAS EN LA REDUCCIÓN FOTOCATALÍTICA DE CO_2

Samuel Martínez Tapia[1], Edgar González Juárez[1], Miguel Angel Amado Briseño[2], Roel Alejandro Mellado Garza[1], Daniel A. Acuña Leal[1], Eduardo M. Sánchez Cervantes[1], Luciano Da Silva[2] y Arian Espinosa Roa[2*]

[1]Universidad Autónoma de Nuevo León. [2]Centro de Investigación en Química Aplicada (CIQA).
arian.espinosa@ciqa.edu.mx

RESUMEN

Las perovskitas halogenadas libres de plomo basadas en titanio han despertado un interés creciente debido a sus propiedades optoelectrónicas, su estabilidad estructural y su capacidad para modular la respuesta fotoeléctrica mediante sustituciones químicas controladas. En este trabajo se estudiaron películas híbridas $Cs_2TiCl_xBr_{6-x}$/EVA con el propósito de evaluar el efecto de la composición halogenada sobre el transporte de carga, la polarización interfacial, la fotorespuesta y la actividad fotocatalítica. Los materiales fueron sintetizados en solución y posteriormente incorporados en una matriz de etileno-acetato de vinilo (EVA) mediante drop-casting para obtener películas homogéneas y estables. La caracterización estructural y óptica confirmó la formación de fases de doble perovskita con absorción en la región visible y emisiones asociadas a estados de defecto relacionados con octaedros $[TiX_6]^{2-}$.

Los resultados de espectroscopía UV-Vis mostraron modificaciones en el borde de absorción a medida que aumentó el contenido de bromo, lo que indica cambios en la estructura electrónica y en la energía de banda prohibida. La espectroscopía de impedancia electroquímica mostró una disminución significativa de la impedancia bajo iluminación, atribuible a procesos fotoinducidos de separación y movilidad de cargas. Las composiciones mixtas exhibieron un comportamiento eléctrico más equilibrado y una respuesta capacitiva más homogénea.

Adicionalmente, las películas fueron evaluadas en procesos de reducción fotocatalítica de CO_2 a ácido fórmico y evolución de H_2 bajo irradiación visible, destacando las composiciones ricas en bromo por su mayor fotorespuesta y actividad catalítica. Los resultados posicionan a las perovskitas híbridas $Cs_2TiCl_xBr_{6-x}$/EVA como materiales prometedores para aplicaciones en la conversión de energía y en combustibles solares.

INTRODUCCIÓN

Las perovskitas halogenadas se han consolidado como materiales de gran relevancia en optoelectrónica y física aplicada debido a su intensa interacción luz-materia, su elevada capacidad de absorción y su versatilidad estructural. Particularmente, las perovskitas libres de plomo basadas en titanio representan alternativas sostenibles frente a sistemas convencionales basados en Pb, lo que permite modular las propiedades electrónicas y fotoeléctricas mediante la sustitución halogenada de Cl/Br

Los compuestos del tipo $Cs_2TiCl_xBr_{6-x}$ poseen estructuras de doble perovskita con octaedros aislados $[TiX_6]^{2-}$ que favorecen fenómenos de relajación electrónica, localización de carga y polarización interfacial. Estas características resultan especialmente atractivas para aplicaciones relacionadas con la conversión de energía, la fotocatálisis y los dispositivos fotoactivos.

Diversos estudios han demostrado que la incorporación de bromuro favorece una mayor polarizabilidad electrónica y una mejor interacción con la radiación visible, lo que incrementa la respuesta fotoeléctrica y la eficiencia fotocatalítica. Asimismo, la combinación de composiciones mixtas Cl/Br permite generar sistemas con propiedades electrónicas intermedias y mayor estabilidad

funcional.

La incorporación de estos materiales en matrices poliméricas, como la EVA, mejora la estabilidad mecánica, la homogeneidad superficial y la calidad interfacial de las películas delgadas. Este trabajo aborda la relación entre la composición halogenada, el transporte de carga y el desempeño fotocatalítico en películas híbridas libres de plomo, enfatizando su potencial para tecnologías energéticas sostenibles y aplicaciones fotoelectroquímicas avanzadas.

TEORÍA

La respuesta fotoeléctrica de las perovskitas híbridas depende directamente de la estructura electrónica y de la interacción entre los portadores de carga y los defectos cristalinos. La sustitución progresiva de Cl por Br modifica la polarizabilidad electrónica, la movilidad de los portadores y la dinámica de la transferencia de carga.

La incorporación de bromuro reduce parcialmente la energía de banda prohibida, lo que favorece una mayor absorción de luz visible y una mayor separación de pares electrón-hueco. Esto contribuye a mejorar los procesos de transferencia de carga asociados a fenómenos fotoelectroquímicos y fotocatalíticos.

La espectroscopía de impedancia electroquímica permite estudiar fenómenos dependientes de la frecuencia asociados al transporte de carga, a la resistencia interfacial y al comportamiento capacitivo. El análisis mediante diagramas de Nyquist y circuitos equivalentes facilita la interpretación de los procesos resistivos, pseudocapacitivos y difusionales presentes en películas híbridas.

La reducción fotocatalítica de CO_2 constituye una estrategia importante para la generación de combustibles solares y mitigación de emisiones contaminantes. En presencia de radiación visible, los electrones fotoinducidos participan en la reducción de CO_2 a productos de valor agregado, como ácido fórmico, mientras que los huecos favorecen reacciones de oxidación complementarias.

PARTE EXPERIMENTAL

Las perovskitas $Cs_2TiCl_xBr_{6-x}$ fueron sintetizadas mediante el método de solución utilizando $TiBr_4$, CsCl y CsBr como precursores principales. Posteriormente, los materiales fueron dispersados en tolueno y mezclados con EVA para obtener películas híbridas con aproximadamente 30 % en peso de perovskita

Las películas se depositaron sobre sustratos conductores FTO mediante drop-casting y tratamiento térmico controlado. La caracterización estructural se realizó mediante difracción de rayos X (XRD), mientras que las propiedades ópticas se estudiaron mediante espectroscopía UV-Vis y fotoluminiscencia.

La morfología superficial fue analizada mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), observándose películas relativamente homogéneas y buena dispersión de partículas dentro de la matriz polimérica. La respuesta eléctrica se evaluó mediante espectroscopía de impedancia electroquímica en la configuración FTO│film│FTO, tanto en la oscuridad como bajo iluminación visible.

También se realizaron pruebas de reducción fotocatalítica de CO_2 y evolución de H_2 bajo irradiación visible. La cuantificación de ácido fórmico se realizó mediante HPLC, mientras que la producción de hidrógeno se determinó mediante cromatografía de gases.

RESULTADOS

Los patrones de difracción confirmaron la formación de fases cristalinas correspondientes a perovskitas de doble vacante. Los espectros UV-Vis mostraron una absorción intensa entre 400 y 450 nm, mientras que las mediciones de fotoluminiscencia revelaron emisiones asociadas a estados de defecto

Las mediciones de EIS evidenciaron una disminución significativa de la impedancia bajo iluminación en todas las composiciones con perovskita, lo que indica una activación fotoinducida del transporte de carga. Las composiciones mixtas mostraron respuestas más equilibradas y una menor resistencia al transporte

La composición Cs_2TiBr_6 presentó una mayor fotorespuesta y un mejor desempeño fotocatalítico, alcanzando una producción significativa de HCOOH y H_2 bajo irradiación visible. Este comportamiento se asoció con una mayor polarizabilidad del bromuro y una separación más eficiente de las cargas fotoinducidas

El análisis morfológico mediante SEM mostró que la incorporación de EVA favorece la formación de películas homogéneas y reduce los defectos superficiales. Además, la matriz polimérica actúa como barrera protectora frente a la degradación ambiental, lo que mejora la estabilidad estructural y funcional de las películas híbridas.

CONCLUSIONES

Las películas híbridas $Cs_2TiCl_xBr_{6-x}$/EVA presentaron una respuesta fotoeléctrica dependiente de la composición halogenada, lo que demuestra que la sustitución Cl/Br regula el transporte de carga, la polarización interfacial y la dinámica de los portadores fotoinducidos. Las mediciones de EIS evidenciaron una disminución de la impedancia bajo iluminación, asociada a una mayor separación y movilidad de las cargas.

Las pruebas fotocatalíticas confirmaron la capacidad de estos materiales para promover la reducción de CO_2 a ácido fórmico y la evolución de H_2, destacando las composiciones ricas en bromo por su mayor eficiencia catalítica. El análisis estructural y superficial permitió correlacionar la composición química con las propiedades funcionales del sistema híbrido.

En conjunto, los resultados demuestran que las perovskitas híbridas libres de plomo basadas en titanio constituyen plataformas prometedoras para aplicaciones en conversión de energía, combustibles solares, fotocatálisis y dispositivos optoelectrónicos sostenibles.

BIBLIOGRAFÍA

1. A. Filippetti, A. Mattoni, “Hybrid halide perovskites for photovoltaics: Insights from first-principles calculations”, Phys. Rev. B, Vol. 89, 2014, Art. 125203.
2. J. Bisquert, Phys. Chem. Chem. Phys., Vol. 10, 2008, pp. 3175–3194.
3. J. Jamnik, J. Maier, Phys. Chem. Chem. Phys., Vol. 3, 2001, pp. 1668–1678.
4. A. H. Slavney, T. Hu, A. M. Lindenberg, H. I. Karunadasa, “A Bismuth-Halide Double Perovskite with Long Carrier Recombination Lifetime for Photovoltaic Applications”, J. Am. Chem. Soc., Vol. 138, 2016, pp. 2138–2141.
5. Y. Wang et al., “Lead-free halide perovskites for photocatalytic hydrogen evolution and CO_2 reduction”, Nano Energy, Vol. 67, 2020, Art. 104224.

EVALUACIÓN DE LA ACTIVIDAD ANTIMICROBIANA DE PROPÓLEO DE ZACATECAS SOBRE UNA CEPA ATCC DE *Staphylococcus Aureus*

María Fernanda Galindo Ramírez, Gabriela Gaytán Chávez, Alberto Rafael Cervantes Villagrana, María Isabel Chávez Ruvalcaba, Marisol Galván Valencia

Universidad Autónoma de Zacatecas
gavm001144@uaz.edu.mx

RESUMEN

La actividad antimicrobiana es una de las propiedades terapéuticas de los propóleos del mundo. Sin embargo, diferencias ambientales y de composición química influyen sobre la selectividad y potencia de los propóleos sobre las diferentes especies de microorganismos. Por ello es necesario determinar el perfil antimicrobiano de cualquier propóleo que se pretenda emplear con fines medicinales[1]. Por otro lado, *S. aureus* es una bacteria Gram positiva de importancia clínica, asociada a infecciones cutáneas, respiratorias y sistémicas, cuya creciente resistencia a los antibióticos ha impulsado la búsqueda de alternativas terapéuticas de origen natural, entre ellas los productos apícolas como el propóleo.

El objetivo del presente estudio fue evaluar el efecto de propóleo de origen Zacatecano sobre *Staphylococcus aureus*.

Las muestras de propóleo se recolectaron en el mes de enero del 2024 en un apiario ubicado en exhacienda de Jarillas en el municipio de Ojocaliente, Zacatecas (22°32'16.4"N 102°10'51.3"W). Al propóleo se le eliminó la cera antes de realizar el proceso de maceración en etanol absoluto, para posteriormente concentrarlo en un rotavapor a presión reducida. Las características físicas, organolépticas y el contenido de compuestos fenólicos y flavonoides se determinaron conforme a la NOM-003-SAG/GAN-2017. Así mismo se evaluó la actividad contra una cepa de *S. aureus* (ATCC 25923) mediante el método de difusión en agar y la técnica de Kirby-Bauer. Además, se determinó la concentración mínima inhibitoria (CMI) y mínima bactericida (CMB) mediante ensayos de microdilución en placa.

Por sus características físicas y organolépticas el propóleo utilizado se considera de calidad media ya que su aspecto es de bloques color marrón, de consistencia maleable, aroma y sabor resinosos. Su contenido de compuestos fenólicos y flavonoides fue de 278.61 ± 3.56 mg Eq de AG/ g de extracto y 50.18 ± 4.81 mg Eq de Quercetina/ g de extracto, respectivamente. El elevado contenido de estos metabolitos secundarios se relaciona estrechamente con la actividad antimicrobiana, lo cual fue confirmado, ya que discos impregnados con 16 mg del extracto de propóleo formaron halos de inhibición del crecimiento de *S. aureus* de 1.62±0.17 cm de diámetro; y las CMI y CMB determinadas fueron 4.5 μg/ml y 9.1 μg/ml, lo que indica un efecto tanto bacteriostático como bactericida.

Los resultados demuestran que el propóleo de Zacatecas posee eficacia antimicrobiana significativa contra *Staphylococcus aureus*, posiblemente relacionado con su contenido de compuestos fenólicos y flavonoides. Estos compuestos a través de diversos mecanismos, como la alteración de la integridad de la membrana celular bacteriana, la inhibición de enzimas esenciales y la inducción de estrés oxidativo, son responsables del efecto bactericida[1].

Palabras clave: productos naturales, propóleo, extracto etanólico, actividad antimicrobiana, *S. aureus*.

INTRODUCCIÓN

El propóleo es una mezcla compleja a base de cera, polen, gomas, resinas, mucílagos, aceites esenciales, y metabolitos primarios y secundarios que las abejas elaboran a partir de lo que recolectan de las plantas [1]. Las abejas utilizan el propóleo para sellar fisuras en la colmena, como agente antiséptico para eliminar microorganismos patógenos e intrusos, e incluso para embalsamar organismos que hayan muerto dentro de la colmena. Por ello es que el propóleo se ha utilizado en la medicina popular durante siglos, siendo su uso más extendido en el tratamiento de enfermedades causadas por microorganismos [2]. Si bien en general la composición de los propóleos es relativamente similar: 50% resinas, 30% ceras, 10% aceites esenciales, 5% polen, y 5% metabolitos primarios y secundarios, cada propóleo tiene una composición fitoquímica particular (se han reportado más de 300 componentes), que depende de la ubicación geográfica de las colmenas, la estación del año y la fuente vegetal de la que recolectan los componentes, incluso de la especie de abeja [1,3]. Esto hace que las propiedades medicinales de los propóleos varíen, teniendo diferencias en su actividad, potencia y eficacia [4].

El propóleo muestra efectos sinérgicos con los antibióticos convencionales, potenciando su eficacia contra cepas resistentes a los fármacos al aumentar la permeabilidad de la membrana e inhibir las enzimas de resistencia [5]. Esto sugiere la posibilidad de reducir las dosis de antibióticos y sus efectos secundarios, aunque aún se requiere validación clínica para optimizar dichas combinaciones [6,7]. Sin embargo, la aplicación terapéutica del propóleo se enfrenta a importantes desafíos. Su composición química varía según el origen geográfico, la fuente botánica y la especie de abeja, lo que dificulta su estandarización. Los métodos de extracción también afectan el rendimiento y la potencia de los compuestos activos [3]. Los datos clínicos son limitados, especialmente en lo que respecta a la seguridad a largo plazo en personas inmunocomprometidas y los riesgos de reacciones alérgicas. Además, la farmacocinética y las dianas moleculares del propóleo aún no se comprenden completamente, lo que subraya la necesidad de una investigación rigurosa para estandarizar las formulaciones y definir protocolos terapéuticos eficaces y seguros [8].

TEORÍA

Actividad antibacterial del propóleo

El propóleo es una sustancia resinosa producida por las abejas a partir de exudados vegetales, los cuales son mezclados con cera y secreciones salivales. Su función principal en la colmena es actuar como agente protector frente a microorganismos, contribuyendo a mantener condiciones asépticas en el interior [1].

Diversos estudios han demostrado que la actividad biológica del propóleo está directamente relacionada con la composición de metabolitos secundarios, la cual varía según el origen geográfico y la flora circundante [3]. Desde el punto de vista químico, el propóleo contiene compuestos fenólicos, flavonoides, terpenos y ácidos aromáticos, los cuales son responsables de sus diversas propiedades biológicas particularmente su efecto antimicrobiano [2]. La actividad antimicrobiana del propóleo ha sido ampliamente documentada frente a bacterias, hongos y virus. De manera general se ha observado que propóleos con mayor contenido de flavonoides y fenoles presentan una mayor actividad antimicrobiana, los cuales pueden ejercer efectos bacteriostáticos y bactericidas mediante distintos mecanismos [7] . Entre estos mecanismos se incluyen la alteración de la permeabilidad de la membrana celular, la interferencia en procesos enzimáticos y la inhibición de la síntesis de proteínas y ácidos nucleicos. Además, se ha reportado que estos compuestos pueden modificar los canales iónicos bacterianos, afectando funciones esenciales como la motilidad y la viabilidad celular [5].

En términos microbiológicos, el propóleo ha demostrado mayor eficacia frente a bacterias Gram positivas en comparación con bacterias Gram negativas [9]. Esto se debe, a la pared simple y gruesa rica en peptidoglicanos y ácidos teicoicos de las bacterias Gram positivas que las hace más susceptibles a la acción de antibióticos y compuestos fenólicos. En particular, diversos estudios han evidenciado mediante técnicas como difusión en agar y determinación de concentración mínima

inhibitoria (CMI) una notable actividad antimicrobiana del propóleo frente a *Staphylococcus aureus* [9, 10].

Staphylococcus aureus es una bacteria Gram positiva de gran importancia clínica, asociada a una amplia variedad de infecciones que van desde afecciones cutáneas hasta enfermedades sistémicas graves. Su relevancia radica no solo en su capacidad patogénica, sino también en su habilidad para desarrollar resistencia a múltiples antibióticos, lo que ha motivado la búsqueda de alternativas terapéuticas, incluyendo productos de origen natural como el propóleo [11]. En este contexto, el uso de cepas de referencia ATCC (American Type Culture Collection) en estudios microbiológicos permite garantizar la reproducibilidad y validez de los resultados experimentales. Estas cepas estandarizadas son ampliamente utilizadas para evaluar la actividad antimicrobiana de compuestos naturales, incluyendo extractos de propóleo. Dado el incremento global de la resistencia antimicrobiana y la necesidad de desarrollar nuevas estrategias terapéuticas, el estudio de productos naturales como el propóleo adquiere gran relevancia. En particular, la evaluación del propóleo de zonas poco estudiadas como es el caso del estado de Zacatecas, representa una oportunidad para validar su actividad antibacterial, e identificar los compuestos bioactivos asociados al efecto sobre *Staphylococcus aureus*, y la comparación de su potencia respecto de otros propóleos.

PARTE EXPERIMENTAL

Preparación del extracto de propóleo

El propóleo se recolectó en un lote único en el mes de enero del 2024 en un apiario ubicado en exhacienda de Jarillas en el municipio de Ojocaliente, Zacatecas, México (22°32'16.4"N 102°10'51.3"W). Las muestras en bruto se limpiaron manualmente para eliminar impurezas visibles como restos vegetales y partículas extrañas, se conservó en recipientes herméticos, protegidos de la luz, y a −80 °C hasta su uso. Para la preparación del extracto etanólico de propóleo (EEP), a las muestras se les eliminó la cera mediante extracción con hexanos en sistema Soxhlet. El material libre de cera se secó en estufa a temperatura inferior a 50 °C y posteriormente se maceró en etanol absoluto en una proporción 1:10 (p/v). La mezcla fue sometida a ultrasonido (300 W, 25 °C) durante 30 minutos y posteriormente se mantuvo en agitación constante durante 24 h a temperatura ambiente. El proceso de extracción se repitió durante 3 ocasiones utilizando etanol fresco. Los sobrenadantes se juntaban y filtraban repetidamente antes de concentrar a presión reducida mediante rotavapor y secado en estufa (<50 °C) hasta la eliminación total del solvente. El extracto seco obtenido se almacenó en refrigeración hasta su uso.

Caracterización fitoquímica del extracto

La caracterización física, fitoquímica y antimicrobiana del propóleo se basó en las especificaciones de la NOM-003-SAG/GAN-2017 que establece los requisitos que deben cumplir los propóleos y sus extractos para su procesamiento y comercialización en el país. Para la descripción física se considera el color, aroma, sabor, y consistencia a temperatura ambiente del propóleo en bruto. La cuantificación de compuestos fenólicos totales se realiza mediante el método de Folin-Ciocalteu. Se prepara una curva de calibración con ácido gálico a concentraciones de 0.00625 a 0.2 mg/ml, y una solución del EEP en etanol a concentración de 0.05 mg/ml. Las soluciones del estándar o el EEP se mezclan con el reactivo de Folín-Ciocalteu y con Na_2CO_3 al 20%. Los tubos se incuban 2h a T.A. y se lee la absorbancia a 760 nm. El contenido de compuestos fenólicos en el EEP se expresa como mg equivalentes de ácido gálico/ g de extracto. El contenido de flavonoides se cuantifica con el método colorimétrico del $AlCl_3$ empleando como referencia el estándar de quercetina. Se prepara una curva de calibración a concentraciones de 1 a 100 µg/ml y el EEP a 0.05 mg/ml. El EEP o las soluciones del estándar se mezclan con el reactivo de $AlCl_3$ al 2%, se incuban por 10 minutos y se lee la absorbancia a 415 nm. El contenido de flavonoides se expresa como mg equivalentes de quercetina/ g de extracto.

Evaluación de la actividad antimicrobiana contra *S. aureus*

Se empleó la cepa de referencia *Staphylococcus aureus* ATCC 25923, ampliamente utilizada como control de calidad en pruebas de susceptibilidad antimicrobiana. La cepa fue reactivada en caldo

Mueller-Hinton (MH) e incubada a 37 °C durante 24 h. La suspensión bacteriana se ajustó a una turbidez equivalente al estándar 0.5 de McFarland (≈1–5 × 10^6 UFC/mL), verificada mediante espectrofotometría a 625 nm.

La actividad antimicrobiana del EEP se evaluó mediante el método de difusión en disco (Kirby-Bauer), siguiendo lineamientos del Clinical and Laboratory Standards Institute (CLSI). Cajas Petri con agar Mueller-Hinton suplementado se sembraron con el inóculo ajustado utilizando un hisopo estéril. Discos de 5 mm de diámetro (papel Whatman No. 5) previamente esterilizados, fueron impregnados con 10 µL del EEP a una concentración de 160 mg/mL (equivalente a 16 mg por disco), se dejaron secar durante 24 h, y posteriormente se colocaron sobre la superficie del agar inoculado. Como control positivo se emplearon discos impregnados con ciprofloxacino 5 µl de una solución de ciprofloxacino a una concentración de 5 mg/ml (equivalente 25 µg por disco) y como control negativo discos impregnados con etanol absoluto. Las placas se incubaron a 37 °C durante 24 h para luego medir el diámetro de los halos de inhibición con un vernier digital.

El método de microdilución en caldo se desarrolló en una placa de 96 pocillos para establecer la concentración mínima inhibitoria (CMI) y mínima bactericida (CMB) del EEP. Se preparó una solución madre del EEP a partir de la que se obtuvieron por diluciones seriadas concentraciones finales de 145.5 a 0.56 µg/mL. En cada pocillo se colocaban 90 µL de caldo Mueller-Hinton, 10 µL de cada dilución del extracto, y 10 µL de la suspensión bacteriana. Se utilizó como control positivo al ciprofloxacino, como control negativo el caldo nutritivo, y como control del vehículo etanol absoluto. Las placas se incubaron a 37 °C durante 24 h antes de su observación. La CMI se definió como la menor concentración del extracto que inhibió visiblemente el crecimiento bacteriano (ausencia de turbidez). Para la determinación de la CMB, se tomaron alícuotas de los pocillos sin crecimiento visible y se sembraron en placas con agar Mueller-Hinton. Las placas se incubaron a 37 °C durante 24 h y la CMB se definió como la concentración más baja del extracto en la que no se observó crecimiento bacteriano en el medio sólido.

Análisis estadístico

Todos los ensayos se realizaron por triplicado y los resultados se expresan como media ± desviación estándar. Las diferencias entre tratamientos se analizaron mediante una prueba t de student considerando un nivel de significancia cuando $p < 0.05$.

RESULTADOS

Caracterización fitoquímica del extracto

El entorno geográfico y ambiental determina la composición química del propóleo, y en consecuencia sus propiedades físicas y biológicas. Disponer de información geográfica y contextual del sitio donde se recolecta es requisito y componente clave en las comparaciones del análisis químico, microbiológico y farmacológico entre los propóleos [9]. Los diferentes climas y ecosistemas que existen en México influyen en las características físicas y organolépticas de los propóleos. Con base en semejanzas de las zonas geográficas el país se divide en cinco regiones apícolas: Región Norte, Región Golfo, Región Costa del Pacífico, Región Altiplano, y Región Península de Yucatán [12]. El estado de Zacatecas forma parte de la Región Norte que se caracteriza por un clima seco semidesértico, con lluvias escasas y temperaturas extremas. En invierno, las temperaturas pueden descender considerablemente, mientras que en verano el calor es intenso. La región cuenta con vegetación adaptada a la aridez, como mezquite, huizache, nopal, lechuguilla y guayule, con presencia de pastizales y arbustos resistentes a la sequía (Comisión Nacional del Agua. (s.f.). *Atlas Climático de México*).

El propóleo de Zacatecas utilizado en este estudio tiene una apariencia de bloques irregulares de color verde-pardo con incrustaciones de color amarillo paja, y leve diferenciación del color exterior e interior al corte. La uniformidad de esta tonalidad, tanto en superficie como en cortes internos, indica una composición relativamente estable y heterogénea. Su aroma se percibe como intensamente resinoso, típico de resinas vegetales y madera, concordante con un sabor resinoso amargo intenso y persistente. En cuanto a su consistencia, esta es maleable a temperatura ambiente. En la Figura 1

se presenta la apariencia macroscópica y microscópica del propóleo en estudio, así como del extractos en etanol que se preparó ocn este extracto (EEP). Considerando la apariencia física y las propiedades organolépticas, Bankova y cols. (2016) proponen categorizar la calidad de los propóleos, de esta manera el propóleo de Zacatecas se consideraría que cuenta con una calidad de media a buena.

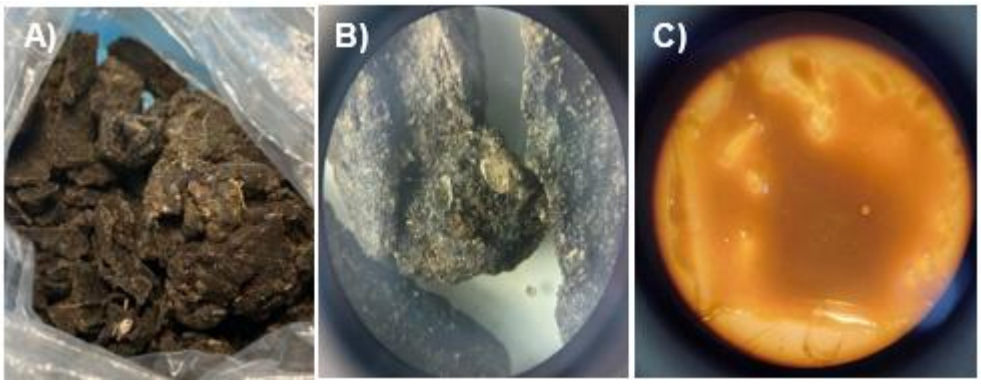


Figura 1. Imágenes representativas de la apariencia del propóleo de Zacatecas y del EEP. A) imagen macroscópica del propóleo en greña, se aprecia la homogeneidad en su coloración externa. B) imagen microscópica al corte de un bloque de propóleo, se aprecian incrustaciones de material en tonalidades amarillo paja. Tomada con objetivo 10x. C) imagen microscópica del EEP seco, se aprecia una coloración amarillo-café brillante. Tomada con un objetivo 10x.

El entorno geográfico y ambiental determina la composición fisicoquímica del propóleo y, en consecuencia, sus propiedades biológicas. Diversos estudios han demostrado que la composición química del propóleo depende directamente de la flora local y de las condiciones ambientales, lo que genera una alta variabilidad entre regiones [1,13]. En este sentido, los propóleos provenientes de zonas áridas o semiáridas, como el norte de México, tienden a presentar perfiles ricos en compuestos fenólicos y flavonoides, derivados de especies vegetales adaptadas al estrés hídrico, lo que se asocia con una mayor actividad biológica [3, 14].

La NOM-003-SAG/GAN-2017 y en diversos trabajos científicos se plantea que la calidad de los propóleos también debe valorarse con base a la presencia y concentración de compuestos bioactivos como fenoles y flavonoides, reconocidos por su capacidad antimicrobiana, antiinflamatoria, y antioxidante. Lo que los convierte en marcadores relevantes para evaluar la calidad y eficacia de los extractos de propóleo.

Las condiciones de los ensayos para fenoles y flavonoides se describen en la NOM-033-SAG/GAN-2017. Para valorar el contenido de compuestos fenólicos en el EEP se empleó el método de Folin-Ciocalteu determinando una cantidad de 278.61±3.56 mg Equivalentes de AG/ g de extracto, es decir, el 27.86±0.36 % del peso seco del EEP corresponde a compuestos fenólicos. Además, se cuantificó el contenido de flavonoides en el EEP mediante el ensayo del $AlCl_3$, el cual se basa en la formación de complejos de coordinación, uno de ellos entre el cation Al (III) y los grupos funcionales cetona del C4 e hidroxilos del C3 o C5 de los flavonoles, el cual es estable al ácido; y un segundo complejo de coordinación en el anillo B, lábil al ácido, entre el Al (III) y dos grupos hidroxilo vecinos. Modificaciones al método original como la incorporación de soluciones de $NaNO_2$ e NaOH genera otros derivados con máximos de absorbancia alrededor de los 500 nm. En nuestro estudio el contenido de flavonoides en el EEP fue de 50.18±4.81 mg Equivalentes de Quercetina/ g de extracto, representando el 5.02±0.48 % en relación al peso del EEP. Las curvas de calibración para ambos ensayos se presentan en la Figura 2. En la NOM-003-SAG/GAN-2017 se especifica para los propóleos un mínimo de compuestos fenólicos y flavonoides del 5% (p/p) y 0.5% (p/p), respectivamente. Por lo tanto, el propóleo de Zacatecas utilizado en este estudio cumple este requisito.

Asimismo, las condiciones climáticas extremas, como las presentes en Zacatecas, pueden inducir a las plantas a sintetizar mayores cantidades de compuestos fenólicos como mecanismo de defensa, lo cual influye directamente en la calidad y potencial farmacológico del propóleo producido en esta región [3]. Por ello, disponer de información geográfica y contextual es un requisito clave en la comparación de análisis químicos, microbiológicos y farmacológicos entre diferentes muestras de propóleo, ya que permite interpretar de manera más precisa las variaciones observadas en su composición y actividad biológica.

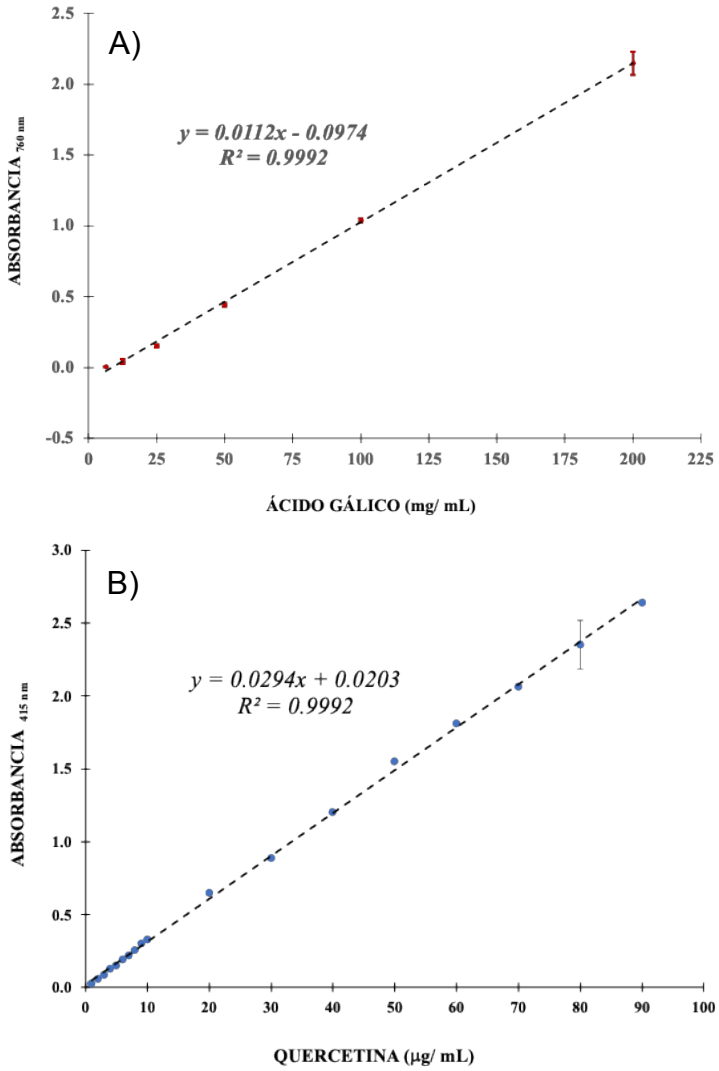


Figura 2. Contenido de compuestos fenólicos y flavonoides totales en el EEP. Se presentan las curvas de calibración con los estándares de ácido gálico y quercetina, a partir de las cuales se cuantificó el contenido de A) compuestos fenólicos (278.61±3.56 mg Eq de AG/ g) en el EEP, y B) flavonoides (50.18±4.81 mg Eq de Quercetina/ g) en el EEP. Cada punto en los gráficos representa la media±DE de tres ensayos independientes, y se incluye la ecuación de ajuste.

En el contexto mexicano, se ha reportado que propóleos con mayor contenido de flavonoides y compuestos fenólicos presentan una actividad antimicrobiana más elevada, particularmente frente a bacterias como *Staphylococcus aureus* [15]. Esta relación entre composición química y bioactividad también ha sido ampliamente documentada, destacando el papel de los metabolitos secundarios en [16]la defensa vegetal y su transferencia al propóleo [16].

Evaluación de la sensibilidad de *S. aureus* al EEP

El EEP proveniente de Zacatecas mostró actividad antimicrobiana frente a *Staphylococcus aureus* (ATCC 25923), evidenciada por la formación de halos de inhibición en el ensayo de difusión en agar (Figura 3). Los ensayos mostraron halos de inhibición de 1.62±0.17 cm de diámetro alrededor de los discos impregnados con el EEP, lo que indica un efecto inhibitorio sobre el crecimiento bacteriano. En comparación, el control positivo (ciprofloxacino) presentó halos de inhibición de 2.91±0.16 cm de diámetro; mientras que tanto en el control del vehículo y el control negativo (sin ningún tratamiento) se observó desarrollo bacteriano. El análisis estadístico de los resultados que se presenta en la misma Figura 3B, donde se señala la diferencia estadísticamente significativa entre la media±DE de los halos de inhibición de crecimiento inducidos con el EEP y el ciprofloxacino ($p<0.0001$) evidenciando la mayor potencia del ciprofloxacino para inhibir el crecimiento de *S. aureus*. Obviamente la diferencia fue altamente significativas cuando se comparan los controles de desarrollo y del vehículo con ambos tratamientos ($p<0.0001$).

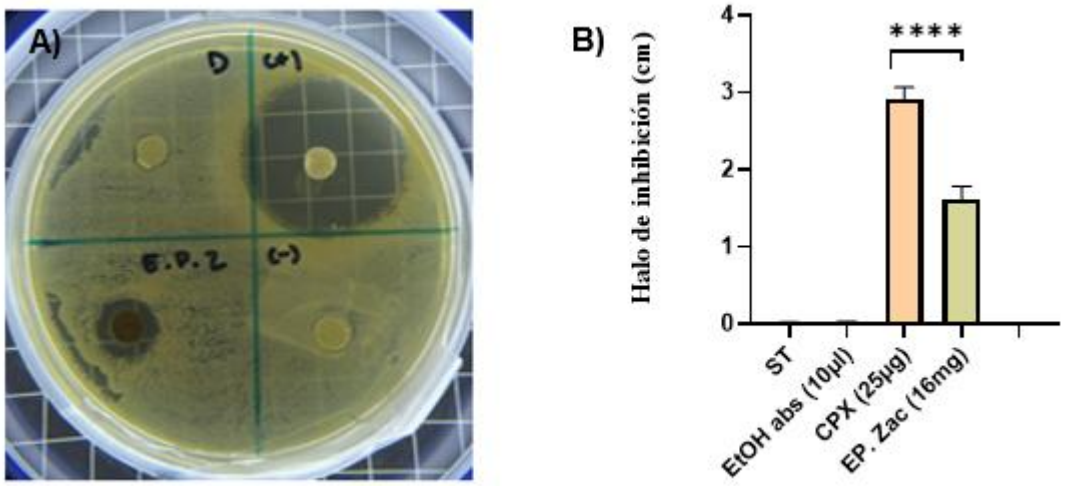


Figura 3. Inhibición del crecimiento en placa de *S. aureus* con el EEP de Zacatecas. A) Imagen representativa de los halos de inhibición observados. En el sentido de las manecillas del reloj: cuadrante superior derecho se encuentra el control positivo (ciprofloxacino 25 µg), el control del vehículo (10 µl de etanol), el EEP (16 mg), y el control de desarrollo. B) Análisis comparativo de la media de los halos de inhibición entre tratamientos. Cada barra representa el promedio±DE de 3 experimentos independientes, y las diferencias estadísticas entre el tratamiento con ciprofloxacino (CPX) y el EEP se estableció mediante una prueba t-student. ****$p<0.0001$

Utilizando el ensayo de microdilución en placa se corroboró el efecto bacteriostático y bactericida del EEP sobre *Staphylococcus aureus*. Se observó una disminución progresiva del crecimiento bacteriano conforme aumentaba la concentración del extracto desde 0.56 a 145.5 µg/ml. La CMI se determinó como la menor concentración en la que no se observó turbidez en el medio, indicando inhibición del crecimiento bacteriano, siendo esta de 4.5 µg/ml. Además, el EEP mostró efecto bactericida frente a *Staphylococcus aureus,* así al tomar una alícuota de los pocillos con una concentración mayor a la CMI y sembrarla en agar Mueller-Hinton, se determinó la CMB en un valor de 9.1 µg/ml. En contraste, el control positivo (ciprofloxacino) mostró valores de la CMI de 1.0 µg/mL y CMB de 2.0 µg/ml; mientras que los controles negativos confirmaron la viabilidad del microorganismo en ausencia de los tratamientos.

El análisis estadístico mostró que el extracto etanólico de propóleo de Zacatecas produjo un efecto antimicrobiano significativo frente a *S. aureus* ATCC 25923 en comparación con el control negativo (etanol), observándose diferencias estadísticamente significativas ($p< 0.001$).

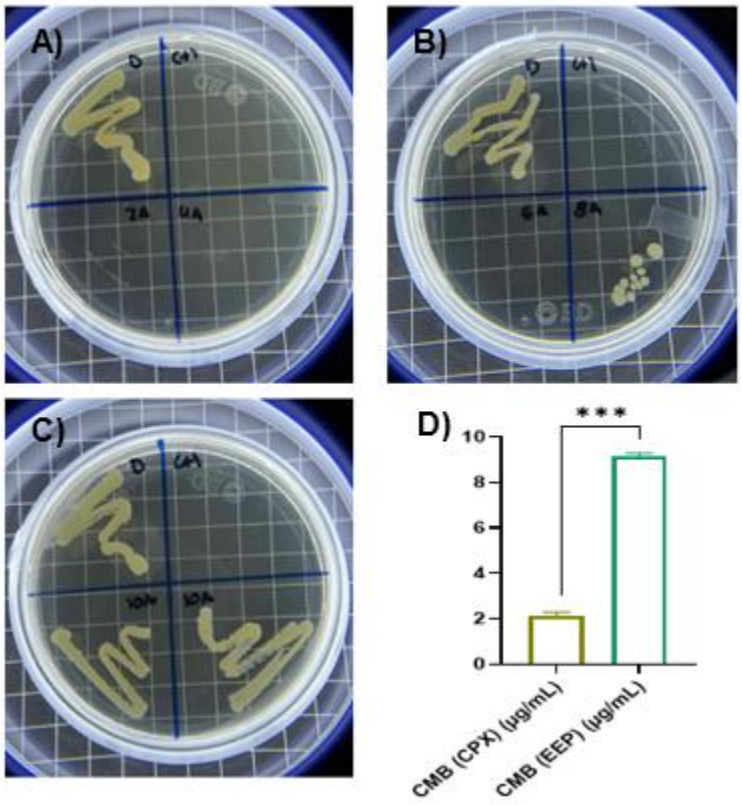


Figura 4. Cuantificación de la CMB del EEP utilizando la técnica de microdilución en caldo. En las imágenes de A) a C) en el cuadrante superior izquierdo se sembró una alícuota del pocillo que solo contenía la suspensión bacteriana y el caldo nutritivo (control de desarrollo), y en el cuadrante superior derecho se sembró una alícuota del pocillo que contenía ciprofloxacino a concentración de 2 µg/ml (CMB del ciprofloxacino). En los cuadrantes inferiores izquierdo y derecho se sembraron alícuotas de los pocillos que contenían el EEP a concentraciones de A) 145.5 y 36.4 µg/ml, B) 9.1 y 2.3 µg/ml, y C) 0.56 µg/ml por duplicado. En las imágenes se aprecia el efecto bactericida a partir de la concentración de 9.1 µg/ml. D) análisis estadístico comparativo de las CMB entre el antibiótico ciprofloxacino y el EEP, ***$p < 0.001$.

CONCLUSIONES

El EEP de Zacatecas demostró una actividad antimicrobiana significativa frente a la cepa ATCC 25923 de *Staphylococcus aureus*, evidenciada tanto por la formación de halos de inhibición en el ensayo de difusión en agar como por su capacidad para inhibir el crecimiento bacteriano y ejercer un efecto bactericida en pruebas de microdilución. La respuesta observada fue dependiente de la concentración, lo que sugiere una relación directa entre la cantidad de compuestos bioactivos presentes en el extracto y su eficacia antimicrobiana.

Estos resultados pueden estar asociados al alto contenido de compuestos fenólicos y flavonoides característicos del propóleo de esta región, los cuales han sido ampliamente relacionados con mecanismos de acción como la alteración de la membrana celular bacteriana y la inhibición de procesos metabólicos esenciales. En comparación con otros extractos evaluados en condiciones similares, el propóleo de Zacatecas destacó por su mayor capacidad inhibitoria, lo que resalta la influencia del origen geográfico en la actividad biológica de este producto natural.

En conjunto, los hallazgos obtenidos respaldan el potencial del propóleo de Zacatecas como una alternativa natural prometedora para el desarrollo de agentes antimicrobianos, particularmente frente a bacterias Gram positivas de relevancia clínica. No obstante, se requieren estudios adicionales que permitan aislar e identificar los compuestos responsables de esta actividad, así como evaluar su eficacia en modelos in vivo y su posible aplicación en formulaciones farmacéuticas o terapéuticas.

BIBLIOGRAFÍA

1. V. Bankova, M. Popova, B. Trusheva. “Propolis volatile compounds: chemical diversity and biological activity: a review”. Chemistry Central Journal., Vol. 8, 28, 2014, pp. 1-8
2. A. Rana, M. R. C. Sobti. “Anti-bacterial Properties of Propolis: A Comprehensive Review”. Curr. Microbiol., Vol 82, 479, 2025, pp. 1-23
3. D. Kasote, V. Bankova, A.M. Viljoen. “Propolis: chemical diversity and challenges in quality control”. Phytochem. Rev. Vol 21, 2022, pp.1887–1911
4. F. Nainu, A. Masyita, M. A. Bahar, M. Raihan, S. R. Prova, S. Mitra, T.B. Emran, J. Simal-Gandara. “Pharmaceutical Prospects of Bee Products: Special Focus on Anticancer, Antibacterial, Antiviral, and Antiparasitic Properties”. Antibiotics, Vol 10, 822, 2021, pp. 1-37
5. S. Hossain, M. Yousaf, Y. Liu, D. Chang, X. Zhou. “An Overview of the Evidence and Mechanism of Drug-Herb Interactions Between Propolis and Pharmaceutical Drugs”. Front Pharmacol., Vol 13, 876183, 2022, pp. 1-24
6. Mohammed Saad Almuhayawi. “Propolis as a novel antibacterial agent”. Saudi J. Biol. Sci. Vol. 27, 11, 2020, pp. 3079-3086
7. I. Przybyłek, T.M. Karpiński. “Antibacterial Properties of Propolis”. Molecules, Vol. 24, 2047, 2019, pp. 1-17
8. A. Salatino. “Perspectives for Uses of Propolis in Therapy against Infectious Diseases”. Molecules, Vol. 27, 14, 2022, pp. 4594
9. G. Albanese, A. I. Giurgiu, O. Bobis, A. C. Urcan, S. Botezan, V. Bonta, T. N. Ternar, C. Pas, M. Iorizzo, A. De Cristofaro, E. Caprio, D. S. Dezmirean. “Functional and Antimicrobial Properties of Propolis from Different Areas of Romania”. Appl. Sci. Vol. 15, 898, 2025, pp. 1-29
10. B. Rodríguez Pérez, M. M. Canales Martínez, J. G. Penieres Carrillo, T. A. Cruz Sánchez. “Composición química, propiedades antioxidantes y actividad antimicrobiana de propóleos mexicanos”. Acta Universitaria, Vol. 30, e2435, 2020, pp.1–30.
11. M. R. Bennett, I. P. Thomsen. “Epidemiological and Clinical Evidence for the Role of Toxins in *S. aureus* Human Disease”. Toxins, Vol. 12, 408, 2020, pp. 1-19
12. Secretaría de Agricultura y Desarrollo Rural. Propóleos [Internet]. www.gob.mx; 30/abril/2026 [fecha de consulta]. Disponible en: https://atlas-abejas.agricultura.gob.mx/cap4.html#Referencias:
13. L. Šturm, N. Poklar Ulrih. ¨Advances in the Propolis Chemical Composition between 2013 and 2018: A Review¨. eFood, Vol. 1, 1, 2020, pp. 24-37
14. R. D. Vargas-Sánchez, M. C. Peñalba-Garmendia, J. J. Sánchez-Escalante, G. R. Torrescano-Urrutia, A. Sánchez-Escalante. “Pollen profile of propolis produced on the eastern edge of the Sonoran Desert in central Sonora, Mexico”. Acta Botanica Mexicana, 114, 2016, pp. 69-86
15. R. D. Vargas-Sánchez, A. Sánchez-Escalante, B. M. Torres-Martínez, R. R. Sotelo-Mundo, G. R. Torrescano-Urrutia. “Mesquite propolis: An antioxidant and antibacterial preservative for pork meat”. Ecosist. Recur. Agropec. Vol. 12, 3, 2025, pp. e4020
16. J. M. Sforcin. Biological properties and therapeutic applications of propolis. Phytother. Res., Vol. 30, 6, 2016, pp. 894–905.

DETECCIÓN CUALITATIVA DEL IÓN SULFATO EN PRODUCTOS DE HIGIENE PERSONAL Y ASEO DOMÉSTICO

Sonia Marlen Fuentes[1], María de Jesús Santa Gutiérrez Ponce[2]

[1]Licenciatura en Ciencias Químicas. [2]Instituto de Química Aplicada.Universidad del Papaloapan.
mgutierrez@unpa.edu.mx

RESUMEN

Los tensioactivos aniónicos, como el Lauril Sulfato de Sodio (SLS), son ampliamente utilizados en productos de higiene personal y aseo doméstico debido a su capacidad para disminuir la tensión superficial, favorecer la formación de espuma y remover grasas y suciedad. Sin embargo, la descarga continua de estos compuestos en aguas residuales puede generar efectos adversos en los ecosistemas acuáticos. En este trabajo se realizó la detección cualitativa del ion sulfato (SO_4^{2-}) presente en diversos productos comerciales mediante ensayos de precipitación a microescala y espectroscopía infrarroja (IR). La identificación se fundamentó en la formación de sulfato de bario insoluble tras la reacción del ion sulfato con cloruro de bario en medio ácido y confirmación por calentamiento a 100 °C. Posteriormente, las muestras positivas fueron analizadas por espectroscopía IR para confirmar la presencia de grupos sulfato mediante bandas características en la región de 983–1105 cm^{-1}. Los resultados permitieron diferenciar productos que contienen compuestos sulfatados de aquellos que carecen de ellos o los presentan en concentraciones muy bajas. El método empleado resultó ser sencillo, económico y adecuado para el control de calidad de productos comerciales, así como para aplicaciones en monitoreo ambiental bajo principios de química verde.

INTRODUCCIÓN

Los tensioactivos aniónicos constituyen uno de los grupos de compuestos químicos más utilizados en formulaciones de productos de higiene personal y limpieza doméstica. Entre ellos destaca el Lauril Sulfato de Sodio (SLS), un agente detergente ampliamente empleado debido a sus propiedades espumantes, humectantes y emulsificantes. Estos compuestos mejoran la eficiencia de limpieza al reducir la tensión superficial del agua y facilitar la remoción de grasas y partículas adheridas a diferentes superficies.

A pesar de sus ventajas tecnológicas, el uso masivo de tensioactivos sulfatados ha generado preocupación debido a su liberación continua al ambiente. Una vez descargados en cuerpos de agua, estos compuestos pueden alterar procesos biológicos y afectar a los organismos acuáticos. Por ello, resulta importante desarrollar métodos analíticos sencillos que permitan detectar e identificar la presencia de compuestos sulfatados en productos comerciales, facilitando su monitoreo y evaluación.

Por su parte, la química verde promueve el diseño y la aplicación de métodos químicos que reduzcan o eliminen el uso y la generación de sustancias peligrosas, minimizando el impacto ambiental de las actividades de laboratorio. En este contexto, los experimentos a microescala constituyen una alternativa sostenible a los procedimientos convencionales, ya que emplean cantidades muy pequeñas de reactivos y muestras, disminuyendo la generación de residuos, los riesgos asociados a la manipulación de sustancias químicas y el consumo de energía. De esta manera, el procedimiento del presente trabajo se desarrolló en concordancia con varios principios de la química verde, entre ellos la prevención de residuos, la reducción en el uso de sustancias peligrosas, la eficiencia energética y el empleo de métodos analíticos que requieren cantidades mínimas de muestra y ningún pretratamiento[1,2].

La detección de sulfatos puede realizarse mediante reacciones de precipitación basadas en la formación de sulfato de bario ($BaSO_4$), una sal altamente insoluble que aparece como un precipitado blanco en presencia de iones sulfato. Esta reacción constituye una prueba clásica de análisis cualitativo ampliamente utilizada en laboratorios químicos; además, se hizo la prueba de adsorción del permanganato de potasio en la superficie del sólido. Complementariamente, la espectroscopía infrarroja permite identificar grupos funcionales específicos mediante el análisis de bandas de absorción características, proporcionando una herramienta adicional para confirmar la presencia de compuestos sulfatados[3,4].

El objetivo de este trabajo fue detectar cualitativamente la presencia del ion sulfato en productos de higiene personal y aseo doméstico mediante ensayos de precipitación a microescala y espectroscopía infrarroja, evaluando la utilidad de estas técnicas para aplicaciones de control de calidad y análisis químico.

TEORÍA

Los productos de higiene personal y de limpieza doméstica contienen una amplia variedad de compuestos químicos que contribuyen a sus propiedades de limpieza, formación de espuma y estabilidad. Entre ellos se encuentran los compuestos sulfatados, ampliamente utilizados como ingredientes activos en detergentes, champús, pastas dentales y otros productos de uso cotidiano. Asimismo, algunas formulaciones pueden contener iones sulfato como impurezas residuales derivadas de los procesos de fabricación o degradación de estos compuestos. Debido a su amplia distribución y posible liberación al ambiente, resulta de interés contar con métodos sencillos que permitan identificar la presencia de sulfatos y especies químicas relacionadas en productos comerciales.

La detección cualitativa del ion sulfato se basa en la reacción entre el ion sulfato (proveniente del sulfato de sodio) y el ion bario para formar sulfato de bario insoluble:

$$SO_4^{2-}(aq) + Ba^{2+}(aq) \rightarrow BaSO_4(s)$$

La formación de un precipitado blanco indica la presencia de sulfatos en la muestra analizada. Debido a la muy baja solubilidad del sulfato de bario, este compuesto permanece sólido incluso tras el calentamiento a 100 °C. Por este motivo, esta prueba presenta una alta sensibilidad para la identificación cualitativa del ion sulfato[3,4].

Sin embargo, aunque la reacción utilizada es altamente selectiva, existe la posibilidad de que algunos componentes presentes en las formulaciones comerciales interfieran con la observación del precipitado o generen resultados ambiguos. Por ello, se propuso analizar mediante espectroscopía infrarroja los precipitados obtenidos, con el fin de confirmar la presencia del ion sulfato a través de sus bandas características de absorción.

Por su parte, la Espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier con Reflectancia Total Atenuada (del inglés Fourier Transform Infrared Spectroscopy–Attenuated Total Reflectance, FTIR-ATR) es una técnica analítica que permite identificar compuestos químicos a partir de la absorción de radiación infrarroja por sus enlaces químicos. La modalidad ATR facilita el análisis directo de sólidos, líquidos o pastas con mínima preparación de muestra, obteniendo información sobre los grupos funcionales presentes en el material. Los grupos sulfato presentan bandas características de absorción en la región comprendida aproximadamente entre 983 y 1105 cm^{-1}, correspondientes a vibraciones de estiramiento de los enlaces S–O[5-7].

Como prueba complementaria de confirmación, el precipitado de sulfato de bario obtenido puede tratarse con una solución diluida de permanganato de potasio. Debido a fenómenos de adsorción o coprecipitación, los cristales de sulfato de bario pueden adquirir una coloración rosada o violeta característica. Posteriormente, la adición de peróxido de hidrógeno permite reducir el exceso de permanganato presente en la solución, facilitando la observación de la coloración asociada al precipitado. Esta prueba se emplea como evidencia adicional de la presencia del ion sulfato[8].

PARTE EXPERIMENTAL

Materiales y reactivos

Se emplearon soluciones de sulfato de sodio al 1 % (m/v), cloruro de bario al 1 % (m/v), ácido perclórico al 50 % (v/v), hidróxido de sodio al 1 % (m/v), peróxido de hidrógeno al 3 % (v/v) y permanganato de potasio al 1 % (m/v). Placas de microescala, pipeta volumétrica de 1000 µL, tubos de ensayo de 5 mL, espátula, alcohol etílico.

Muestras analizadas

Las muestras evaluadas fueron: **A-1**, control positivo (sulfato de sodio); **A-2**, jabón líquido para trastes; **A-3**, champú anticaspa; **A-4**, pasta dental; **A-5**, champú convencional; **A-6**, champú natural anticaspa; **A-7**, jabón líquido para cuerpo libre de sulfatos; **A-8**, limpiador de piso líquido; y **A-9**, limpiador multiusos líquido. Estas claves se utilizaron para identificar las muestras durante el desarrollo experimental y el análisis de resultados.

A. Procedimiento de precipitación en medio ácido (HCl)

Se colocaron de 0.5 a 1 mL de cada muestra en una placa de microescala y se acidificó el medio con HCl, verificando con papel tornasol que se tuviera un medio francamente ácido. Posteriormente, se añadieron cuatro gotas de solución de cloruro de bario al 1 % y se observó la posible formación de precipitado.

Las muestras que presentaron precipitado se trasvasaron a un tubo de ensayo y fueron sometidas a calentamiento en baño María (100 °C) para verificar su estabilidad. Aquellas que conservaron el precipitado después del calentamiento fueron consideradas positivas para la presencia de sulfatos.

Confirmación espectroscópica

Las muestras positivas fueron centrifugadas y posteriormente analizadas mediante espectroscopía infrarroja. La identificación de sulfatos se realizó mediante la búsqueda de bandas características en la región comprendida entre 983 y 1105 cm^{-1}.

B. Procedimiento de precipitación en medio ácido (Ácido acético)

Se colocaron entre 0.5 y 1.0 mL de cada muestra en una placa de microescala y se acidificó el medio con ácido acético, verificando mediante papel tornasol que el pH fuera aproximadamente 5. Posteriormente, se añadieron cuatro gotas de una solución de cloruro de bario al 1 % y se observó la posible formación de precipitado. Una vez formado el precipitado, se agregó una gota de solución de permanganato de potasio y, posteriormente, peróxido de hidrógeno hasta que la solución perdió la coloración característica del permanganato. A continuación, las muestras se centrifugaron y se observó el color del precipitado obtenido.

En algunas muestras, el precipitado no presentó la coloración rosada esperada, sino una tonalidad café oscura. Debido a esta discrepancia, dichos precipitados fueron analizados mediante espectroscopía infrarroja (FTIR-ATR) con el fin de confirmar o descartar la presencia del ion sulfato.

RESULTADOS

Los resultados de ambos ensayos de precipitación y de confirmación por IR se encuentran resumidos en la Tabla 1.

Tabla 1. Resultados de la detección cualitativa de sulfatos en diversas formulaciones comerciales mediante ensayos de precipitación y confirmación por IR.

Código de	Prueba A		Prueba B	
Muestra	Resultado	FTIR-ATR	Resultado	FTIR-ATR
A-1.	Precipitado blanco	positivo	Precipitado rosa claro	positivo
A-2.	Sin precipitado		Sin precipitado	
A-3.	Precipitado blanco	positivo	Precipitado amarillo	positivo
A-4.	Precipitado blanco	positivo	Precipitado rosa	positivo
A-5.	Precipitado blanco	positivo	Precipitado amarillo	positivo
A-6.	Precipitado muy claro	negativo	Precipitado café	negativo
A-7.	Sin precipitado		Sin precipitado	
A-8.	Sin precipitado		Sin precipitado	
A-9.	Sin precipitado		Sin precipitado	

Los resultados del ensayo de precipitación A mostraron la formación de un precipitado blanco en las muestras A-1, A-3, A-4 y A-5, lo que indica la presencia de sulfatos en estas muestras. En contraste, las muestras A-2, A-6, A-7, A-8 y A-9 no presentaron precipitado observable bajo las condiciones del ensayo.

El análisis por espectroscopía infrarroja confirmó los resultados obtenidos mediante precipitación. Las muestras positivas mostraron señales características en la región de 983–1105 cm^{-1}, atribuibles a vibraciones de los grupos sulfato. Algunas muestras generaron precipitados durante el ensayo B; sin embargo, estos no presentaron la coloración rosada asociada a una respuesta positiva para sulfatos. Con el propósito de esclarecer estos resultados, los precipitados fueron analizados mediante FTIR-ATR. Los espectros obtenidos no mostraron las bandas características de absorción del ion sulfato en la región comprendida entre 983 y 1105 cm^{-1}, lo que indicó que los precipitados observados no correspondían a sulfato de bario. Estos resultados sugieren que otros componentes presentes en las formulaciones comerciales pudieron haber contribuido a la formación de precipitados o a la aparición de coloraciones distintas a las esperadas.

Algunas muestras generaron precipitados durante el ensayo B; sin embargo, estos no presentaron la coloración rosada asociada a una respuesta positiva para sulfatos. Con el propósito de esclarecer estos resultados, los precipitados fueron analizados mediante FTIR-ATR. Los espectros obtenidos no mostraron las bandas características de absorción del ion sulfato en la región comprendida entre 983 y 1105 cm^{-1}, lo que indicó que los precipitados observados no correspondían a sulfato de bario. Estos resultados sugieren que otros componentes presentes en las formulaciones comerciales pudieron haber contribuido a la formación de precipitados o a la aparición de coloraciones distintas a las esperadas.

La concordancia entre los resultados positivos obtenidos en los ensayos de precipitación y la presencia de bandas características en los espectros infrarrojos permitió corroborar la identificación de compuestos sulfatados en las muestras correspondientes. En conjunto, los resultados demuestran que la combinación de ensayos de precipitación a microescala y FTIR-ATR constituye una estrategia útil para la detección cualitativa y confirmación de sulfatos en productos comerciales de uso cotidiano.

CONCLUSIONES

Los ensayos de precipitación a microescala permitieron detectar de manera eficiente la presencia del ion sulfato en diversas muestras de productos de higiene personal y aseo doméstico. La formación de sulfato de bario como precipitado blanco constituyó una evidencia clara de la presencia de compuestos sulfatados en determinadas formulaciones comerciales. La espectroscopía infrarroja complementó y confirmó los resultados obtenidos mediante análisis químico clásico, identificando bandas características asociadas a grupos sulfato. La combinación de ambas técnicas demostró ser una estrategia confiable, económica y de fácil aplicación para el control de calidad de productos comerciales y estudios de monitoreo ambiental. Asimismo, el empleo de procedimientos a microescala y de FTIR-ATR contribuyó a disminuir: el consumo de reactivos, la generación de residuos y el gasto energético, en concordancia con varios de los principios de la química verde.

BIBLIOGRAFÍA

1. Anastas, P. T., & Warner, J. C. (1998). Green chemistry: Theory and practice. Oxford University Press.
2. American Chemical Society. (s. f.). 12 principles of green chemistry. https://www.acs.org/greenchemistry/principles/12-principles-of-green-chemistry.html
3. Svehla, G. (1996). Vogel's qualitative inorganic analysis (7th ed.). Longman.
4. Ayres, G. H. (1970). Análisis químico cualitativo. Harla.
5. Stuart, B. (2004). Infrared spectroscopy: Fundamentals and applications. John Wiley & Sons.
6. Smith, B. C. (2011). Fundamentals of Fourier transform infrared spectroscopy (2nd ed.). CRC Press.
7. Coates, J. (2000). Interpretation of infrared spectra, a practical approach. En R. A. Meyers (Ed.), Encyclopedia of analytical chemistry (pp. 10815–10837). John Wiley & Sons.
8. Murai, K., Honda, H., & Okauchi, S. (2020). Visual colorimetric determination of sulfate ion in water using coprecipitation phenomenon of potassium permanganate and barium sulfate. Bunseki Kagaku, 69(6), 311–316. https://doi.org/10.2116/bunsekikagaku.69.311

UN MÉTODO RÁPIDO PARA OBTENER CÉLULAS COMPETENTES DE ALTA EFICIENCIA PARA LA TRANSFORMACIÓN DE PLÁSMIDOS

Mayra Montecillo-Aguado, Esmeralda Rodríguez-Miranda, Sergio López-Briones, Marco Antonio Hernández-Luna.

Departamento de Medicina y Nutrición, Universidad de Guanajuato, León, Guanajuato, México.
mayramontecillo@ugto.mx

RESUMEN

La transformación bacteriana es un método ampliamente utilizado en biología molecular y biotecnología, que permite insertar en bacterias ADN plasmídico con la finalidad de realizar distintos procesos, como la clonación de proteínas y la propagación de plásmidos para su conservación. El método de Hanahan D es uno de los más empleados en los laboratorios debido a su bajo costo. Este método requiere la aplicación de un choque térmico en bacterias tratadas previamente con cloruro de calcio ($CaCl_2$), denominadas bacterias competentes después del tratamiento con $CaCl_2$.

Una de las desventajas del método de Hanahan es el tiempo que requiere para preparar las bacterias antes de poder ser utilizadas en la transformación con plásmidos. Su elaboración puede llevar varias horas después de que las bacterias alcanzan la fase logarítmica de crecimiento. Por este motivo, distintos grupos de trabajo buscan optimizar los métodos de preparación de bacterias competentes. En este trabajo, presentamos un método sencillo y rápido que permite la obtención de bacterias competentes con una alta tasa de eficiencia.

Metodología: Dos cepas de *Escherichia coli* (DH5α y Top10) se cultivaron hasta alcanzar la fase logarítmica (OD_{600} ~0.4). Posteriormente, se recolectaron, centrifugaron en frío, se eliminó el sobrenadante y se resuspendieron en una solución fría de $CaCl_2$ 0.1 M, repitiendo este proceso dos veces. Al final, las bacterias se resuspendieron en $CaCl_2$ 0.1 M con glicerol al 20% para preservación a -70°C. Para la transformación de plásmidos, se mezclaron 50 µL de células competentes con 150 ng de ADN plasmídico (TrcHis2B-GFP), se incubaron en hielo durante 30 minutos, se aplicó un choque térmico a 42°C por 1 minuto y se realizó una recuperación en medio LB a 37°C por una hora. Las células transformadas se sembraron en placas con ampicilina como antibiotico de selección y se incubaron a 37°C toda la noche. Al día siguinete se realizo la cuenta de colonias. Para corroborar la transformación se realizó la purificación de plásmidos en las bacterias con un kit comercial y se analizaron por electroforesis en gel de agarosa. Nuestro método se comparó con el descrito por Hanahan.

Resultados: Los resultados obtenidos muestran que nuestro metodo de tratamiento con $CaCl_2$ 0.1 M, obtuvo una mayor cantidad de bacterias transformadas en comparación con el método de Hanahan D. En el caso de la cepa DH5α nuestro método generó $4.24x10^4$ CFUs, mientras que con el método de Hanahan se obtuvieron $2.1x10^4$ CFUs. Mientras que para la cepa Top10, nuestro método obtuvo 2.61 $x10^4$ CFUs y el método de Hanahan $1.8x10^4$ CFUs.

Conclusiones:
La preparación de bacterias competentes con una concentración de 0.1 M de $CaCl_2$ presenta una mayor que la del método de Hanahan, reduciendo el tiempo de preparación de las bacterias competentes en más de 3 horas.

INTRODUCCIÓN

Los plásmidos son macromoléculas circulares de ADN extracromosómico presentes en bacterias y algunas arqueas, que contienen elementos genéticos propios para su autorreplicación [1]. Además,

pueden albergar una amplia variedad de genes, incluidos aquellos asociados con la resistencia a antimicrobianos y con factores de virulencia [2,3].

Mediante ingeniería genética, los plásmidos pueden manipularse y hoy se emplean ampliamente en investigación e industria. En este contexto, los plásmidos se utilizan para la producción de proteínas de mamíferos, bacterias y otros microorganismos con múltiples fines, entre ellos el desarrollo de vacunas [4]. Asimismo, permiten evaluar la expresión génica [5], inducir mutaciones específicas [6] y funcionar como vectores para genes reporteros —por ejemplo, proteínas fluorescentes— que posibilitan el monitoreo en tiempo real del comportamiento celular [7].

Para poder utilizar este tipo de moleculas, se requiere su propagación, la cual suele realizarse en bacterias como *Escherichia coli* (*E. coli*), las cuales, tras manipulación genética, permiten obtener grandes cantidades de ADN plasmídico. Existen diversas cepas de *E. coli* (DH5α, Top10, BL21, entre otras) ampliamente utilizadas para este propósito [8]. Sin embargo, estas cepas requieren un tratamiento previo para adquirir competencia y, así, incorporar el plásmido de interés.

Para insertar este tipo de material genetico en bacterias, lo que es esencial para la clonación, se requiere de sensibilizar a las bacterias con la finalidad de facilitar la captación del ADN externo, como los plásmidos. Este proceso ocurre en dos etapas: primero, la célula bacteriana capta el ADN a través de la permeabilización de su pared celular; y una vez en su interior el ADN plásmidico puede replicarse dentro de la bacteria o dirigir la expresión de los genes que porta.

Para introducir plásmidos en bacterias se han desarrollado distintos métodos que alteran la pared celular de las bacterias, incluidos enfoques físicos como la electroporación [9], la biobalística [10] y el ultrasonido [11], entre otros. No obstante, estas alternativas suelen demandar equipo especializado, por lo que se reservan principalmente para células eucariotas o para microorganismos particularmente difíciles de transformar [12].

En contraste, una de las estrategias más utilizadas por su bajo costo es la transformación por choque térmico. Este procedimiento de naturaleza fisicoquímica, combina el tratamiento con cationes para inducir competencia con cambios controlados de temperatura que favorecen la entrada del ADN; ambos componentes actúan de manera complementaria para promover su internalización. Entre los cationes más empleados se encuentra el $CaCl_2$ y su combinación con $MgCl_2$, se considera un estándar para la transformación de cepas como *E. coli* DH5α y otras cepas similares de *E. coli* [13]. El método basado en $CaCl_2$ fue descrito por Mandel y colaboradores [14] y posteriormente optimizado por Hanahan mediante la adición de $MgCl_2$, con el fin de incrementar la eficiencia [15]. Actualmente, se trata de un protocolo de uso extendido en laboratorios de investigación y se encuentra descrito en *Molecular Cloning: A Laboratory Manual* de Michael R. Green y Joseph Sambrook [16]. Sin embargo, una limitación frecuente es el tiempo necesario para preparar bacterias competentes. Por ello, en este trabajo se presenta un método sencillo y rápido para obtener bacterias competentes con $CaCl_2$ destinadas a la transformación plasmídica, con alta eficiencia y sin requerir $MgCl_2$.

PARTE EXPERIMENTAL

Cultivo y preparación de bacterias competentes

Las bacterias competentes se prepararon de dos formas. Utilizando la metodología de Hanahan D publicado en Molecular Cloning, a Laboratory Manual. 2.ª ed. Libro 1 [16]. Y nuestro método al cual llamamos Fast Track

Método de preparación de bacterias competentes por metodo de Hanahan

Se seleccionó una única colonia bacteriana de placas de *E. coli* DH5α y Top10, incubadas durante 16–20 h a 37 °C en una miniincubadora de Labnet International (Edison, NJ, EE. UU.). La colonia se transfirió a 100 mL de caldo LB (MDC LAB, EM, MEX). El cultivo se incubó durante 3–4 h a 37 °C con agitación en una incubadora agitadora de sobremesa de Labnet International (Edison, NJ, EE.

UU.), monitorizando el crecimiento hasta alcanzar una densidad óptica a 600 nm (OD600) de ~0,4 con un espectrofotómetro Genesys 10uv de Thermo Scientific (Waltham, MA, EE. UU.). Para asegurar que el cultivo no superara dicha densidad, la OD600 se midió cada 15–20 min.

Las células bacterianas se transfirieron a tubos estériles de polipropileno de 50 mL, previamente enfriados en hielo. Los cultivos se enfriaron a 4 °C manteniendo los tubos en hielo durante 10 min. Las células se recuperaron mediante centrifugación a 5000 × g durante 10 min a 4 °C. El sobrenadante se eliminó por decantación. Cada sedimento celular se resuspendió por agitación en 30 mL de solución helada de $MgCl_2$–$CaCl_2$ (80 mM $MgCl_2$, 20 mM $CaCl_2$). Posteriormente, las células se recuperaron mediante centrifugación a 2700 × g durante 10 min a 4 °C. El sobrenadante se eliminó por decantación y el sedimento se resuspendió por agitación en 2 mL de $CaCl_2$ 0,1 M helado por cada 50 mL de cultivo original.

En este punto, las células pueden utilizarse directamente para transformación o dispensarse en alícuotas, mezcladas con $CaCl_2$ 0,1 M y glicerol al 20 %, y almacenarse a −70 °C.

Transformación de bacterias por choque térmico
Para la transformación, se transfirieron 50 µL de la suspensión de células competentes a un tubo estéril de polipropileno previamente enfriado, utilizando una punta de micropipeta refrigerada para cada cepa. Se añadió ADN plasmídico (TrcHis2B-GFP; 150 ng/µL) a cada tubo y se mezcló suavemente por agitación. A continuación, los tubos se mantuvieron en hielo durante 30 min.

Posteriormente, los tubos se trasladaron a una incubadora de baño seco digital de Labnet International (Edison, NJ, EE. UU.) precalentada a 42 °C y se incubaron exactamente 90 s. De inmediato, se colocaron en un baño de hielo y se dejaron enfriar durante 1–2 min. Luego, se añadieron 800 µL de medio LB (MDC LAB, EM, MEX) y los cultivos se incubaron durante 45 min a 37 °C para permitir la recuperación bacteriana y la expresión del marcador de resistencia a antibióticos codificado por el plásmido. Durante esta incubación, las células se agitaron a 180 rpm en una incubadora agitadora de sobremesa de Labnet International (Edison, NJ, EE. UU.) a 37 °C. Finalmente, se sembraron 100 µL de las células transformadas en placas de agar LB suplementadas con ampicilina (50 µg/mL). Las placas se invirtieron e incubaron a 37 °C; las colonias transformadas aparecieron en 12–16 h. Las colonias se visualizaron mediante la expresión de la proteína GFP en un transiluminador UV y se procedieron a contar.

Método de preparación de bacterias competentes por metodo Fast Track
Se realizó un precultivo a partir de colonias de las cepas *E. coli* DH5α y Top10 en 5 mL de caldo LB (MDC LAB, EM, MEX), el cual se incubó durante toda la noche a 37 °C en una incubadora agitadora de sobremesa de Labnet International (Edison, NJ, EE. UU.). Al día siguiente, se preparó una dilución 1:1000 del precultivo en 100 mL de medio LB y se incubó con agitación durante 3–4 h a 37 °C, en la misma incubadora.

La densidad óptica a 600 nm (DO600) se midió con un espectrofotómetro Genesys 10 UV de Thermo Scientific (Waltham, MA, EE. UU.) y, al alcanzar un rango de 0,4–0,6, las bacterias se recolectaron mediante centrifugación a 5000 × g durante 10 min a 4 °C. Se descartó el sobrenadante y el sedimento bacteriano se resuspendió en 1 mL de $CaCl_2$ 0,1 M frío. La suspensión se mantuvo en frío y las células se recuperaron nuevamente por centrifugación a 5000 × g durante 10 min a 4 °C. Tras retirar el sobrenadante, el sedimento celular se resuspendió en 2 mL de una mezcla de $CaCl_2$ 0,1 M y glicerol al 20 %. Finalmente, se prepararon alícuotas de 50 µL y se almacenaron a −70 °C.

Transformación por choque térmico de bacterias competentes por método Fast Track
Para la transformación, se tomó una alícuota de 50 µL de cada condición y se añadió ADN plasmídico (TrcHis2B-GFP; 150 ng/µL). Los tubos se mezclaron suavemente y se incubaron en hielo durante 30 min. A continuación, se incubaron a 42 °C durante 1 min en una incubadora de baño seco digital de Labnet International (Edison, NJ, EE. UU.). Posteriormente, se añadió 1 mL de medio LB y las bacterias se incubaron a 37 °C durante 30 min con agitación (180 rpm) en una incubadora agitadora de sobremesa de Labnet International (Edison, NJ, EE. UU.).

Finalmente, se sembraron 100 µL de las diluciones seriadas de la suspensión bacteriana en placas de agar LB suplementadas con ampicilina (50 µg/mL). Las placas se incubaron a 37 °C durante toda la noche en una miniincubadora de Labnet International (Edison, NJ, EE. UU.). Las colonias se visualizaron y se contaron con un transiluminador.

Purificación de plásmidos

La purificación de todos los plásmidos obtenidos de las colonias de bacterias competentes se llevó a cabo utilizando un minikit de extracción de plásmidos FavorPrep de FAVORGEN (Taipei, TWN), siguiendo las instrucciones del fabricante. Los productos obtenidos tras la purificación se sometieron a electroforesis en un gel de agarosa al 1 %, a 90 mV, durante 60 minutos.

RESULTADOS

En la figura 1, se observa el diagrama de flujo para la preparación de bacterias competentes de las cepas *E. coli* DH5α y Top10 por el método Fast Track.

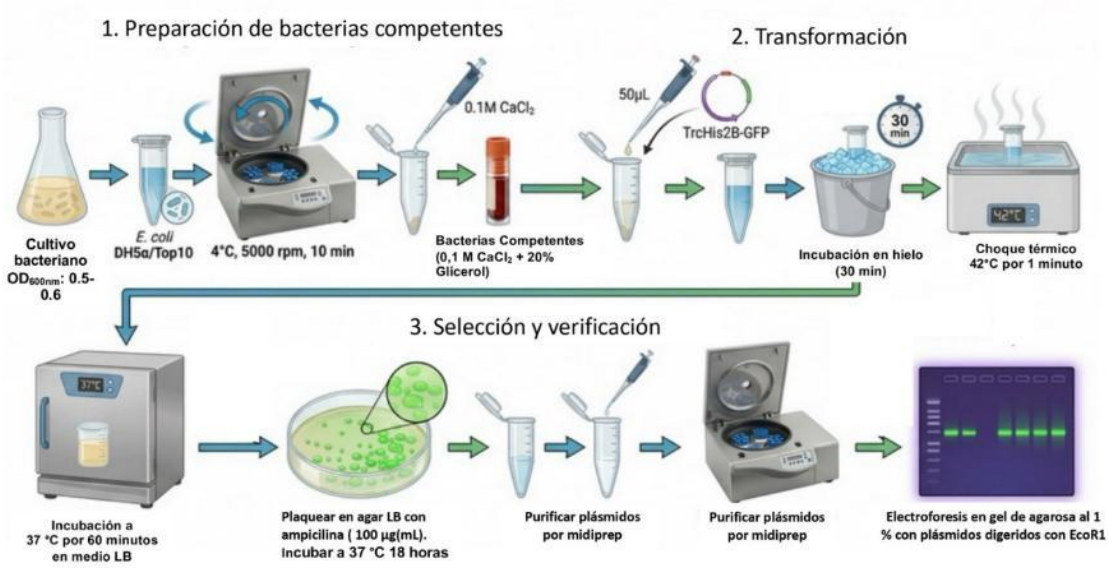


Figura 1. Diagrama de flujo para la preparación de bacterias competentes.

La eficiencia de la transformación se evaluó mediante el crecimiento bacteriano en placas de agar LB suplementadas con ampicilina (50 µg/mL). Debidoa a que el plásmido expresa la proteína fluorescente verde (GFP), fue posible visualizar las colonias con un transiluminador y contabilizarlas.

Se observó un aumento en el número de colonias cuando se utilizó el método optimizado con $CaCl_2$, en comparación con el método modificado de Hanahan, tanto en la cepa DH5α como en la Top10 (figura 2). La eficiencia de transformación de las células transformadas con el plásmido TrcHis2B-GFP se expresó como unidades formadoras de colonias por microgramo de ADN (CFU/µg), y fue de $2{,}19 \times 10^4$ y $4{,}24 \times 10^4$ para la cepa *E. coli* DH5α con los métodos $CaCl_2/MgCl_2$ y $CaCl_2$, respectivamente. En la cepa *E. coli* Top10, los valores fueron $1{,}89 \times 10^4$ con $CaCl_2/MgCl_2$ y $2{,}61 \times 10^4$ con $CaCl_2$ solo (Tabla 1).

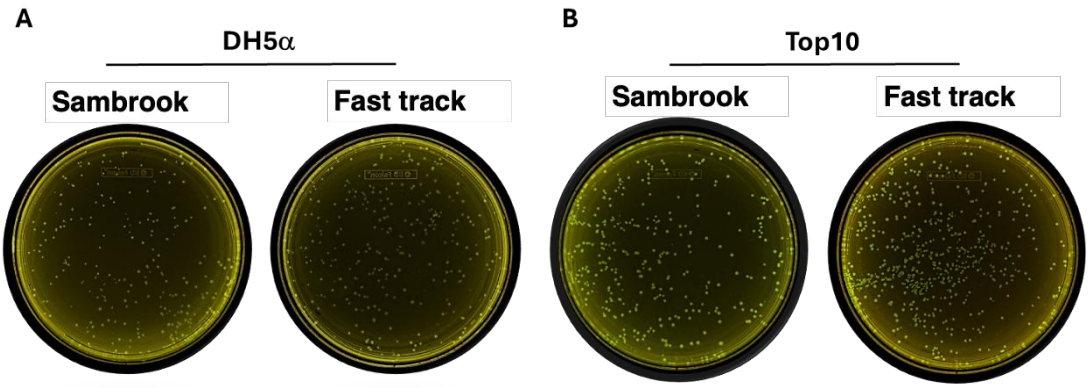


Figura 2. Evaluación de la eficiencia de transformación mediante el crecimiento bacteriano en agar LB suplementado con ampicilina. A. Cepa *E. coli* DH5α transformada por el método de Hanahan D y el método Fast Track. B. Bacterias *E. coli* Top10 transformadas con método de Hanahan D y el método Fast Track.

Tabla 1. Eficacia de transformación con el plásmido TrcHis2B-GFP.

Cepa	Método	CFUs
DH5a	Sambrook	2.19x10^4
	Fast Track	4.24x10^4
Top10	Sambrook	1.89x10^4
	Fast Track	2.61x10^4

Posteriormente, para asegurar la presencia de los plásmidos se procedio a purificarlos mediante un minikit de extracción de plásmidos FavorPrep, utilizando una colonia de cada una de las condiciones probadas de las bacterias competentes de las cepas DH5α y Top10, preparadas mediante ambos métodos. Al realizar la electroforesis, observamos que la migración en el gel de agarosa era similar a la del control (figura 3).

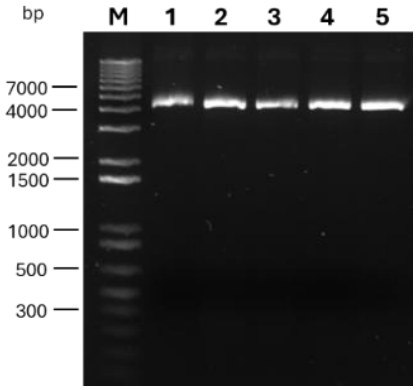


Figura 3. Electroforesis en gel de agarosa al 1 %. M: marcador de tamaño molecular. 1: plásmido control TrcHis2B-GFP. 2: TrcHis2B-GFP purificado a partir de *E. coli* DH5α método de Hanahan. 3: TrcHis2B-GFP purificado a partir de *E. coli* DH5α método Fast Track. 4: TrcHis2B-GFP purificado a partir de *E. coli* Top10 método de Hanahan. 5: TrcHis2B-GFP purificado a partir de *E. coli* Top10 método Fast Track.

DISCUSIÓN

La transformación bacteriana es una técnica fundamental en ingeniería genética que permite introducir plásmidos en bacterias modificadas genéticamente, como *Escherichia coli*, facilitando aplicaciones que abarcan desde la biología molecular hasta la biotecnología. Entre los métodos más utilizados se encuentra el método de choque térmico en bacterias tratadas con $CaCl_2$ debido a su bajo costo y que es un reactivo común en los laboratorios de investigación.

A partir del método descrito por Mandel y Higa [14], se han propuesto múltiples modificaciones al protocolo con $CaCl_2$ para incrementar la eficiencia de transformación. Mientras que Mandel reportó una eficiencia de 10^5–10^6 CFU por microgramo de plásmido, Hanahan [15] reportó eficiencias del orden de 10^8 CFU por microgramo del plásmido utilizado, implementando la adición de $MgCl_2$.

Por otra parte, como se mencionó anteriormente, una de las principales limitaciones de la preparación de bacterias competentes con $CaCl_2$ es el tiempo requerido para su obtención, sin considerar las horas de cultivo necesarias para alcanzar la fase logarítmica de crecimiento. Por ejemplo, el método de Hanahan, publicado en *Molecular Cloning: A Laboratory Manual* [16], puede requerir más de dos horas para la preparación de bacterias competentes. Otros métodos que también emplean $CaCl_2$, como el descrito por Pope y Kent [17], reportan tiempos de cinco minutos; sin embargo, este intervalo corresponde únicamente a la etapa de transformación y no al tiempo total de preparación, que supera una hora.

Nuestro método Fast Track no solo mostró una eficiencia superior a la obtenida con el protocolo de Hanahan [15], el cual recomienda utilizar 1 µg de plásmido, sino que además requiere menos tiempo que el reportado por Pope y Kent [17], cuando se considera el proceso completo. Asimismo, se alcanzó una alta eficiencia empleando únicamente 150 nanogramos de plásmido. Con nuestro método se obtuvieron aproximadamente 4×10^4 CFUs, mientras que siguiendo el protocolo de Hanahan se obtuvo cerca de la mitad al utilizar la misma concentración de plásmido (Tabla 1). Adicionalmente, a diferencia del método de Hanahan, nuestro protocolo no requiere $MgCl_2$, el cual se ha incorporado a algunos procedimientos debido a que se ha sugerido que incrementa la eficiencia de transformación [15]; sin embargo, en nuestras condiciones no se observaron diferencias.

Por otra parte, diversos autores han intentado incrementar la eficiencia de transformación obtenida con $CaCl_2$ mediante el empleo de otros cationes (p. ej., Mn^{2+}, K^+ y PIPES) [18], así como Li^+, Na^+ y Al^{3+} [19]. No obstante, estas modificaciones no han mostrado incrementar la eficiencia del tratamiento con $CaCl_2$. También se han propuesto alternativas como el uso de dimetil sulfóxido (DMSO) y polietilenglicol (PEG), pero la eficiencias reportadas son del orden de 10^8 CFU/µg de plásmido [20], o el uso de fibras de asbesto (crisotilo), que permiten una obtención rápida de células competentes, pero con baja eficiencia de transformación [21]. Asimismo, se ha evaluado el uso de péptidos antimicrobianos como LFcin-B para potenciar la transformación con $CaCl_2$/$MgCl_2$, con eficiencias similares a la electroporación [22]; sin embargo, el costo de estos reactivos puede ser considerable. De manera análoga, el uso de nanofibras ha permitido transformar otras especies bacterianas [23], aunque su aplicación depende de la disponibilidad de dichos materiales en el laboratorio.

En conjunto, la evidencia sugiere que, si bien diversos tratamientos pueden modificar la eficiencia de transformación, esta también depende de manera importante de la cepa bacteriana empleada [24]. Por ello, se requieren más estudios para desarrollar métodos de transformación rápidos y de alta eficiencia que sean robustos y reproducibles entre distintas cepas bacterianas, pero que además su costo y tiempo de preparación sean accesibles para cualquier laboratorio de investigación.

Finalmente, en este trabajo presentamos un método rápido (Fast Track) para la obtención de bacterias competentes mediante el tratamiento con $CaCl_2$, reduciendo el tiempo de preparación a tan solo 20 minutos, un tiempo comparable al requerido para preparar bacterias para electroporación [25] y menor que el de otros protocolos basados en $CaCl_2$, que pueden requerir varias horas [16].

Además, las bacterias competentes pueden conservarse durante varios meses a −80 °C mediante ultracongelación con la adición de glicerol. Por lo que es una nueva alternativa para la preparación de bacterias competentes de *E. coli.*

CONCLUSIONES

Nuestro método Fast Track con $CaCl_2$ 0.1 M aumenta significativamente la eficiencia de transformación en comparación con el método de Hanahan D, en las cepas DH5α y Top10 de *E. coli*. Además de reducir el tiempo de preparación de las bacterias competentes en más de 3 horas. Por lo que el método Fast track representa una alternativa sencilla, rápida y de bajo costo para la investigación.

BIBLIOGRAFÍA

1. Helinski, D.R. A Brief History of Plasmids. EcoSal Plus 2022, 10, doi:10.1128/ecosalplus.ESP-0028-2021.
2. Wachino, J. Horizontal Gene Transfer Systems for Spread of Antibiotic Resistance in Gram‐Negative Bacteria. Microbiol. Immunol. 2025, 69, 367‐376, doi:10.1111/1348-0421.13222.
3. Xu, Q.; Sun, R.; Liu, X.; Heng, H.; Yang, X.; Xie, M.; Yang, C.; Ye, L.; Chan, E.W.-C.; Zhang, R.; et al. Global Dissemination of Conjugative Virulence Plasmids Co-Harboring Hypervirulence and Multidrug Resistance Genes in Klebsiella Pneumoniae. mSystems 2025, 10, doi:10.1128/msystems.01675-24.
4. Tregoning, J.S.; Kinnear, E. Using Plasmids as DNA Vaccines for Infectious Diseases. Microbiol. Spectr. 2014, 2, doi:10.1128/microbiolspec.PLAS-0028-2014.
5. Bagh, S.; Mazumder, M.; Velauthapillai, T.; Sardana, V.; Dong, G.Q.; Movva, A.B.; Lim, L.H.; McMillen, D.R. Plasmid-Borne Prokaryotic Gene Expression: Sources of Variability and Quantitative System Characterization. Phys. Rev. E 2008, 77, 021919, doi:10.1103/PhysRevE.77.021919.
6. Hao, M.; He, Y.; Zhang, H.; Liao, X.-P.; Liu, Y.-H.; Sun, J.; Du, H.; Kreiswirth, B.N.; Chen, L. CRISPR-Cas9-Mediated Carbapenemase Gene and Plasmid Curing in Carbapenem-Resistant Enterobacteriaceae. Antimicrob. Agents Chemother. 2020, 64, doi:10.1128/AAC.00843-20.
7. Kilaru, S.; Schuster, M.; Cannon, S.; Steinberg, G. Optimised Red- and Green-Fluorescent Proteins for Live Cell Imaging in the Industrial Enzyme-Producing Fungus Trichoderma Reesei. Fungal Genetics and Biology 2020, 138, 103366, doi:10.1016/j.fgb.2020.103366.
8. Yoshida, N.; Sato, M. Plasmid Uptake by Bacteria: A Comparison of Methods and Efficiencies. Appl. Microbiol. Biotechnol. 2009, 83, 791–798, doi:10.1007/s00253-009-2042-4.
9. Dower, W.J.; Miller, J.F.; Ragsdale, C.W. High Efficiency Transformation of E.Coli by High Voltage Electroporation. Nucleic Acids Res. 1988, 16, 6127–6145, doi:10.1093/nar/16.13.6127.
10. Klein, R.M.; Wolf, E.D.; Wu, R.; Sanford, J.C. High-Velocity Microprojectiles for Delivering Nucleic Acids into Living Cells. 1987. Biotechnology 1992, 24, 384–386.
11. MEHIERHUMBERT, S.; GUY, R. Physical Methods for Gene Transfer: Improving the Kinetics of Gene Delivery into Cells. Adv. Drug Deliv. Rev. 2005, 57, 733–753, doi:10.1016/j.addr.2004.12.007.
12. Loske AM, R. AL Genetic Transformation of Cells Using Physical Methods. J. Genet. Syndr. Gene Ther. 2014, 05, doi:10.4172/2157-7412.1000237.
13. Asif, A.; Mohsin, H.; Tanvir, R.; Rehman, Y. Revisiting the Mechanisms Involved in Calcium Chloride Induced Bacterial Transformation. Front. Microbiol. 2017, 8, doi:10.3389/fmicb.2017.02169.
14. Mandel, M.; Higa, A. Calcium-Dependent Bacteriophage DNA Infection. J. Mol. Biol. 1970, 53, 159–162, doi:10.1016/0022-2836(70)90051-3.
15. Hanahan, D. Studies on Transformation of Escherichia Coli with Plasmids. J. Mol. Biol. 1983, 166, 557–580, doi:10.1016/S0022-2836(83)80284-8.

16. Green, M.R.; Sambrook, J. The Hanahan Method for Preparation and Transformation of Competent Escherichia Coli : High-Efficiency Transformation. Cold Spring Harb. Protoc. 2018, 2018, pdb.prot101188, doi:10.1101/pdb.prot101188.
17. Pope, B.; Kent, H.M. High Efficiency 5 Min Transformation of Escherichia Coli. Nucleic Acids Res. 1996, 24, 536–537, doi:10.1093/nar/24.3.536.
18. Inoue, H.; Nojima, H.; Okayama, H. High Efficiency Transformation of Escherichia Coli with Plasmids. Gene 1990, 96, 23–28, doi:10.1016/0378-1119(90)90336-P.
19. Liu, X.; Liu, L.; Wang, Y.; Wang, X.; Ma, Y.; Li, Y. The Study on the Factors Affecting Transformation Efficiency of E. Coli Competent Cells. Pak. J. Pharm. Sci. 2014, 27, 679–684.
20. Chan, W.-T.; Verma, C.S.; Lane, D.P.; Gan, S.K.-E. A Comparison and Optimization of Methods and Factors Affecting the Transformation of Escherichia Coli. Biosci. Rep. 2013, 33, doi:10.1042/BSR20130098.
21. Yoshida, N.; Ikeda, T.; Yoshida, T.; Sengoku, T.; Ogawa, K. Chrysotile Asbestos Fibers Mediate Transformation of Escherichia Coli by Exogenous Plasmid DNA. FEMS Microbiol. Lett. 2001, 195, 133–137, doi:10.1111/j.1574-6968.2001.tb10510.x.
22. Liu, J.; Chang, W.; Pan, L.; Liu, X.; Su, L.; Zhang, W.; Li, Q.; Zheng, Y. An Improved Method of Preparing High Efficiency Transformation Escherichia Coli with Both Plasmids and Larger DNA Fragments. Indian J. Microbiol. 2018, 58, 448–456, doi:10.1007/s12088-018-0743-z.
23. Wilharm, G.; Lepka, D.; Faber, F.; Hofmann, J.; Kerrinnes, T.; Skiebe, E. A Simple and Rapid Method of Bacterial Transformation. J. Microbiol. Methods 2010, 80, 215–216, doi:10.1016/j.mimet.2009.12.002.
24. Chan, W.-T.; Verma, C.S.; Lane, D.P.; Gan, S.K.-E. A Comparison and Optimization of Methods and Factors Affecting the Transformation of Escherichia Coli. Biosci. Rep. 2013, 33, doi:10.1042/BSR20130098.
25. Dower, W.J.; Miller, J.F.; Ragsdale, C.W. High Efficiency Transformation of E.Coli by High Voltage Electroporation. Nucleic Acids Res. 1988, 16, 6127–6145, doi:10.1093/nar/16.13.6127.

SÍNTESIS Y DIVERSIFICACIÓN DE CUMARINAS QUIRALES MEDIANTE AMINOCATÁLISIS ASIMÉTRICA

Alberto Medina Ortíz, David Cruz Cruz, Clarisa Villegas Gómez

Departamento de Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Guanajuato.
clarisa.villegas@ugto.mx

RESUMEN

Durante años, las reacciones en cascada han captado la atención de los químicos orgánicos sintéticos debido a su capacidad para generar moléculas complejas y estructuralmente diversas de manera eficiente. Su aplicación en la síntesis de compuestos con actividades biológicas de interés representa un desafío significativo; sin embargo, estas transformaciones constituyen una herramienta poderosa que aporta un alto grado de novedad, elegancia y eficiencia al diseño de nuevas estrategias sintéticas. En este contexto, la Síntesis Dirigida a la Diversidad y la aminocatálisis se consolidan como enfoques fundamentales para el acceso a nuevos compuestos de interés químico y biológico.

El presente trabajo tiene como objetivo el desarrollo de nuevas metodologías organocatalíticas en cascada, empleando distintos modos de activación en aminocatálisis, para la síntesis y diversificación de compuestos policíclicos. Considerando la relevancia de sus actividades biológicas, las cumarinas fueron seleccionadas como plataformas estructurales para el diseño molecular, incorporando una especie dienófila activada y grupos nucleofílicos capaces de participar en reacciones en cascada del tipo Diels–Alder/adición nucleofílica.

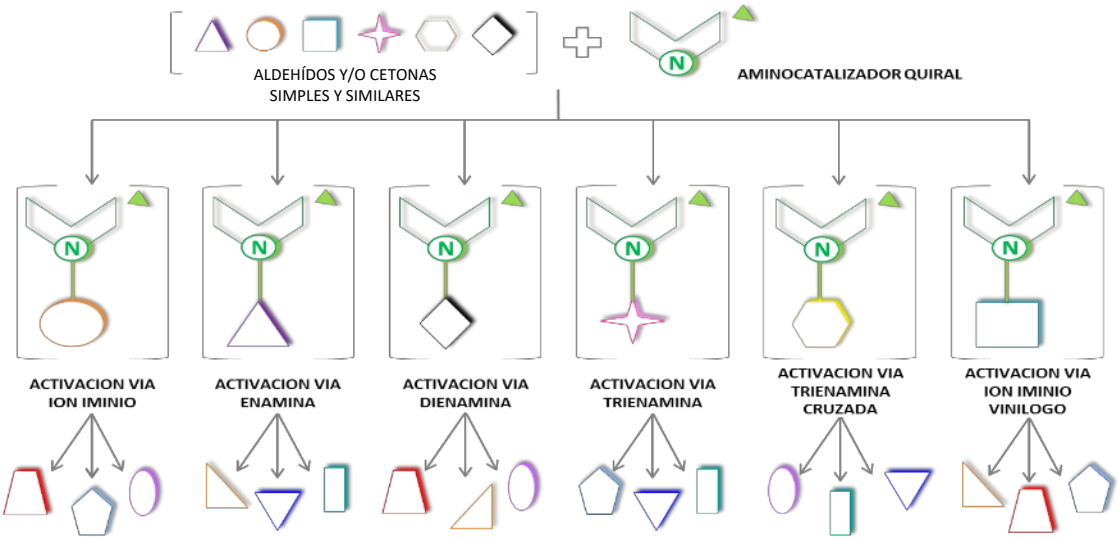
Inicialmente, se llevó a cabo la síntesis de los materiales de partida, incluyendo una serie de cumarinas con distintos patrones de sustitución, las cuales fueron posteriormente transformadas en sus correspondientes amidas para ser empleadas como dienófilos activados en reacciones organocatalíticas en cascada mediante el modo de activación trienamina.

En conclusión, estas metodologías aminocatalíticas en cascada abren nuevas perspectivas para la síntesis de estructuras policíclicas privilegiadas con alta diversidad estructural, funcional y estereoquímica, a partir de materiales de partida simples, contribuyendo así a la exploración de regiones biológicamente relevantes del espacio químico.

INTRODUCCIÓN

Actualmente, la síntesis dirigida a la diversidad y la aminocatálisis asimétrica constituyen dos herramientas importantes para acceder a nuevos compuestos de interés. El extraordinario desarrollo de estas dos áreas ha permitido a los químicos poblar eficientemente regiones inexploradas del espacio químico relevante.

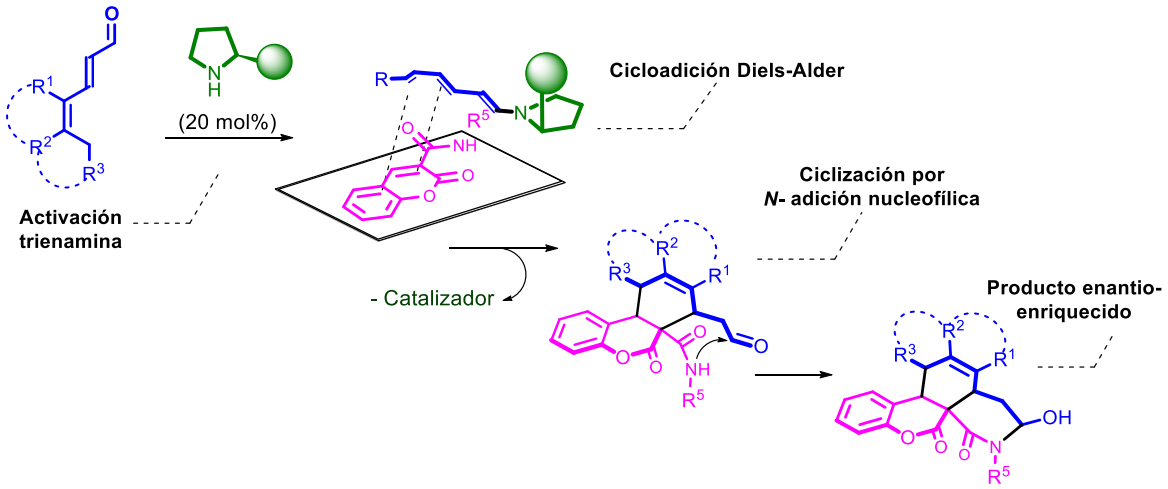
En los últimos años, se ha conceptualizado el término de Síntesis Dirigida a la Diversidad de Estructuras Privilegiadas mediante Aminocatálisis (ApDOS), destacando su tendencia hacia la síntesis asimétrica y la diversificación de estructuras privilegiadas, pequeñas moléculas base de arquitecturas naturales complejas que suelen presentar actividades biológicas importantes (Esquema 1).



Esquema 1. Conceptualización de la estrategia ApDOS.

TEORÍA

Con base en la actual demanda de metodologías para la síntesis eficiente de compuestos enantiomericamente enriquecidos se propuso desarrollar una ruta aminocatalítica a través del modo de activación trienamina para la síntesis y diversificación de cumarinas quirales.



Esquema 2. Reacción en cascada (Diels-Alder/ *N*-ciclización) por activación trienamina.

Con dirección a nuestro objetivo y con las ventajas de incluir núcleos privilegiados de relevancia biológica, las cumarinas fueron electas para el diseño de moléculas en donde incorporen estructuralmente una especie dienófila activada, así como grupos nucleofílicos capaces de llevar a cabo reacciones en cascada de Diels–Alder/Adición nucleofílica (Figura 1).

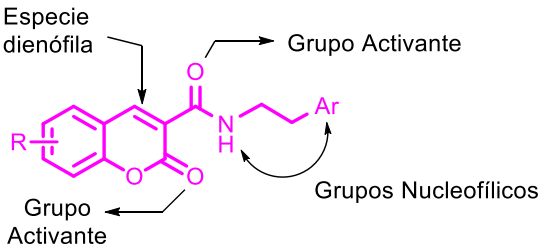
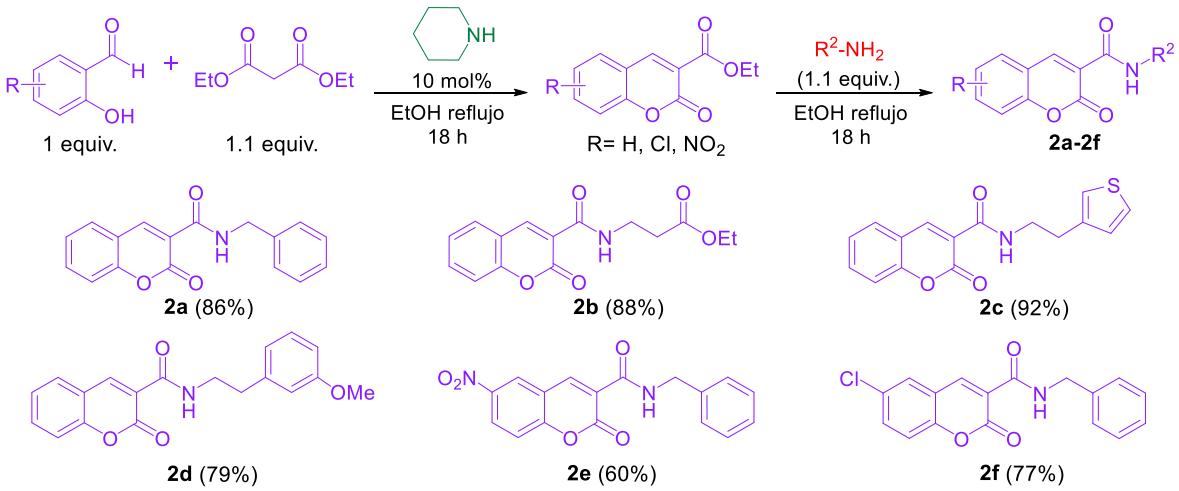


Figura 1. Diseño estructural de la cumarina activada.

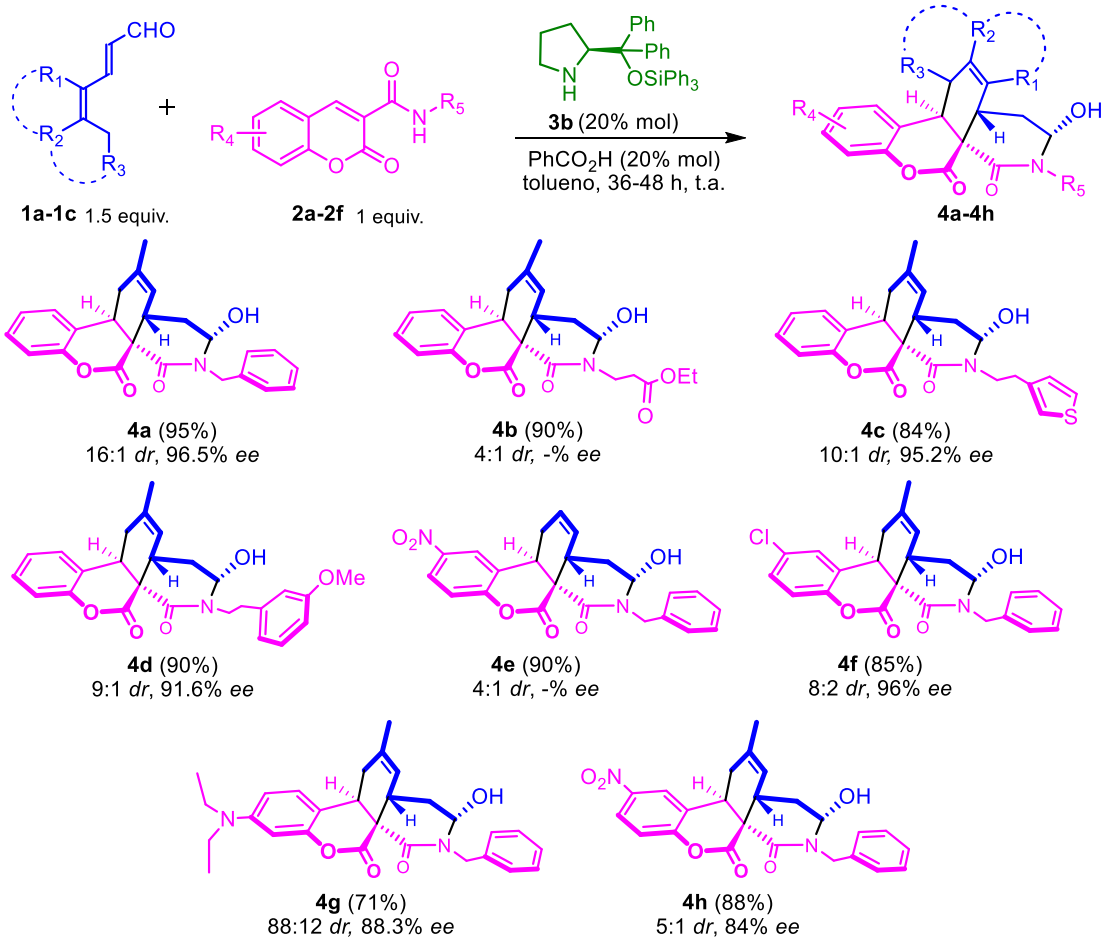
PARTE EXPERIMENTAL

Inicialmente, se llevó a cabo la síntesis de diferentes materiales de partida, entre ellos, una serie de cumarinas con distintos patrones de sustitución para después transformarlas en sus correspondientes amidas y utilizarlas como dienófilos activados en reacciones organocatalíticas en cascada a través del modo de activación trienamina (Esquema 3).



Esquema 3. Síntesis de amidas de cumarina.

Una vez sintetizados los materiales de partida se llevó a cabo la optimización de las condiciones de reacción y la evaluación del alcance sintético de la reacción en cascada (Diels-Alder/ Adición nucleofílica) para la formación estereocontrolada de estructuras ópticamente activas que incorporen un sistema de anillos fusionados cumarina-ciclohexeno-piperidona (Esquema 4).



Esquema 4. Ejemplos representativos del alcance sintético establecido.

RESULTADOS

El estudio del alcance sintético permitió identificar tendencias claras en función de la estructura de los reactivos. La variación del sustituyente en la amida indica que los sistemas aromáticos son bien tolerados, dando lugar a altas enantioselectividades. La modificación del núcleo de la cumarina pone en evidencia la influencia de los efectos electrónicos, donde los sustituyentes electrodonadores favorecen tanto la reactividad como el control estereoquímico, mientras que grupos fuertemente donadores o atractores provocan una ligera disminución de estos parámetros.

Finalmente, se logró conocer la estructura mediante difracción de rayos-*X* de monocristal y se determinó la configuración absoluta para cada uno de los centros estereogénicos formados durante la reacción organocatalítica (Figura 4). Los resultados obtenidos revelaron que la metodología procede con una eficiencia consistentemente alta, proporcionando excelentes rendimientos en una amplia gama de sustratos.

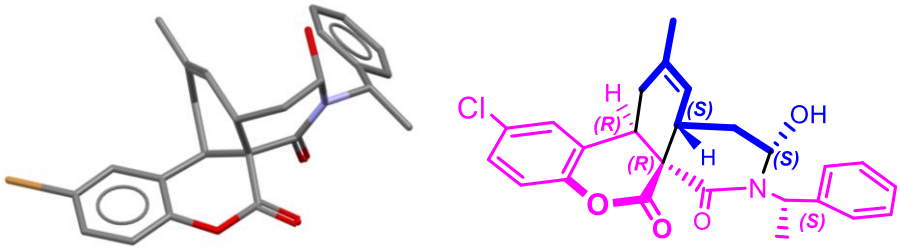


Figura 4. Estructura de rayos-*X* y asignación de configuración absoluta

CONCLUSIONES

En conclusión, ha sido posible la síntesis de cumarinas con distintos patrones de sustitución y se logró desarrollar una metodología eficiente y altamente selectiva basada en el modo de activación trienamina, permitiendo la construcción de arquitecturas moleculares que incorporan la estructura de cumarina a través de una reacción en cascada. Estas metodologías abren nuevas perspectivas para la síntesis de otras clases de estructuras privilegiadas con diversidad estructural, funcional y estereoquímica a partir de materiales de partida simples, contribuyendo a poblar nuevas regiones biológicamente relevantes del espacio químico.

BIBLIOGRAFÍA

1. T. J. Pawar, H. Jiang, M. A. Vázquez-Guevara, C. Villegas-Gómez, D. Cruz-Cruz, “Aminocatalytic Privileged Diversity-Oriented Synthesis (ApDOS): An Efficient Strategy to Populate Relevant Chemical Spaces”, European Journal of Organic Chemistry, 16, 2018, pp. 1835.
2. C. Villegas-Gómez, D. Cruz-Cruz, R. Mose, K. A. Jørgensen, “Organocatalytic cascade reactions: Diversity-Oriented synthesis for the construction of hydroisoquinoline scaffolds”. Chemical Communications, 50, 2014, pp. 6035.
3. K. C. Nicolaou, D. J. Edmonds, P. G. Bulger, “Cascade reactions in total synthesis”, Angewandte Chemie International Edition England, 45, 2006, pp. 7134.

EVAUACIÓN POR ESPECTROSCOPIA INFRARROJA CON TRANSFORMADA DE FOURIER DE SULFÓXIDOS EN EL ACEITE DE PULPA DE MAMEY (*Pouteria Sapota (Jacq.)*)

Tito Emilio Ariza Ortega[1], José Alberto Ariza Ortega[2*], Luis Delgado Olivares[2], Esther Ramírez Moreno[2], Diana Patricia Olivo Ramírez[2], José Arias Rico[3], Judith Coyotl Huerta[4]

[1]Instituto Mexicano del Seguro Social. [2]Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. [3]Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. [4]Instituto Tecnológico del Altiplano de Tlaxcala.
alberto190375@hotmail.com

RESUMEN

El mamey (*Pouteria sapota* (Jacq.)) es un fruto tropical ampliamente apreciado por sus características sensoriales y su consumo en fresco. No obstante, la información disponible sobre su contenido de compuestos bioactivos, en particular los sulfóxidos presentes en la fracción lipídica de la pulpa, es limitada. Por ello, el objetivo de este estudio fue evaluar la presencia de sulfóxidos en el aceite de mamey mediante espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier (EITF). Frutos en estado de madurez comercial fueron procesados; la pulpa se deshidrató, tamizó y el aceite se obtuvo por centrifugación (15 557 × g, 40 °C, 10 min). El análisis del aceite se realizó por EITF en la región media del infrarrojo (400–4000 cm^{-1}). La concentración de sulfóxidos fue de 300.59 unidades arbitrarias. Estos resultados sugieren que la pulpa de mamey posee potencial para su diversificación, ya que su aceite contiene sulfóxidos con posible actividad antioxidante y funcional. Asimismo, la EITF se confirma como una técnica rápida, no destructiva y adecuada para la caracterización preliminar de aceites vegetales.

INTRODUCCIÓN

Los lípidos son conocidos generalmente como grasas, y con el avance de la ciencia y la tecnología, se descubrieron en la naturaleza una diversidad de ellos y, se ha reportado que son derivados de los ácidos grasos, y están constituidos principalmente por átomos de carbono, hidrógeno, oxígeno fósforo y nitrógeno, que forman estructuras químicas y de acuerdo a su peso molecular pueden ser solubles e insoluble en agua, algunos ejemplos son aceites, grasas, terpenos, vitaminas y carotenoides, entre otros. Por lo anterior, la abundancia de lípidos se amplió y para diferenciarlos, surgieron varias formas de clasificarlos, una de ellas es de acuerdo a su función de su estructura química y por su método de extracción en crudo o extra virgen y refinado[1,2].

La clasificación en base a su estructura química, comprende a los lípidos simples (grasas y los aceites), los lípidos compuestos (que son aquellos que están integrados por una parte lipídica y otra que no lo es como fosfolípidos y los glucolípidos, entre otros) y los lípidos asociados o derivados (que son todos los que no se ubican en ninguna de las subdivisiones anteriores como ácidos grasos libres, carotenoides, vitaminas liposolubles, colesterol, entre otros)[1].

Por otro lado, de acuerdo a su método de extracción, se ha indicado que un aceite extra virgen, es aquel que se obtiene del fruto y únicamente se usan para su extracción, procesos mecánicos u otros medios físicos en condiciones térmicas bajas (< 27 °C), para evitar su alteración lipídica. El uso de una temperatura baja, también permite conservar compuestos menores (alcoholes alifáticos y terpénicos, esteroles e hidrocarburos)[3].

Mientras que en un aceite refinado, parte de un aceite crudo o extra virgen que se somete a procesos de refinación como desgomado, neutralizado y desodorización, donde se usan disolventes químicos y temperatura entre los 67 °C y 200 °C, eliminando la mayor parte de los compuestos químicos minoritarios, obteniéndose así un aceite de sabor neutro, visualmente limpio, de color adecuado, inocuo para la alimentación y además, aumenta su conservación[1,3].

Una vez extraído el aceite, se procede a su evaluación para conocer sus características físico-químicas, que están relacionadas con su composición química y para analizarlos se usan métodos químicos y técnicas instrumentales[4], en esta última una de ellas es la espectroscopia de infrarrojo con transformada de Fourier.

La espectroscopia de infrarrojo es una técnica instrumental óptica de absorción, donde la muestra se mide directamente sin ningún proceso de acondicionamiento y por lo tanto, no se emplean reactivos químicos, la medición es rápida y en general, se determina la intensidad y la longitud de onda de la energía radiante, cuando ésta incide sobre un átomo o molécula que es absorbida provocando una transición entre estados de distinta energía, que al volver a su estado fundamental se produce una emisión de radiación que da origen a los espectros y la transformada de Fourier, son ecuaciones matemáticas empleadas para transformar señales entre los dominios del tiempo y la frecuencia[5,6].

Por lo que esta técnica es útil para identificar y cuantificar los posibles lípidos en la pulpa de mamey y diversificar su valor agregado. El mamey es un fruto redondeado, ovalado o elíptico que mide entre 7.5 y 22.8 cm de largo y pesa entre 0.227 y 2.3 kg. Su cáscara es áspera y firme, similar al cuero o la corteza de un color marrón oscuro. La pulpa tiene un sabor dulce, parecido al de la calabaza, y un color que varía del rosa salmón al rojo oscuro. Posee una semilla larga, fusiforme, duro y de color marrón brillante[7]. La pulpa del mamey se consume principalmente fresca, pero también se utiliza para elaborar mermeladas, helados, salsas y otros productos alimenticios regionales[8].

El mamey es muy apreciado por su sabor y su aceptación está creciendo en el mercado mundial. Sin embargo, existen pocos informes sobre la composición química, las propiedades físicas y las características nutricionales de su parte comestible. Por lo tanto, el objetivo de este trabajo fue evaluar la presencia de sulfóxidos en el aceite de mamey mediante espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier (EITF).

TEORÍA

Los lípidos son compuestos orgánicos formados principalmente por ácidos grasos, cuya estructura determina sus propiedades y estabilidad. La espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier permite identificar grupos funcionales característicos en los aceites mediante la absorción de radiación en regiones específicas del espectro. En aceites vegetales, esta técnica es útil para detectar compuestos como ésteres y posibles derivados como sulfóxidos, los cuales pueden formarse por reacciones en dobles enlaces de ácidos grasos. Su presencia es relevante debido a sus posibles efectos antioxidantes y funcionales.

PARTE EXPERIMENTAL

Muestra

Se compraron y seleccionaron 3 kilos de mamey libres de defecto y en etapa de madurez comercial, provenientes del Estado de Puebla, Puebla; México. Los frutos se lavaron, y el epicarpio y la semilla se eliminaron manualmente. La pulpa de mamey (100 g) fue homogeneizada en una licuadora (Procesador de Alimentos de Braun Multipractic, Alemania) durante 20 s. La muestra homogeneizada se vertió sobre papel estrella para hornear hasta obtener una película delgada, y se deshidrató en una estufa de secado (marca Terlab, TE-H80, México) a 70 °C durante 4 h. Las muestras deshidratadas se homogeneizaron y se tamizaron hasta alcanzar un tamaño de partícula de 250 µ.

Extracción del aceite

Para iniciar con la extracción del aceite de mamey, la pulpa tamizada (20 g), se depositó dentro de un tubo falcon de 50 mL y se depositó dentro de una centrifugadora (centrífuga Eppendorf, modelo

5804 R, Eppendorf AG, Hamburgo, Alemania) con las siguientes condiciones 15 557 x gravedad (11 000 rpm) a 40 °C durante 10 min[9].

Evaluación de la calidad del aceite de mamey virgen

La evaluación de la calidad del aceite de mamey virgen, se realizó con un equipo de espectroscopia infrarroja, utilizando un espectrómetro Bruker (modelo Vertex 70 Bruker Optics-Bruker Corporation, Billerica, Massachusetts, EE. UU.) con transformada de Fourier, en la región media (400-4000 cm^{-1}). Para iniciar con el análisis, el equipo fue programado a una resolución de 4 cm^{-1} y un tiempo de integración de 60 s (1 s por barrido) y se depositaron 20 µL de aceite de mamey extra virgen en el cristal (selenuro de zinc) del equipo de reflectancia total atenuada y se evaluaron sus compuestos sulfóxidos, mediante deconvoluciones de los espectrogramas de absorbancia obtenidos del aceite de mamey extra virgen, utilizando una suma de distribuciones de líneas gaussianas, de acuerdo a lo reportado por Akrami et al.[10] y Abdulkadir et al.[11]. Los resultados se analizaron mediante estadística descriptiva (media ± desviación estándar) utilizando el Software SPECTRUM V5 3.0.

RESULTADOS

En la Figura 1 y en la Tabla 1 se muestran los resultados de los espectrogramas de las deconvulaciones de los lípidos del aceite virgen extraído de la pulpa de mamey.

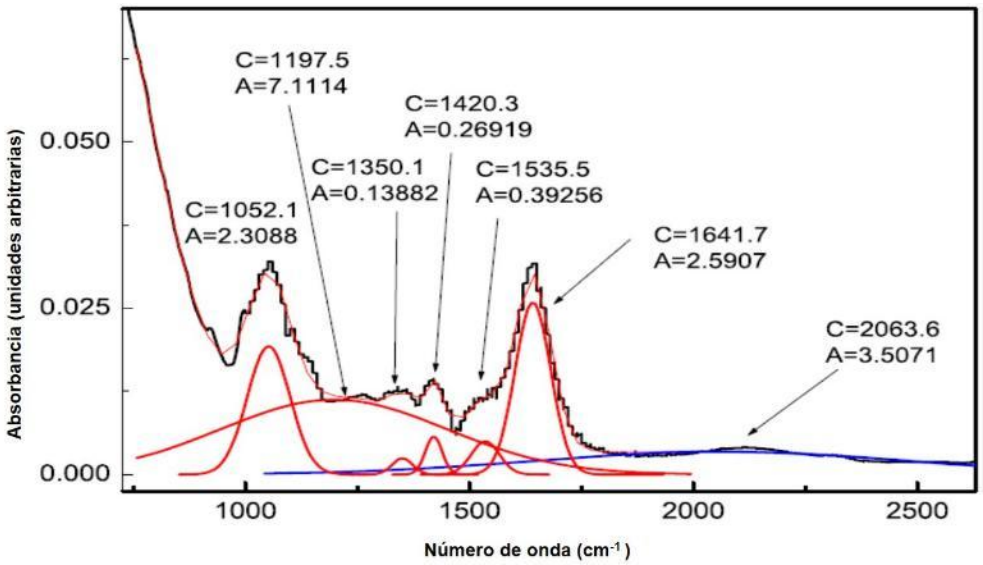


Figura 1. Resultados de las deconvulaciones realizadas por espectroscopia infrarroja con transformada de Fourier de los lípidos del aceite virgen extraído de la pulpa de mamey (*Pouteria sapota* (Jacq.)).

En el espectrograma de la Figura 1, no se identificó a 1092 cm^{-1}, 1116 cm^{-1} y 1160 cm^{-1} al grupo funcional carbonilo (-C-O-)[12], por lo que el aceite extra virgen extraído de la pulpa de mamey a través del método de centrifugación [15 557 x gravedad (11 000 rpm) a 40 °C durante 10 min.][9], no generó degradación de lípidos con dobles enlaces[1].

Tabla 1. Resultados de las deconvulaciones realizadas por espectroscopia infrarroja.

Compuesto químico	Aceite virgen de mamey
Sulfóxidos (u.a)	300.59 ± 2.00

Los resultados son el promedio de tres repeticiones ± DE. u.a: unidades arbitrarias.

En el espectrograma del aceite extra virgen extraído de la pulpa de mamey, en el número de onda a 1028 cm^{-1} - 1055 cm^{-1} al grupo funcional sulfoxido (RSOOR´)[12], que a través de reacciones de tioleno se adiciona el azufre a los dobles enlaces de los hidrocarburos alifáticos insaturados, lo cual se formaron compuestos químicos organosulfurados derivados de ácidos grasos[13], y se encuentran en una alta concentración en el aceite de mamey, y se ha reportado que al ser consumidos en la alimentación ejercen un efecto positivo en la salud, al tener una actividad antioxidante[14], antimicrobianas y antiinflamatorias[15]. Además, pueden ser utilizados para la síntesis de polímeros[13].

CONCLUSIONES

La extracción por centrifugación no evidenció la presencia de carbonilos, lo que indica una adecuada conservación de los lípidos insaturados y posiciona a este método como una alternativa eficiente para evitar su degradación. El aceite virgen de pulpa de mamey presentó compuestos mayoritarios sulfóxidos, con potencial para su aprovechamiento funcional y diversificación. No obstante, es necesario el uso de estándares analíticos para confirmar con mayor precisión la identificación y cuantificación de estos compuestos.

BIBLIOGRAFÍA

1. Badui DS. Lípidos. En: Química de los alimentos. 6ª ed. Naucalpan: Pearson; 2019. p. 245–295.
2. Valdivia LM, Ramírez CHF, Tecante CA. Química de macrocomponentes de alimentos. México: UNAM; 2023.
3. International Olive Council. Trade standard applying to olive oils and olive-pomace oils. 2022.
4. Gerhardtova I, Jankech T, Majerova P, et al. Int J Mol Sci. 2024;25:2249.
5. Skoog DA, Holler FJ, Neman AT. Principios de análisis instrumental. 7ª ed. Cengage; 2018.
6. Yahui G, Xuerong C, Wei W. Adv Sample Prep. 2024;11:100122.
7. Morera JA. Sapote (*Pouteria sapota*). Rome: FAO; 1994.
8. Solís-Fuentes JA, Ayala-Tirado RC, Fernández-Suárez AD, et al. Grasas Aceites. 2015;66:e056.
9. Ariza OJA. Estudio del efecto del campo eléctrico… Tesis doctoral. IPN; 2011.
10. Akrami HA, Yardim MF, Akar A, et al. Fuel. 1997;76:1389–1394.
11. Abdulkadir I, Uba S, Salihu A, et al. Niger J Basic Appl Sci. 2016;24:47–55.
12. Ariza-Ortega JA, Díaz-Reyes J. Rev Fitotec Mex. 2022;45:469–474.
13. Smith AD, Tennyson AG, Smith RC. Sustainable Chemistry. 2020;1:209–237.
14. Kim S, Kim DB, Jin W, et al. Nat Prod Res. 2018;32:1193-1197.
15. Putnik P, Gabrić D, Roohinejad S, et al. Food Chem. 2019;276:680–691.

ESTUDIO DE LA CAPACIDAD ANTIMICROBIANA DEL EXTRACTO NATURAL DE BUGAMBILIA

Guadalupe Ithayetzy Cruz Calvillo, Carol Cadenas Gutiérrez, María del Rosario León Reyes, Carmen Salazar Hernández.

UPIIG-Instituto Politécnico Nacional.
msalazarh@ipn.mx.

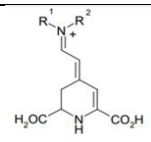
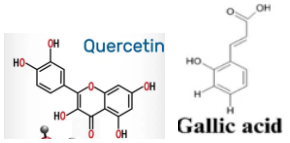
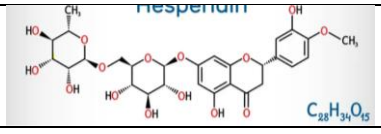
RESUMEN

Los productos naturales hoy en día son una alternativa para controlar y prevenir diferentes tipos de enfermedades, por lo que, en este proyecto se han realizado la obtención de extractos naturales de buganvilia morada y rosa empleando etanol, los extractos se concentraron por rotavapor obteniendo un sólido morado que se caracterizó por espectroscopía de infrarrojo, observando los principales grupos funcionales presentes en la Betalaina; a 3610 cm^{-1} se identificó el grupo amino (N-H), a 1700cm^{-1} el carbonilo; a 1230 cm^{-1} el enlace C-N. Los extractos se emplearon para hacer pruebas de antibigrama empleando Escherichia Coli; los resultados se compararon con los observados con un antibiótico comercial ciproflaxaina observando una actividad antibiótica moderada para los extractos naturales.

INTRODUCCIÓN

En México se calcula que existe 4000 especies de plantas con atributos medicinales: 250 se comercializa, 85% se extrae sin planes de manejo sustentable de forma silvestre y 80% se ha hecho uso por la población mexicana, datos reportados por la Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales [1]. Entre los cuales se encuentra la buganvillia, la cual ha mostrado tener propiedades antimicrobianas debido a su contenido de: Flavonoides, Taninos, alcaloides y fenoles [2,3]. Empleándose de manera tradicional para prevenir afecciones respiratorias (tos, gripoe, asma) consumiéndola en infusiones; por otra parte, la infusión se emplea par lavados en heridas con la finalidad de desinfectar y acelerar la cicatrización [4]. La Tabla 1 muestra algunas de las actividades biológicas que se han reportado para esta planta [5-8]

Tabla 1. Actividad biológica reportada en la literatura para la buganvilia

Actividad Biológica	Componente de la Buganvilia	Estructura Química	Referencia
Sin actividad Biológica	Betalaína; componente responsable del color (rosa, violeta, amarillo, etc.) Además de involucrarse en diferentes rutas metabólicas.		5
Antimicrobiano	Flavonoide, Quercetina. Se obtiene de extracto acuoso y etanólico de la hoja de Buganvilia Glabra.		6
Antioxidante	Extracto etanólico de la bráctea; asociado a flavonoides como la Quercetina; así como el poli fenólico del ácido galico.		7
Antiinfamatorio	Herperidina, se encuentra en mayor concentración en los cítricos (naranja o limón) actúa como antioxidante,		8

	antiinflamatorio y vasculoproctector.		

Recientemente, Salazar-Hernández C y colaboradores han propuesto el uso de una sílice mesoporosa como nano excipiente de fármacos obtenida a partir de rutas de bajo costo [9]; los autores emplean silicato de sodio para obtener mediante una columna de intercambio iónico ácido silícico, que de acuerdo con el tiempo de envejecimiento se mejoran las propiedades texturales del sólido [10]. Por lo que, en este trabajo se presenta el estudio de la adsorción-desorción del extracto etanólico de buganvilia (fármaco natural) en el excipiente de sílice mesoporosa obtenida por ruta de bajo costo, denominada como SM-silicato.

PARTE EXPERIMENTAL

Obtención del Extracto Etanólico de Buganvilia (EB)

La muestra de buganvilia se obtuvo del municipio de León-Silao Guanajuato, recolectando una muestra de 100 g de la B. rosa y morada, a la cual se separaron las brácteas del péndulo de la corola. Los extractos se obtuvieron a partir de dos tipos de macerado: Empleando hoja seca; para lo cual, la hoja limpia se colocó a sequedad en la estufa por 48 hr a 60°C y otra con hoja fresca. El disolvente usado para la extracción fue etanol grado industrial. Se colocaron los 100 g de hoja en un volumen de 200 mL de etanol y se dejó reposar por mínimo 72 hr; para posteriormente concentrar a ¼ de volumen en rotavapor y finalmente secar eliminando el total del disolvente secando en la estufa a 60°C.

Síntesis de Sílice Mesoporosa (GMS)

La GMS se obtiene a partir de síntesis hidrotérmica empleando la metodología del tamiz molecular pasar una solución de Na_2SiO_3 grado industrial (10 gr de silicato en 50 mL de agua destilada) por una columna de intercambio iónico DOWEX 50WX8- 100 y recolectando la fracción ácida de pH 1-3. La fracción recolectada es ácido silícico ($Si(OH)_4$) que es envejecido a 25°C por 24 hr. Posteriormente, el ácido silícico se adiciona a una disolución de Pluronic P-123 (EO20-PO170-EO20; PMav= 5800; Sigma Aldrich) que actuará como director de estructura. La disolución de P-123 se preparó disolviendo 66.2 g del polímero en 600 mL de H_2O desionizada. Una vez mezclado el P-123 con el Si(OH)4 envejecido (10 mL) se dejó en reflujo por 24 hr hasta la formación del gel de sílice. Posteriormente, la extracción del P-123 se realizó con reflujo por 12 horas con etanol ácido y el sólido obtenido se filtra, lava con etanol y se colocó a secar a 80ºC por 6 horas y finalmente se calcina a 600ºC por 3 horas para eliminar cualquier traza de P-123 presente en la sílice.

Adsorción del Extracto en SM-silicato

La sílice mesoporosa empleada como nano-excipiente para el extracto de ajo se ha sintetizado y caracterizado previamente en el grupo de trabajo de acuerdo con la metodología propuesta por Salazar-Hernández C. et.al; 2024. Que han determinado como tiempo de saturación para este material alrededor de los 45 min, por lo que, la adsorción del extracto se llevó a cabo por impregnación simple, donde una solución del extracto (500 mg/ mL) empleando isopropanol como disolvente; se coloca en contacto con la sílice (4 g) por 45 min asistida con agitación magnética. Posteriormente, el sólido se separó por filtración y se coloca a secar en la estufa a 60°C por 24 hr, finalmente la cantidad de extracto adsorbido se cuantificó por gravimetría calcinando 0.5 g del material a 900°C, temperatura a la cual se logra obtener la sílice densificada (libre de humedad y materia orgánica).

Cinética de desorción. Obtención de los perfiles de liberación del Extracto

El porcentaje de EB desorbido se cuantificó por espectroscopía UV-visible, empleando un equipo UNICO SQ-2800. La cinética se realizó por triplicado empleando 0.1 g de SM-silicato/EB

tomando alícuotas cada 30 min por 8 h. Las condiciones de desorción empleadas simularan condiciones fisiológicas de desorción piel sana (pH 5) y temperatura de la piel (35°C).

Comparación con un antibiótico comercial mediante pruebas de antibiograma.

Se realizarán pruebas de antibiograma mediante el método de Kirby-Bauer para con ello identificar los halos de inhibición para el EB y SM-silicato/EB, comparándolo con el de un antibiótico comercial, ciprofloxacino. Para ello se obtuvo el inóculo con *Escherichia coli* para posteriormente inocular en agar nutritivo utilizando la técnica de estría cruzada. Se realizó la incubación a 36°C por 24 horas. Se tomó una colonia y se inoculó en caldo nutritivo llevando a incubación a 36°C por 24 horas. Pasado ese tiempo se colocó el caldo nutritivo con *E. coli* en el agar Muller Hinton, dnde se esparció y luego se colocaron sobre el agar los sensi-discos impregnados con los extractos, SM-silicato, SM-silicato/EB y el ciprofloxacino, que se mantuvieron bajo incubación a 36°C y se observaron los existen halos de inhibición a las 24, 48 y 72 horas.

Técnicas de caracterización

Espectroscopía de Infrarrojo.- En esta técnica se observó los modos vibracionales de los grupos funcionales presentes en la estructura de las moléculas (tanto para el Extracto de Ajo como para la GMS). Para ello, se empleó un equipo Nicolet-iS10 Thermoscientific, obteniendo el promedio de 16 scans, con 4 cm-1 de resolución y ventana espectral de 4000 a 600 cm-1.

Espectroscopía UV-visible.- Esta técnica se realizó para cuantificar la cantidad de Extracto desorbido en agua destilada; para ello se obtuvo el espectro del extracto en agua destilada empleando un equipo UV–visible spectrometer (UNICO SQ-2800). El espectro permitió definir una longitud de onda de máxima absorbancia para el Extracto y con ello realizar una pseudo curva de calibración que se utilizó para cuantificar la cantidad de Extracto desorbido.

Isotermas de Adsorción-Desorción de N2.- Esta técnica permite determinar la porosidad formada en la estructura de la SM-silicato a través de la determinación de sus propiedades texturales como lo son el área superficial, volumen de poro y tamaño de poro. Para ellos se estarán obteniendo las isotermas de adsorción-desorción de N2 a 77K; empleando un equipo Micromeritics ASAP–2010 instrument; las muestras se estarán desgasificando por 12 hr a 180 °C y 71 mmHg antes de su medición.

Microscopía Electrónica de Barrido.- Esta técnica permitirá observar la morfología de la GMS; se observó empleando un Equipo JOEL-6510 plus, observando la sílice depositada en una cintilla de carbono.

Análisis Termogravimétrico.- Se empleó para cuantificar la capacidad de adsorción máxima de ExAj en la GMS; para ello se utilizó una mufla Felisa 2000 donde se calcinó la cantidad de muestra de ExAj/GMS conocida, determinando por pérdida de peso la cantidad de extracto adsorbido en la sílice.

RESULTADOS

Caracterización del Extracto Etanólico de la Buganvilia

La Figura 1a muestra el espectro de infrarrojo obtenido para el extracto de buganvilia secado en rotavapor y en la estufa; como se puede observar, el método para eliminar el disolvente no influye en la composición del extracto obtenido; ambos presentan los mismos grupos funcionales. A 3320 cm^{-1} se identificó el -OH; a 3000cm^{-1} el =C-H; a 2920-2840 cm^{-1} los $-CH_2$ y $-CH_3$; a 1736 cm^{-1} el C=O; 1400 cm^{-1} y 780 cm^{-1} C=C y a 1050cm^{-1} C-O-C. Por otra parte, la Figura 1b muestra el espectro de UV-visible par el extracto con una concentración de 9.19 mg/mL; donde se aprecian 3 longitudes de absorción diferentes: λ_1 a 382 nm, λ_2 a 350 nm y λ_3 a 310 nm. Sugiriendo, la presencia de tres componentes en el extracto, del tipo flavonoides. La betalaína es el componente que proporciona el color a las hojas, por lo cual su longitud de absorbancia se encuentra en la región del visible 400-600 nm [11].

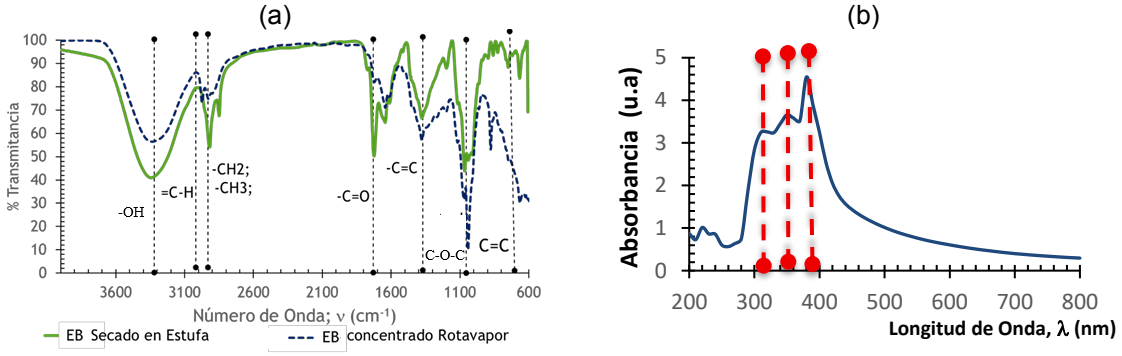


Figura 1. Caracterización del extracto de buganvilia obtenido en etanol (a) Espectro de infrarrojo (b) Espectro de UV-visible

Caracterización de la Sílice Mesoporosa (SM-silicato)

La Figura 2, muestra un resumen de la caracterización de la SM-silicato; donde el espectro de infrarrojo (véase Figura 2a) muestra la formación de la red del solido inorgánico con presencia de agua fisisorbida (3600 cm^{-1} y 1600 cm^{-1}), el enlace siloxano a 1100 cm^{-1} y 780 cm^{-1} y a 920 cm^{-1} la presencia de grupos silanoles. La Figura 2b muestra la isoterma de adsorción-desorción de N_2 para este material, mostrando un comportamiento de material meso-poroso con un área superficial BET de 496.5 $m2g^{-1}$; volumen de poro de 0.552 $cm3g^{-1}$ y dos distribuciones de poros a 3.65 nm y 6.55 nm. Finalmente, en la Figura 2c se muestra la microscopia electrónica de barrido, donde se observa la formación de aglomerados de estructuras aglomeradas que conforman la porosidad del material (marcadas con círculo rojo).

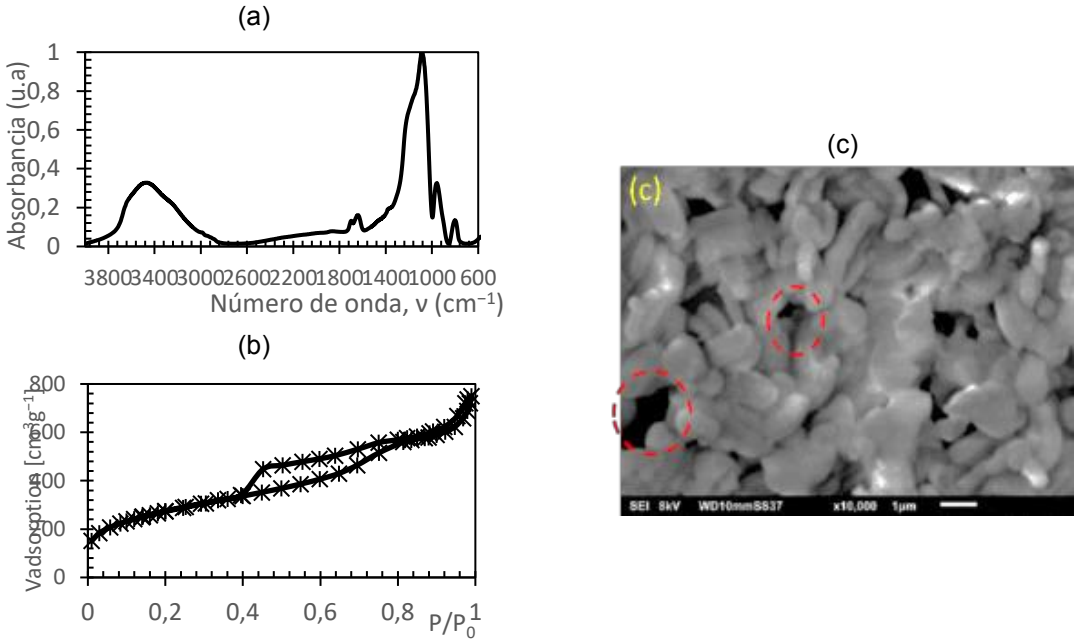


Figura 2. Caracterización de la GMS (a) Espectroscopía de infrarrojo mostrando la formación del sólido inorgánico SiO_2 (b) isoterma de adsorción-desorción de N_2 mostrando un comportamiento como material meso-poroso (c) Microscopia electrónica de barrido

Capacidad De Adsorción Del Extracto En la GMS

La Figura 3 muestra el espectro de infrarrojo para el extracto de buganvilia morada adsorbido en la sílice, donde con flecha roja se remarcan las señales correspondientes para la fase orgánica (extracto). La cuantificación de la cantidad de extracto adsorbido se determinó por gravimetría, la Tabla 2 resume los resultados obtenidos; donde se obtuvo una adsorción del 7% peso para el extracto de buganvilia morada y del 1% para la buganvilia rosa; esto debido a la poca cantidad de extracto con el que se contaba.

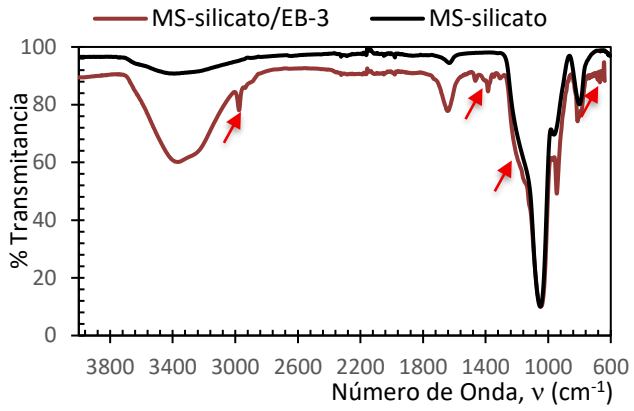


Figura 3. Modificación en la sílice con el extracto de buganvilia morada

Tabla 2. Capacidad de adsorción de ExAjo GMS calculados por gravimetría

		% en peso
SM-Silicato	Agua fisisorbida y Si-OH	4
SM-Silicato/EB-1	Agua fisisorbida y Si-OH EB-1 (Extracto buganvilia morada)	4 7
SM-Silicato/EB-3	Agua fisisorbida y Si-OH EB-3 (Extracto buganvilia rosa)	4 1

Cinética de Deserción del Extracto Adsorbido en la GMS a Diferentes pH

La Figura 4a muestra la curva de calibración obtenida para el extracto de buganvilia morada; obteniendo una R^2 de 0.9788. Con la ecuación de la curva de calibración se cuantificó la cantidad de extracto desorbido en la cinética a diferente tiempo manteniendo la temperatura de 35°C y pH de 5; estos resultados se muestran en la Figura 4b. A 220 min se alcanzó la desorción del 87% del total de extracto adsorbido en la sílice, manteniendo un perfil de liberación controlada con un comportamiento lineal.

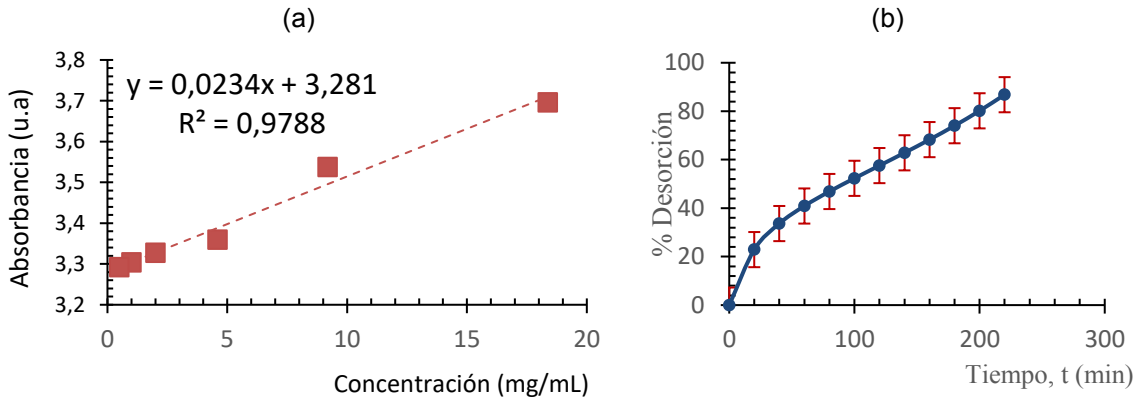


Figura 4. Cinética de desorción (a) Curva de calibración empleada para la cuantificación de EB-morada (b) Perfil de desorción del EB-morado obtenido a 35°C y pH de 5 simulando condiciones de piel sana.

Actividad Biológica del Extracto de Buganvilia

La Figura 5 muestra el resultado obtenido en las pruebas de antibiograma para los extractos naturales (EB-1 y EB-3) y se comparan con la actividad mostrada por un fármaco comercial (ciprofloxacino). La concentración de los extractos fue 2.25 veces la del fármaco comercial, para el extracto de buganvilia rosa (EB-3) se observó una actividad biológica ligeramente mayor al del ciprofloxacino, con halo de 0.575 cm (4.5% mayor) mientras que el extracto de buganvilia morada (EB-1) mostró menor actividad biológica con halo de 0.425 cm (77.27% la actividad del ciprofloxacino).

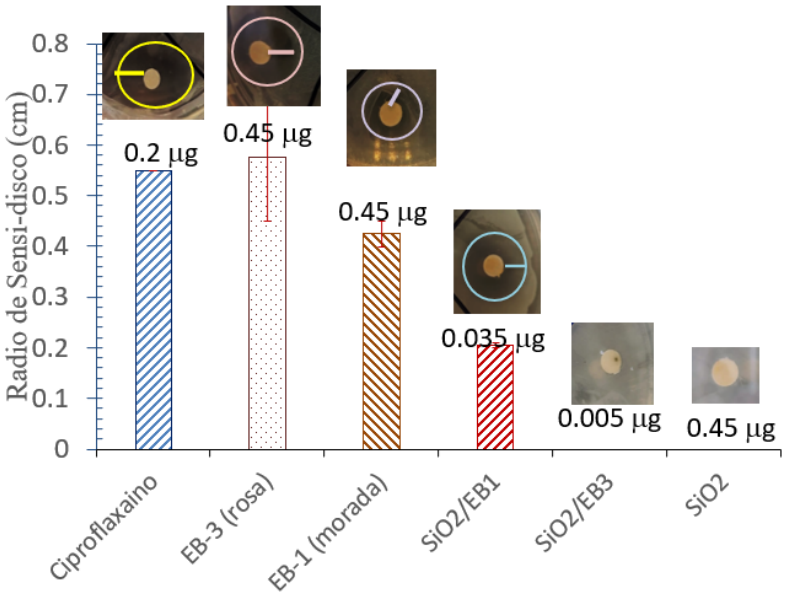


Figura 5. Resultados de la prueba de antibiograma para el extracto natural y extracto adsorbido en el excipiente de sílice, comparado con la de un fármaco comercial.

Por otra parte, la sílice sin extracto no mostro actividad antimicrobiana y como se mencionó anteriormente, la sílice con EB-3 (buganvilia rosa) contiene solo el 1% de extracto adsorbido que en el sensidisco corresponde a 0.005 µg, concentración muy baja y por lo tanto no se observó halo. Sin embargo, para la sílice con el extracto morado se tiene en cada sensidisco una cantidad de extracto natural de 0.035µg y el halo observado fue de 0.205 cm. Demostrando que la sílice potencializa la actividad biológica del extracto debido al control en la dosificación de este.

CONCLUSIONES

La espectrofotometría de IR permitió identificar los principales grupos funcionales (CO; éter, C=; etc) en los extractos de bugambilia, observando una similitud para la bugambilia rosa o morada; por otra parte, se obtuvieron las curva de calibración a una longitud de onda de 310 nm, que corresponde para flavonoides y compuestos fenólicos.

La sílice mesoporosa empleada tiene una capacidad de adsorción del extracto del 7% para la buganvilia morada y a un pH 5 se liberó hasta el 87% a los 250 min manteniendo un perfil controlado. De acuerdo con los resultados del atibiograma, los extractos puros muestran actividad biológica similar al del fármaco puro (ciproflaxaino) con una concentración de 0.45 μg, mientras que la SM-silicato potencializó la actividad biológica del extracto observándose un halo de inhibición de 0.2 cm con una concentración 12.56 veces menor al del extracto solo.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Secretaría de Investigación y Posgrados del Instituto Politécnico Nacional por su apoyo a través del programa de Proyecto SAPPI 2026-IND-0156

BIBLIOGRAFÍA

1. Secretaría de Medio Ambiente y Recurso Naturales. (2021). Plantas medicinales de México. Gobierno de México. Recuperado 29/05/2025. https://www.gob.mx/semarnat/articulos/plantas-medicinales-de-mexico
2. Atiq Fawad S, Khalid N, Asghar W, Rasul Suleria H.A (2012) In vitro comparative study of Bougainvillea spectabilis “stand” leaves and Bougainvillea variegata leaves in terms of phytochemicals and antimicrobial activity, Chinese Journal of Natural Medicines, 10(6) 441-447.
3. López-Hernández D, Almaguer Vargas G., Montejano Rodríguez J.R., Figueroa Rodríguez A.H., Becerril Flores M.A, 2026). Bougainvillea glabra incrementó el efecto antimicrobiano de gentamicina para Escherichia coli “in vitro”. Ciencia Latina Revista Científica Multidisciplinar, 10(1), 1218-1234.
4. Mahey, P., Sontakke, M., Muchahary, S., kumar Gupta A, Kumar Jha A, Kandpal R, Kunwar T, Choudhary A. (2025) Transforming the therapeutic and nutritional benefits of Bougainvillea flowers for sustainable uses and food security. Discov Food 5, 156.
5. Madadi E., Mazloum-Ravasan A., Sik Yu J., Won Ha J., Hamishehkar H., Hyun kim K. (2020) Therapeutic Application of Betalains: A Review, Plants (Basel) 17, 9(9) 1219.
6. Ornelas García I.G., Guerrero Barrera A.L., Avelar González F.J., Chávez Vela N.A., Gutiérrez Montiel D (2023) Bougainvillea glabra Choisy (Nyctinaginacea): review of phytochemistry and antimicrobial potential, Frontiers in Chemistry, 11:1276514
7. Ferreira T.A., Rodríguez A.A., Sánchez-Ortega I., Lorenzo J.M., Santos E.M. (2024) Antioxidant Activity of Bougainvillea spectabilis Bracts as an Alternative to Nitrites in Cooked Pork Ham, Foods, 13 89) 3070.
8. Kaushik D., Kumar M., Proestos C., Oz F., Gupta P., Kumar A., Kundu P., Kaur J., Kumar V., Anjali A., Xiang J. (2023) A narrative review on the anti-inflammatory efficacy of Bougainvillea spectabilis Willd. and its various applications, Journal of Agriculture and Food Research, 12, 100570.
9. Salazar-Hernández C, Salazar-Hernández M, Mendoza-Miranda J.M, León-Reyes M.R, Rocha-Ramírez A.H (2024) Mesoporous Silica-Based Drug Delivery Systems Obtained from Sodium Silicate as an Economical Synthesis. In Trends and Challenges in Multidisciplinary Research for Global Sustainable Development. (Ed) Hernández-Ponce A.M, Escobar K.M, Canales Hernández L.D, Zea Ortiz M, Sánchez-Alonso R.E, Springer, ISBN 978-3-031-57619-5
10. Salazar-Hernández C, Salazar-Hernández M, Elorza-Rodríguez E, Mendoza-Miranda J.M, Miranda-Avilés R, León-Reyes M.R, Rodríguez-Dahmlow J.E (2026) Cr(III) Adsorption on Green Mesoporous Silica: Effect of Amine Functionalization and pH, Process, 1482), 358

11. Soheil Najm A, Bakar Mohamad A, Ludib N.A (2017) AIP Conference Proceedings, 1838, 020019.

POLIMERIZACIÓN POR APERTURA DE ANILLO DE Ɛ-CAPROLACTONA CON CATALIZADORES LIBRES DE METALES Y RECUPERABLES BASADOS EN SÍLICES MODIFICADAS UGM

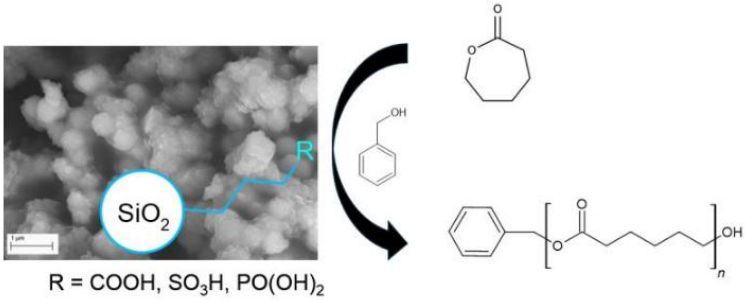
Delia Paulina Rodríguez-Garnica, Noé Saldaña-Piña, José Eduardo Bez, Gerardo González-García

Universidad de Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas, Depto. de Química.
dp.rodriguezgarnica@ugto.mx

RESUMEN

Los materiales están cambiando cada vez más a materiales biodegradables, pues existe la necesidad actual de materiales que tengan la capacidad de descomponerse de forma natural en un periodo de tiempo corto, especialmente en aplicaciones biomédicas[1]. Los poliésteres alifáticos, son uno de los materiales biodegradables más investigados en las últimas tres décadas[2], pues no sólo son polímeros biodegradables, sino también biocompatibles. En particular, la poli-ε-caprolactona (PCL) ha atraído gran atención debido a su amplio uso en diversas aplicaciones en medicina, farmacia e ingeniería de tejidos[3] como medio para la liberación controlada de medicamentos.

Los materiales de sílices mesoporosas funcionalizadas UGM-fx con diferentes grupos ácidos (COOH), (SO_3H) y ($PO(OH)_2$)[4] fueron utilizados como catalizadores heterogéneos con perfil verde, para ser evaluados como iniciadores para la polimerización por apertura de anillo para la obtención de la ε-caprolactona en presencia de alcohol bencílico (Esquema 1).



Esquema 1. Síntesis de PCL usando sílices mesoporosas funcionalizadas UGM-fx con diferentes grupos ácidos (COOH), (SO_3H) y ($PO(OH)_2$).

La estructura y propiedades de estos materiales, junto con las condiciones de reacción, dieron lugar a polímeros de peso molecular de 2300-12000 Da a 160 °C por 4 horas de reacción, observando también la recuperación y reutilización del catalizador por hasta 4 ciclos, manteniendo pesos moleculares y porcentajes de conversión > 98%. Esta reacción sin uso de disolventes, ni reacciones secundarias no deseadas es lo que vuelve a estos catalizadores potenciales en su uso y recuperación. Los resultados obtenidos nos permiten considerar la evaluación de la funcionalidad de los polímeros como nanobiocomposites (PCL-UGM-fx) en la liberación controlada de fármacos.

INTRODUCCIÓN

La poli-ε-caprolactona (PCL) es uno de los polímeros sintéticos más importantes y ampliamente estudiados gracias a su controlable caracterización de la polimerización y biodegradabilidad[5]. Esto ha llevado a numerosas investigaciones incluyendo sus sistemas catalíticos, mecanismo de polimerización y técnicas de procesamiento[6]. La polimerización por apertura de anillo (ROP) es la ruta más utilizada para su síntesis[7], pues este proceso es una polimerización de un solo paso que puede ser catalizado por varios complejos metálicos que van desde metales simples hasta complejos organometálicos[8], y pueden controlarse en términos de peso molecular (Mn) y polidispersidad (Đ).

Hasta ahora, los complejos metálicos son los catalizadores más explorados para la producción de estos polímeros, incluidos aluminio[9], magnesio[10], calcio[11], titanio[12], complejos de hierro[13], zinc[14], estaño[15], metales de tierras raras[16], entre otros. Sin embargo, presentan la desventaja de resultar una contaminación con residuo metálico y no ser fácilmente recuperables[3].

Actualmente el catalizador más utilizado es $Sn(Oct)_2$, presentando excelentes resultados, pero se detecta la presencia de trazas en el polímero[17]. Por ello se han desarrollado diferentes alternativas, llegando con Wilson and Jones, que evaluaron materiales de sílice porosa y no porosa funcionalizada con ácido n-propilsulfónico, comprobando que todos sus catalizadores permiten una polimerización controlada del monómero, produciendo polímeros con pesos moleculares controlados y polidispersidades estrechas, sin embargo, sus velocidades de reacción fueron muy lentas[18].

Así, se presta atención a los materiales basados en sílices funcionalizadas[4], que han servido como catalizadores en la polimerización por apertura de anillo de la ε-caprolactona. Estos grupos funcionales pertenecen a los ácidos de Bröndsted, los cuales pueden llevar a cabo la polimerización catiónica por apertura de anillo, la cual fue propuesta por primera vez por S. Penczek en el 2000[19]. Es importante el desarrollo de nuevos catalizadores con complejos metálicos biocompatibles que combatan las reacciones de transesterificación a las que se enfrentan catalizadores conocidos para producir polímeros limpios y bien definidos mediante diferentes mecanismos de polimerización[20]. Sin embargo, siguen teniendo metales en su estructura, por lo que en este trabajo informamos la síntesis de la PCL a partir de catalizadores basados en sílices mesoporosas funcionalizadas UGM-fx [fx: -COOH, $-SO_3H$ y $-PO(OH)_2$], previamente sintetizados y caracterizados[4], libres de metales, que representan una alternativa verde en la evaluación en la reacción de polimerización por apertura de anillo para la PCL, obteniendo su recuperación y reutilización potencial como catalizador, y logrando polímeros de alto peso molecular, sin uso de disolventes, ni reacciones secundarias no deseadas.

PARTE EXPERIMENTAL

Síntesis de materiales UGM-fx

Los materiales UGM-COOH, UGM-SO_3H y UGM-$PO(OH)_2$ se sintetizaron y caracterizaron como se describe en nuestro trabajo anterior[4].

Polimerización por apertura de anillo de ε-caprolactona con UGM-fx.

Todas las reacciones de polimerización se realizaron en un tubo de ensayo como reactor en condiciones no secas[21]. En una reacción típica se utilizaron ε-caprolactona (1g, 8.75 mmol) con el catalizador UGM-fx (50mg, 0.35 mmol), en agitación. A esto se le añadió alcohol bencílico como iniciador (36.3 µL, 0.35 mmol) y se mantiene en agitación por 4 horas. El reactor se calentó a las diferentes temperaturas de trabajo, temperatura ambiente, 50 °C y 160 °C, en un baño de aceite precalentado. Relación molar [ε-CL]:[UGM-fx]:[BnOH], [25:1:1].

Al terminar el tiempo de reacción se tomó una porción alícuota del producto crudo y se caracterizó por espectroscopía ^{1}H RMN.

RESULTADOS

Las reacciones de polimerización de la ε-CL se llevaron a cabo en presencia de alcohol bencílico como iniciador y UGM-COOH, UGM-SO_3H y UGM-$PO(OH)_2$ como catalizadores, a diferentes temperaturas y relación molar [ε-CL]:[UGM-fx]:[BnOH], por un tiempo de reacción de 4 horas para todas las pruebas. La polimerización de ε-caprolactona se llevó a cabo utilizando especies de ácidos de tipo Brönsted inmovilizados en los soportes de sílice, con los silanoles superficiales desprotegidos.

Los resultados de la polimerización se enumeran en la Tabla 1.

Tabla 1. Polimerización por apertura de anillo de la ε-caprolactona con los catalizadores UGM-fx.

No.	Catalizador	[ε-CL]:[UGM-fx]:[BnOH]	Temp (°C)	Conv[a] (%)	Mn[a] (g·mol^{-1})	Mn[b] (g·mol^{-1})
1	UGM-COOH	25:1:1	25	98.09	3388	
2			50	98.53	3377	
3			160	97.78	7141	4877
4	UGM-SO_3H	25:1:1	25	98.82	2303	
5			50	98.31	2539	
6			160	99.19	12064	7559
7	UGM-$PO(OH)_2$	25:1:1	25	4.21	322	
8			50	5.17	340	
9			160	95.9	2773	2267

[a] Determinado por RMN ^1H
[b] Determinado por GPC

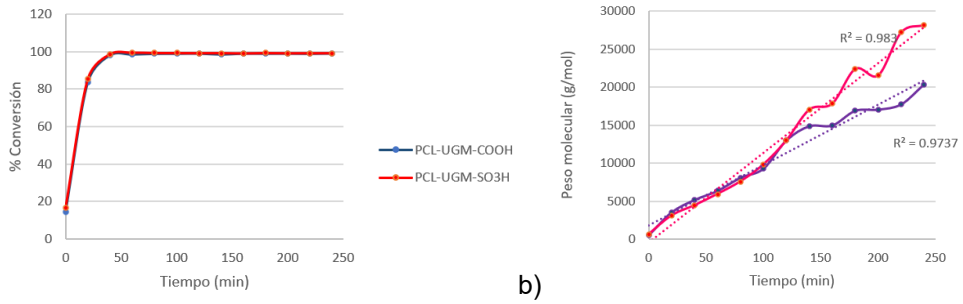
Para los PCL-UGM-$PO(OH)_2$ (Tabla 1, No. 7 y 8) a 25 y 50 °C no se observó actividad catalítica ni conversión significativa de monómero, por lo que la temperatura de 160 °C muestra resultados significativos en la formación de la poli-ε-caprolactona para éste, y el resto de los catalizadores.

Los PCL-UGM-COOH producen oligómeros a las tres temperaturas probadas, con porcentajes de conversión > 97 % y peso molecular de valores significativos (Tabla 1, No. 1-3).

Por otro lado, los PCL-UGM-SO_3H mostraron una mejor actividad catalítica, con excelentes valores de conversión > 99% y un Mn 12064 Da a 160 °C (Tabla 1, No. 6)

La reactividad de estos catalizadores UGM-fx como iniciadores en la ROP de ε-CL en las mismas condiciones son del orden UGM-SO_3H > UGM-COOH > UGM-$PO(OH)_2$.

Para conocer el comportamiento a detalle y la formación de la poli-ε-caprolactona con los catalizadores UGM-COOH y UGM-SO_3H (por los resultados previamente observados en la Tabla 1), se realizó una cinética de polimerización de ε-CL, con la cuál fue posible corroborar el orden de reactividad de los catalizadores UGM-fx utilizados (Figura 1).



a) b)

Figura 1. Cinética de reacción para UGM-PCL-fx, % Conversión vs. t (a), Mn vs. t (b)

Se observa el efecto de la conversión del monómero que aumenta directamente proporcional respecto al tiempo, de igual forma el valor de Mn, a 160 °C y apenas 60 min produjeron los mejores resultados para PCL-UGM-SO_3H, con % conversión > 99% y Mn de ~6000 Da, logrando al termino de las 4 horas de reacción un Mn > 28000 Da. Es importante mencionar que este Mn observado en la cinética se debe a la sensibilidad de la RMN a los grupos terminales, recordando que la cinética mide conversión, no longitud final.

En la figura 2 se muestra un espectro típico de RMN ^{1}H del polímero resultante poli-ε-caprolactona, junto con una tabulación de las señales características esperadas[22].

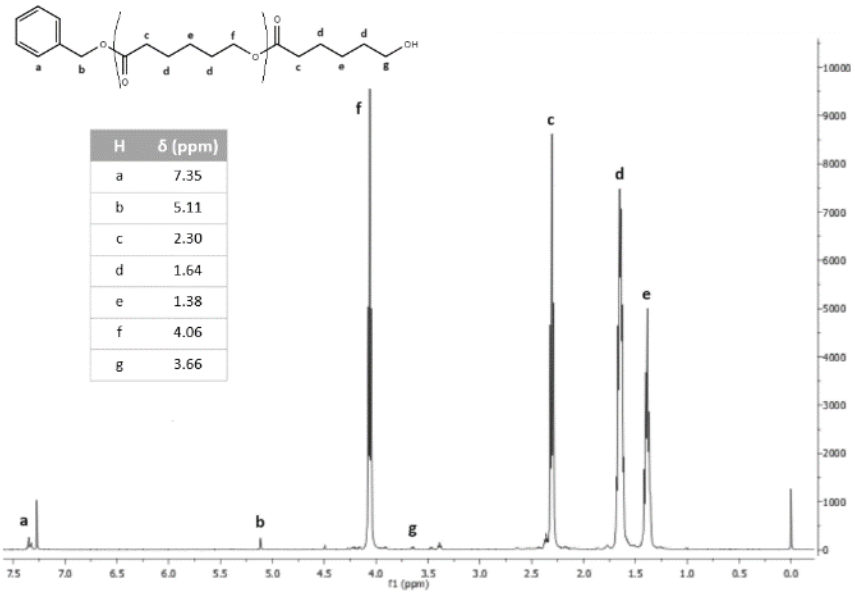


Figure 2. Espectro de RMN ^{1}H para la PCL-UGM-SO_3H a 160 °C, por 4 h.

Finalmente, en δ= 4.15 ppm encontramos el triplete que corresponde al monómero residual de las muestras (ε-CL). La espectroscopía de RMN ^{1}H reveló la existencia de grupos terminales del éster bencílico. Se utilizó espectroscopía cuantitativa de RMN ^{1}H para determinar el grado de polimerización (DP) del poli-ε-caprolactona, el porcentaje de conversión y el peso molecular (Mn)[21].

La reactividad del catalizador UGM-fx depende de la temperatura y tiempo de reacción, aumentando rápidamente al elevar la temperatura de reacción de 25 °C a 160 °C. Cabe mencionar que el catalizador es quien realiza la función de polimerización, pues se realizaron pruebas sin la presencia de alcohol bencílico y la formación del polímero se logra, sin embargo, no fue posible cuantificarla por no tener la referencia del grupo terminal en la espectroscopía de RMN ^{1}H para su cálculo.

El aumento de la reactividad y el alcance de estos resultados para la PCL-UGM-SO_3H, podría explicarse por la naturaleza inductiva de los sustituyentes, la acidez (mayor acidez del sitio, mejor actividad[3]) y el volumen del mismo, porque el centro menos voluminoso puede ser fácilmente abordado por el monómero ε-CL[9], así como la acidez del grupo funcional SO_3H >COOH > $PO(OH)_2$. Por otro lado, el notable aumento de la actividad catalítica con la adición de co-iniciadores de alcohol se debe a la producción de especies de alcóxidos que se sabe que aumentan los sitios activos[23].

Reutilizabilidad y reciclabilidad de los catalizadores UGM-fx

La recuperación y reciclabilidad de los catalizadores UGM-fx se probó durante cinco ciclos de polimerización, que se llevaron a cabo como se describió la síntesis de la PCL. Al final de la reacción, el catalizador se separó de la mezcla de reacción mediante decantación utilizando una centrifugadora. Después de lavar con cloroformo y secar, el sistema catalítico se utilizó en otra reacción de polimerización en las mismas condiciones descritas (160 °C).

Los resultados mostraron que después de cada uno de los ciclos de polimerización, los catalizadores fueron altamente reactivos en la reacción, manteniendo la conversión de monómero a polímero por encima del 97 % para UGM-SO_3H al cuarto ciclo de polimerización (Figura 3).

La integridad de los catalizadores reciclados se mantiene en cada ciclo, pues presenta gran estabilidad y potencial de material sólido para sistemas de catálisis heterogéneas en

polimerizaciones con apertura de anillo de ésteres cíclicos como la ε-caprolactona, pues su análisis de TGA demuestra que mantiene su materia orgánica hasta los 200 °C (información de soporte).

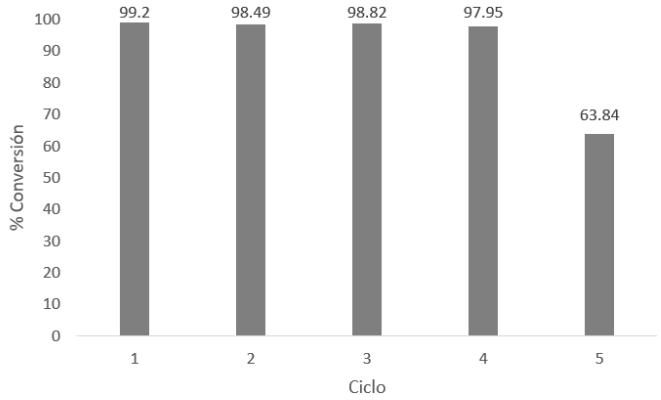


Figura 3. Gráfica de % conversión vs ciclo para la PCL-UGM-SO_3H

Esta recuperación del catalizador hasta de 4 ciclos con % conversión mayores al 97%, nos abre un abanico de posibilidades en el uso de estos catalizadores libres de metales con perfil verde, para aplicaciones del tipo biomédico, y por consiguiente el cuidado del ambiente. Si bien, hay una pérdida significativa del Mn conforme se recupera el catalizador, nos da una apertura de estudio para reactivar el catalizador y lograr polímeros de alto Mn.

CONCLUSIONES

Los materiales UGM-fx se utilizaron con éxito como catalizadores heterogéneos para la ROP de ε-CL en presencia de alcohol bencílico (BnOH). El uso de estos catalizadores con su grupo funcional orgánico mejora la actividad catalítica para la polimerización con apertura de anillo de poli(ε-caprolactona), logrando llevar a cabo la ROP desde temperatura ambiente hasta temperaturas de 160 °C obteniendo pesos moleculares entre 2300-12000 Da, con porcentajes de conversión incluso > 99%. Se observo que los catalizadores UGM-COOH y UGM-SO_3H exhiben un buen control sobre la polimerización, sin embargo, este último presento mejor actividad catalítica para esta polimerización, pudiendo soportar hasta 4 ciclos de recuperación después de haber llevado a cabo la reacción ROP, manteniendo la integridad del catalizador con % conversión > 98%.

BIBLIOGRAFÍA

1. F. Yasmin and M. A. Rahaman, "*2D ZIF-L(Zn) for Hybrid Copolymerization of Methyl Methacrylate and Ɛ-caprolactone under solvent-free medium*", J. Sci. Res., 16 (1), 2024, pp. 253-264.
2. X. Li, C. Chen and J. Wu, "*Lewis Pair Catalysts in the Polymerization of Lactide and Related Cyclic Esters", Molecules*, 23, 2018, pp. 189.
3. B.C. Wilson, C.W. Jones, *"A recoverable, metal-free catalyst for the green polymerization of Ɛ-caprolactone", Macromolecules,* 37, 2004, pp. 9709-9714.
4. P. Rodríguez-Garnica, M.M. Salazar-Hernández, J. Maldonado-Estudillo, N. Saldaña-Piña, G. Sotelo-Rodríguez, B. Huichapa-Rocha, G. González-García, A. Alatorre-Ordaz, J.A. Gutiérrez, "*Nonordered porous silica-based pure inorganic and hybrid organic inorganic materials prepared by a nonaqueous, nonthermal sol-gel process", Mater. Chem. Phys.,* 229, 2019, pp. 156-166.
5. M. Bartnilowski, T.R. Dargaville, S. Ivanovski and D.W. Hutmacher, "*Degradation mechanisms of polycaprolactone in the context of chemistry, geometry and environment", Prog. Polym. Sci*, 96, 2019, pp. 1-20.
6. K. Wang, N. Ming, A. A. Dundas, G. Dimitrakis and D.J. Irvine, "*Ring opening polymerization of Ɛ-caprolactone with novel microwave magnetic heating and cyto-compatible catalyst", Bioengineering and Biotechnology,* 11, 2023, pp. 1-11.

7. L. Fenghong, S. Yan, L. Pengzhen and J. Tianci, "*Research Progress of Ring-opening polymerization of Ɛ-caprolactone initiated by degradable biopolymers", Current Organic Chemistry*, 24 (13), 202, pp. 1507-1516.
8. G.X. De Hoe, T. Sucu and M.P. Shaver, "*Sustainability and Polyesters: Beyond metals and monomers to function and fate", Acc. Chem. Res.,* 55, 2022, pp. 1514-1523.
9. W. Yao, Y. Mu, A. Gao, Q. Su, Y. Liu and Y. Zhang, "*Efficient ring-opening polymerization of 3-caprolactone using anilido-imine-aluminium complexes in the presence of benzyl alcohol", Polymer,* 49, 2008, pp. 2486-2491.
10. M.H. Chisholm, N.W. Eilerts, J.C. Huffman, S.S. Iyer, M. Pacold and K. Phomphrai, "*Molecular Design of single-site metal alkoxide catalyst precursors for ring-opening polymerization reactions leading to polyoxygenates", J. Am. Chem. Soc.,* 122 (48), 2000, pp. 11845-11854.
11. Z. Zhong, P.J. Dijkstra, C. Birg, M. Westerhause, J. Feijen, "*A novel and versatile calcium-based initiator system for the ring-opening polymerization of cyclic esters", Macromolecules,* 34 (12), 2001, pp. 3863-3868.
12. A.J. Chmura, M.G. Davidson, M.D. Jones, M.D. Lunn and M.F. Mahon, "*Group 4 complexes of amine bis(phenolate)s and their application for the ring opening polymerization of cyclic esters", Dalton Transactions*, 887, 2006.
13. B.J. O´Keefe, L.E. Breyfogle, M.A. Hillmyer and W.B. Tolman, "*Mechanistic comparison of cyclic ester polymerizations by Novel Iron (III)-Alkoxide complexes: single vs multiple site catalysis", J. Am. Chem. Soc.,* 124 (16), 2002, pp. 4384-4393.
14. D.A. Walker, T.J. Woodman, M. Schormann, D.L. Hughes and M. Bochmann, "*Synthesis, structures, and ring-opening polymerization reactions of substituted cyclopentadienyl complexes of zinc", Organometallics,* 22, 2003, pp. 797-803.
15. M. Müller, R. Kange, J.L. Hedrick, "*$Sn(OTf)_2$ and $Sc(OTf)_3$: Efficient and versatile catalysts of the controlled polymerization of lactones", J. Polym Sci Part A Polym. Chem.,* 38 (11), 2000, pp. 2067-2074.
16. H. Ma, T.P. Spaniol and J. Okuda, "*Rare earth metal complexes supported bye 1, ω-dithiaalkanediyl-bridged bis (phenolato) ligands: synthesis, characterization and ring-opening polymerization catalysis of L-Lactide", Dalton Transactions,* 24, 2003, pp. 4770-4780.
17. A. Kowalski, A. Duda, S. Penczek, "*Mechanism of cyclic ester polymerization initiated with Tin(II) Octoate. 2. Macromolecules Fitted with Tin(II) Alkoxide species observed directly in MALDI-TOF Spectra", Macromolecules,* 33 (3), 2000, pp. 689-695
18. B.C. Wilson and C.W. Jones, "*A Recoverable, metal-free catalyst for the green polymerization of Ɛ-caprolactone", Macromolecules,* 37, 2004, pp. 9709-9714.
19. S. Penczenk, "*Cationic Ring-Opening polymerization (CROP) major mechanistic phenomena", Journal of Polymer Science: Part A: Polymer Chemistry,* 38, 2000, pp. 1919-1933.
20. D.C. Akintayo, W.A. Munzeiwa, S.B. Jonnalagadda, B. Omondi, "*Ring-opening polymerization of lactides and Ɛ-caprolactone catalyzed by Zn(II) aryl carboxylate complexes supported by 4-pyridinyl Schiff base ligands", Heliyon,* 9, 2023**, pp.** 13514.
21. F.G. Alcocer, A.C. Castro, J.O.C. Jimenez-Halla, N. Saldaña-Piña, M.V. Basavanag, J.E. Báez-García, J. Bonilla-Cruz, J.A. López and G. González-García, "*Neutral Hexacoordinate Tin(IV) Halide complexes with 4,4 Dimethy-2,2bipyridine", Z. Anorg. Allg. Chem,* 646, 2020, pp. 1274-1280.
22. W. Yao, Y. Mu, A. Gao, Q. Su, Y. Liu and Y. Zhang, "*Efficient ring-opening polymerization of ε-caprolactone using anilido-imine-aluminum complexes in the presence of benzyl alcohol*", *Polymer*, 49, 2008, pp. 2486-2491.
23. N. Ikpo, C. Hoffmann, L.N. Dawe, F.M. Kerton, *"Ring-opening polymerization of epsilon-caprolactone by lithium piperazinyl-aminephenolate complexes: synthesis, characterization and kinetic studies*", *Dalton Trans*., 41, 2012, pp. 6651–6660.

OBTENCIÓN DE CARBOXILATOS METÁLICOS DE COBRE(II), ZINC(II) Y CADMIO(II) CON ÁCIDO CÁPRICO

Arleth Guadalupe Ramírez-Duarte, Xochitl Aparicio-Fernandez, Egla Yareth Bivián-Castro, Gabrieal Camarillo-Martínez, Cristhian Eduardo Maciel-Flores

Centro Universitario de Los Lagos, Universidad de Guadalajara
egla.bivian@academicos.udg.mx

RESUMEN

Los carboxilatos metálicos son compuestos de interés en química inorgánica debido a sus propiedades catalíticas, biológicas y aplicaciones en materiales avanzados. Entre ellos, los complejos de Cu(II), Zn(II) y Cd(II) destacan por su diversidad estructural y potencial en aplicaciones biomédicas. El ácido cáprico (AC), presente en aceites naturales y grasas animales, representa un ligando atractivo debido a sus propiedades biológicas, su disponibilidad y su capacidad de coordinación. En este trabajo se propuso la obtención y caracterización complejos metálicos de Cu(II), Zn(II) y Cd(II) con ácido cáprico. Para ello, se siguieron algunas rutas de síntesis, en las que el ligando se disolvió en medios acuosos o etanólicos, se añadió NaOH para ajustar el pH, y se adicionaron las sales metálicas correspondientes ($CuCl_22{\cdot}H_2O$, $Cu(NO_3)_2{\cdot}2H_2O$, $ZnCl_2$ y $CdCl_2$). Los productos obtenidos se aislaron por filtración y se caracterizaron mediante pruebas de solubilidad, espectroscopía infrarroja (FT-IR) en la región media y lejana; y análisis termogravimétrico (TGA/DTG) para los complejos de Zn(II) y Cd(II). Se obtuvieron sólidos con características diferenciadas: sólidos de color azul en las síntesis con Cu(II), y sólidos blancos en las de Zn(II) y Cd(II). A partir de los espectros FT-IR se confirmó la coordinación del grupo carboxilato a los centros metálicos mediante las bandas de estiramiento características ν(C=O), $\nu_{as}(COO^-)$, $\nu_s(COO^-)$ y ν(M-O). Por su parte, los estudios TGA mostraron estabilidad térmica inicial en los complejos de Zn(II) y Cd(II), con descomposición progresiva del ligando y formación de óxidos metálicos; observándose mayor resistencia térmica en el complejo de Zn(II). Con base en los resultados experimentales, se propusieron las siguientes fórmulas para los complejos obtenidos: $[Cu(AC)_2]$, $[Zn(AC)_2]$ y $[Cd(AC)_2]$. En conclusión, las rutas empleadas permitieron obtener compuestos de coordinación de Cu(II), Zn(II) y Cd(II) con ácido cáprico. La caracterización espectroscópica, estructural y térmica validó la coordinación del ligando y su estabilidad, evidenciando el potencial del ácido cáprico en la síntesis de carboxilatos metálicos con posibles aplicaciones tecnológicas y biomédicas.

INTRODUCCIÓN

Los carboxilatos metálicos constituyen una importante familia de compuestos en química inorgánica debido a sus diversas propiedades estructurales, catalíticas y biológicas, así como a su potencial aplicación en la síntesis de materiales avanzados. Entre ellos, los carboxilatos derivados de metales como el zinc (Zn), el cadmio (Cd) y el cobre (Cu) han despertado especial interés por su versatilidad estructural, su reactividad química y sus posibles aplicaciones en áreas como la catálisis, la liberación de fármacos y el desarrollo de materiales funcionales[1]. Por otra parte, el ácido cáprico o ácido decanoico es un ácido graso de cadena media presente en diversas fuentes naturales, especialmente en aceites vegetales y productos lácteos. Debido a sus propiedades fisicoquímicas, estabilidad y relevancia biológica, este compuesto ha encontrado aplicaciones en las industrias farmacéutica, alimentaria y cosmética, además de representar una molécula de interés en el diseño de nuevos materiales y sistemas de coordinación[2]. En este contexto, la síntesis de carboxilatos metálicos de Zn(II), Cd(II) y Cu(II) utilizando ácido cáprico como ligando constituye una estrategia de interés para el desarrollo de nuevos compuestos con propiedades fisicoquímicas potencialmente útiles. El estudio de estos sistemas permite profundizar en la comprensión de las interacciones entre metales de transición y ligandos orgánicos, así como evaluar su posible aplicación en áreas relacionadas con la biomedicina y los materiales funcionales[3].

TEORÍA

Generalidades de los carboxilatos metálicos

Los carboxilatos metálicos son compuestos formados por la coordinación entre un ion metálico y uno o más grupos carboxilato (R-COO-), los cuales derivan de ácidos carboxílicos (R-COOH) tras la desprotonación del grupo carboxilo. En la estructura general, R puede representar un grupo alquilo o arilo. En este tipo de compuestos, el ion metálico se coordina con uno o varios grupos carboxilato. Dependiendo de la geometría del metal y el número de átomos involucrados en la coordinación, los complejos pueden adoptar modos de enlace monodentado, bidentado o polidentado[4]. A continuación, en la Figura 1 se presentan los diferentes modos de coordinación de los ligandos carboxilatos: monodentada (a), bidentada (b) o puente (c).

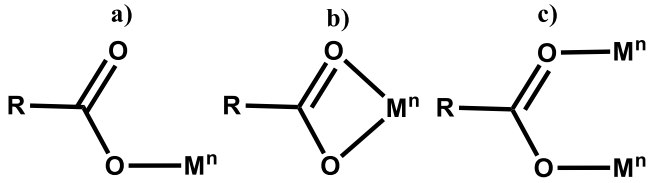


Figura 1. Modos de coordinación del grupo carboxilato.

La capacidad del grupo carboxilato para estabilizar distintos entornos de coordinación ha permitido el desarrollo de una amplia variedad de complejos metálicos con geometrías diversas, tales como tetraédricas, octaédricas, entre otras, así como redes extendidas tipo polímeros de coordinación y arreglos metalorgánicos (MOFs, por sus siglas en inglés). En estos materiales, los ligandos carboxilato aportan rigidez estructural, mientras que los centros metálicos confieren propiedades electrónicas, catalíticas y magnéticas específicas. Las propiedades fisicoquímicas de los carboxilatos metálicos dependen tanto del metal central como del ligando orgánico coordinado. Estos compuestos pueden presentar desde alta solubilidad en medios acuosos hasta una marcada afinidad por disolventes orgánicos, especialmente cuando el ligando posee cadenas alifáticas largas o grupos hidrofóbicos. Asimismo, muchos carboxilatos metálicos exhiben elevada estabilidad térmica y resistencia química, lo que ha favorecido su estudio en aplicaciones catalíticas, en ciencia de materiales y en procesos de transformación química[1,5].

Desde una perspectiva biológica y biomédica, los carboxilatos metálicos también han mostrado aplicaciones relevantes. Diversos complejos presentan actividad antimicrobiana, antioxidante o citotóxica selectiva, y han sido propuestos como sistemas de liberación controlada de fármacos, donde la coordinación metal-ligando permite modular la estabilidad, biodisponibilidad y selectividad del principio activo[6]. En este contexto, el uso de ligandos carboxilato derivados de compuestos bioactivos representa una estrategia atractiva para el diseño de nuevos sistemas con potencial terapéutico. Además, en años recientes, los carboxilatos metálicos han adquirido especial relevancia en áreas como la fotocatálisis y la química radicalaria. Se ha demostrado que los complejos metal-carboxilato pueden participar en procesos de transferencia de carga ligando-metal fotoinducida (LMCT), generando radicales carboxilos mediante la homólisis del enlace metal-oxígeno bajo irradiación visible. Estos procesos permiten la activación directa de carboxilatos en condiciones suaves, es decir, bajo irradiación con luz visible, a temperatura ambiente, abriendo nuevas rutas sintéticas para la formación de enlaces C-C, C-O, C-N y C-P sin el uso de oxidantes fuertes o catalizadores costosos[7].

Los ligandos tipo carboxilatos de interés biológico han despertado un creciente interés, debido a que la coordinación con centros metálicos puede modificar o potenciar las propiedades del ligando libre. Al formar complejos metálicos, estas moléculas pueden experimentar cambios en su reactividad, estabilidad y comportamiento biológico, dando lugar a sistemas con aplicaciones potenciales en el desarrollo de metalofármacos[8]. Entre los ligandos carboxilato bioactivos se encuentra el ácido cáprico (ácido decanoico, $C_{10}H_{20}O_2$) del cual en la Figura 2 se muestra su estructura química. Este es un ácido graso saturado de cadena media presente de forma natural en aceites, grasas animales y vegetales; es empleado en la industria alimentaria, cosmética y farmacéutica, y forma parte de los

triglicéridos de cadena media (MCTs), utilizados por sus beneficios metabólicos y energéticos[2].

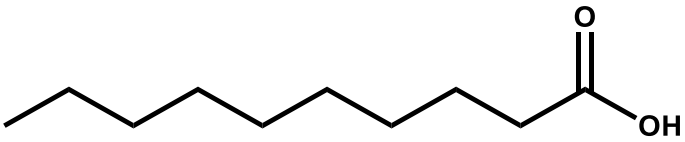


Figura 2. Estructura química del ácido cáprico o decanoico.

Desde el punto de vista químico, el ácido cáprico posee una cadena alifática hidrofóbica que cuando este forma complejos de coordinación con un centro metálico, puede conferir a los complejos resultantes propiedades particulares de solubilidad, estabilidad y afinidad por medios biológicos lipofílicos. Estas características lo convierten en un ligando atractivo para la síntesis de carboxilatos metálicos con potencial aplicación en sistemas de liberación controlada, formulaciones farmacéuticas y estudios de interacción metal-biomolécula[9].

PARTE EXPERIMENTAL

La síntesis de los complejos metálicos de Cu(II), Zn(II) y Cd(II) se realizó siguiendo metodologías previamente reportadas en la literatura, con adaptaciones específicas a las condiciones de esta investigación[10-12].

Ruta de síntesis 1: Cu-AC.

Se preparó una solución A con 1 mmol de ácido cáprico disuelto en 7 mL de una mezcla de agua desionizada y etanol (5:2), bajo agitación constante. Posteriormente, se adicionó 1 mmol de NaOH y se ajustó el pH a 7 mediante la adición de HCl a 0.5 M. Se preparó una solución B con 1 mmol de $CuCl_2 \cdot 2H_2O$ disueltos en 4 mL de agua desionizada. Esta solución fue añadida lentamente a la solución A mediante goteo controlado. La mezcla se mantuvo en agitación constante durante 24 h a temperatura ambiente. El proceso completo se resume visualmente en la Figura 3.

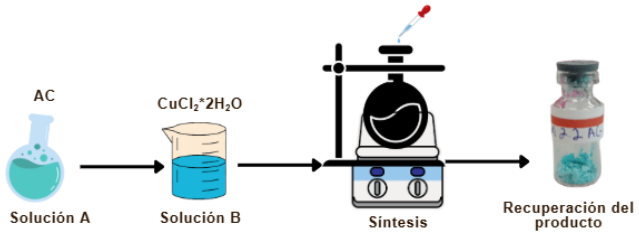


Figura 3. Esquema general de la ruta sintética 1 (Cu-AC), empleada para la obtención del complejo de Cu(II) con ácido cáprico.

Ruta de síntesis 2: Zn-AC

Se preparó una solución A con 0.2 mmol de ácido cáprico disuelto en 10 mL de agua desionizada, bajo agitación constante. Posteriormente, se adicionó 0.2 mmol de NaOH y se ajustó el pH a 7 mediante la adición de HCl a 0.5 M. Se preparó una solución B con 0.2 mmol de $ZnCl_2$ disueltos en una mezcla de 5 y 5 mL de metanol y agua desionizada, respectivamente. Esta solución fue añadida lentamente a la solución A mediante goteo controlado. La mezcla se mantuvo en agitación constante durante 24 h a temperatura ambiente. El proceso completo se resume visualmente en la Figura 4.

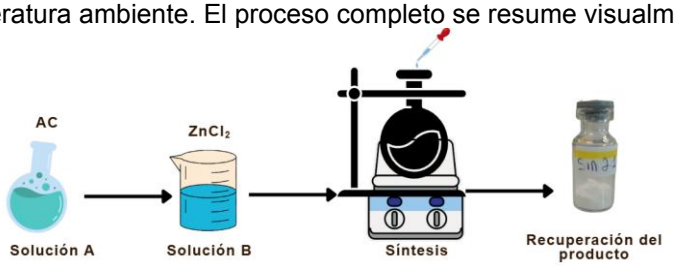


Figura 4. Esquema general de la ruta sintética 2 (Zn-AC), empleada para la obtención del complejo de Zn(II) con ácido cáprico.

De acuerdo con los resultados obtenidos para esta ruta de síntesis, se realizaron tres repeticiones de la misma, para evaluar la reproducibilidad del método. Los datos obtenidos en cada repetición para la ruta sintética 2 (Zn-AC), incluyendo las condiciones utilizadas se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1. Concentrado de repeticiones de la síntesis 2 (Zn-AC).

Síntesis	AC (g)	$ZnCl_2$ (g)	Masa de sólido (g)	Rendimiento (%)
2	0.0346	0.0272	0.0285	60%
2.1	0.0387	0.0281	0.0239	50.3%
2.2	0.0356	0.0262	0.0298	62.73%

Ruta de síntesis 3: Cd-AC

Se preparó una solución A con 0.2 mmol de ácido cáprico disuelto en 10 mL de agua desionizada, bajo agitación constante. Posteriormente, se adicionó 0.2 mmol de NaOH y se ajustó el pH a 7 mediante la adición de HCl al 0.5 M. Se preparó una solución B con 0.2 mmol de $CdCl_2$ disueltos en una mezcla de 5 y 5 mL de metanol y agua desionizada. Esta solución fue añadida lentamente a la solución A mediante goteo controlado. La mezcla se mantuvo en agitación constante durante 24 h a temperatura ambiente. El sólido fue recuperado por filtración al vacío, secado a temperatura ambiente y almacenado para su caracterización. El proceso se resume visualmente en la Figura 5.

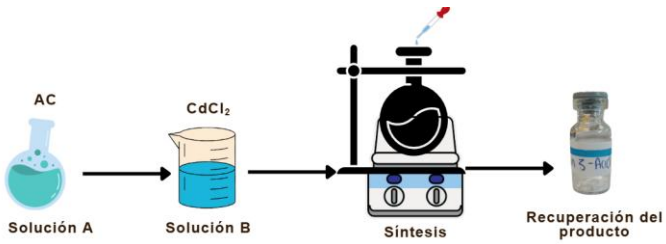


Figura 5. Esquema general de la ruta sintética 3 (Cd-AC), empleada para la obtención del complejo de Cd(II) con ácido cáprico.

De acuerdo con los resultados obtenidos para esta ruta de síntesis, se realizaron tres repeticiones de la misma, para evaluar la reproducibilidad del método. Los datos obtenidos en cada repetición para la ruta sintética 3 (Cd-AC), incluyendo las condiciones utilizadas se presentan en la Tabla 2.

Tabla No. 2. Concentrado de repeticiones de la síntesis 3 (Cd-AC).

Síntesis	AC (g)	$CdCl_2$ (g)	Masa de sólido (g)	Rendimiento (%)
3	0.0386	0.0493	0.0425	74.7%
3.1	0.0387	0.0281	0.0339	59.58%
3.2	0.0356	0.0262	0.0498	87.52%

Caracterización

Pruebas de solubilidad se realizaron pesando 5-10 mg de los sólidos obtenidos y se les adicionó 1 mL de una serie de disolvente como: agua desionizada, metanol, etanol, acetona, cloroformo, dimetilsulfóxido (DMSO), N,N-dimetilformamida (DMF) y hexano. La solubilidad se evaluó de manera cualitativa, registrando la apariencia de la solvatación (solvatación completa, solubilidad parcial o insolubilidad). Análisis por espectroscopía infrarroja se realizaron en dos regiones: infrarrojo medio (4,000-400 cm^{-1}) e infrarrojo lejano (700-200 cm^{-1}). Estos fueron realizados en un equipo Perkin Elmer modelo Frontier con accesorio de ATR (Reflectancia Total Atenuada). Los análisis termogravimétricos se realizaron con un equipo de TA Instruments Q600 a una velocidad de calentamiento de 5 °C·min^{-1} y un flujo de nitrógeno (N_2) de 20 cm^3·min^{-1}.

RESULTADOS

Ruta de síntesis 1: Cu-AC

De la ruta de síntesis 1 se aisló un sólido en forma de polvo fino de color azul el cual se muestra en la Figura 6.



Figura 6. Sólido obtenido de la ruta de síntesis 1 Cu-AC.

En el espectro FT-IR de la región media (Figura 7) correspondiente al sólido obtenido mediante la ruta de síntesis 1 (Cu-AC), se observaron bandas entre 2954 y 2849 cm^{-1} atribuidas a las vibraciones de estiramiento ν(C-H) de los grupos metilo y metilenos presentes en la cadena alifática del ligando. Así mismos, se identificaron señales a 1582 y 1423 cm^{-1}, asociadas a los modoso de estiramiento asimétrico $\nu_{as}(COO^-)$ y simétrico $\nu_s(COO^-)$ del grupo carboxilato, respectivamente. La diferencia entre ambas frecuencias (Δv = 159 cm^{-1}) sugiere un modo de coordinación bidentado de tipo quelato o una coordinación bidentada débil del grupo carboxilato al centro metálicos[13].

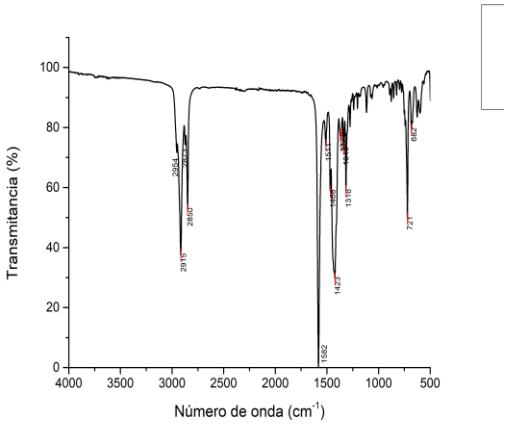


Figura 7. Espectro FT-IR medio del sólido obtenido por la ruta de síntesis 1 Cu-AC.

Ruta de síntesis 2: Zn-AC

Los sólidos obtenidos por esta ruta de síntesis 2 (Zn-AC) presentaron un aspecto blanco opaco, con textura granulada y dispersión moderada (Figura 8). El rendimiento promedio fue de 57.68%, con una variación aceptable entre repeticiones, lo que indica buena reproducibilidad bajo las condiciones empleadas (Tabla 1). El sólido fue insoluble en agua, y hexano, y mostró solubilidad parcial en metanol, etanol, acetona, cloroformo, DMSO y DMF, lo que sugiere una afinidad moderada hacia disolventes polares apróticos y próticos, aunque sin llegar a una completa solubilidad. Este comportamiento indica que el complejo presenta una estructura con regiones polares accesibles, pero también componentes hidrofóbicos que limitan su disolución total[14].



Figura 8. Sólido obtenido de la ruta sintética 2 (Zn-AC).

Las señales más representativas y sus asignaciones observadas en los espectros FT-IR de la región

medio y lejano (Figura 9a y 9b, respectivamente) del compuesto obtenido por la ruta sintética 2 (Zn-AC) se describen a continuación. En la región media se identificaron bandas entre 2953-2849 cm^{-1}, atribuidas a las vibraciones de estiramiento ν(C-H) de los grupos alifáticos presentes en la cadena hidrocarbonada del ligando. Asimismo, se observaron señales en el intervalo de 1532 y 1456 cm^{-1}, asociadas a los modoso de estiramiento asimétrico ν_{as} (COO^-) y simétrico ν_s (COO^-) del grupo carboxilato, respectivamente. La diferencia entre ambas frecuencias (Δv = 76 cm^{-1}) sugiere un modo de coordinación bidentada. Bandas entre 1316 y 1277 cm^{-1} correspondientes a las vibraciones ν(C-O). La presencia de estas señales confirma la conservación de la estructura alifática del ligando derivado del ácido cáprico y su participación en la coordinación con el centro metálico. En la región lejana del espectro se detectaron señales a 578 y 549 cm^{-1}, asignadas a las vibraciones de estiramiento ν(Zn-O), características de la coordinación entre el ion Zn(II) y los átomos de oxígeno del grupo carboxilato. Además, se observaron bandas a 493 cm^{-1}, relacionadas con modos de flexión del entorno Zn-O δ(Zn-O), y una señal a 463 cm^{-1} atribuida a vibraciones secundarias del sistema coordinado. Finalmente, las absorciones registradas a 398 y 373 cm^{-1} pueden asociarse a modos de torsión y flexión del complejo, que involucran tanto las interacciones metal–ligando como movimientos internos de la estructura coordinada[13].

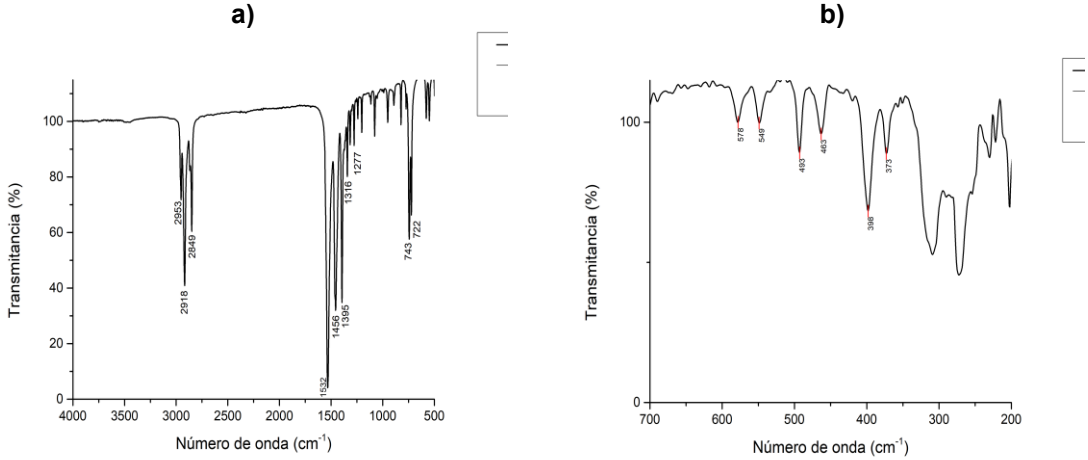


Figura 9. Espectros FT-IR medio (a) y lejano (b) de la ruta sintética 6 (Zn-AC).

El análisis termogravimétrico (TGA) de la ruta sintética 2 (Zn-AC) mostró un comportamiento característico de descomposición en múltiples etapas. Inicialmente, el material permaneció estable hasta aproximadamente 300 °C, manteniendo cerca del 100% de su masa residual. Posteriormente, se observó una pérdida significativa de peso entre 330 y 430 °C, atribuida a la descomposición del ligando carboxilato derivado del ácido cáprico y a la ruptura de las interacciones coordinadas con el centro metálico de zinc. El análisis diferencial (DTG) evidenció dos picos principales en esta región, lo que sugiere procesos de degradación escalonados. Después de los 430 °C, la curva se estabilizó en torno al 20% de masa residual, indicando la presencia de un residuo inorgánico estable, probablemente asociado a óxidos de zinc. Este comportamiento confirma la formación de un complejo coordinado con estabilidad térmica moderada y una descomposición definida en etapas, coherente con la naturaleza de los ligandos carboxilato y la coordinación metálica[15].

Ruta de síntesis 3: Cd-AC

Los sólidos obtenidos por esta ruta de síntesis (Cd-AC) presentaron un aspecto blanco opaco, con textura granulada y dispersión homogénea (Figura 10). El rendimiento promedio fue de 73.93%, con variabilidad aceptable entre repeticiones (Tabla 2). El sólido fue insoluble en agua, y hexano, mostró solubilidad parcial en metanol, etanol, acetona, cloroformo, DMSO y DMF, lo que indica una afinidad moderada hacia disolventes polares orgánicos, tanto próticos como apróticos, aunque sin alcanzar una solubilidad completa. Este comportamiento sugiere que el complejo presenta regiones polares capaces de interactuar con estos medios, pero también componentes hidrofóbicos que limitan su disolución total[14].



Figura 10. Sólido obtenido de la ruta sintética 3 (Cd-AC).

Las señales más representativas y sus respectivas asignaciones observadas en los espectros FT-IR de la región media y lejana (Figura 11a y 11b, respectivamente) del compuesto obtenido mediante la ruta sintética 3 (Cd-AC) se describen a continuación. En la región media se identificaron bandas entre 2955 y 2851 cm^{-1}, atribuidas a las vibraciones de estiramiento ν(C-H) de los grupos alifáticos presentes en la cadena hidrocarbonada del ligando. Asimismo, se observaron señales en 1544 y 1419 cm^{-1}, asignadas a los modos de estiramiento asimétrico $\nu_{as}(COO^-)$ y simétrico $\nu_s(COO^-)$ del grupo carboxilato, respectivamente. La diferencia entre ambas frecuencias (Δv = 125 cm^{-1}) sugiere un modo de coordinación bidentada. Adicionalmente, se registraron bandas en el intervalo de 1199-1076 cm^{-1}, correspondientes a las vibraciones ν(C-O), las cuales confirman la presencia del ligando derivado del ácido cáprico y su participación en la coordinación con el ion metálico. En la región lejana del espectro se observaron absorciones a 596 cm^{-1}, asociadas a modos de deformación del grupo carboxilato coordinado, lo que evidencia su interacción con el centro metálico. Asimismo, la banda localizada a 539 cm^{-1} fue atribuida a las vibraciones de estiramiento ν(Cd-O), características de la coordinación entre el ion Cd(II) y los átomos de oxígeno del grupo carboxilato. Por otra parte, la señal a 492 cm^{-1} se relaciona con modos de flexión δ(Cd-O) del entorno de coordinación, mientras que las bandas observadas a 450 y 385 cm^{-1} pueden asociarse a vibraciones de torsión y deformación de baja energía del sistema coordinado, involucrando tanto las interacciones metal–ligando como movimientos internos de la estructura del complejo[13].

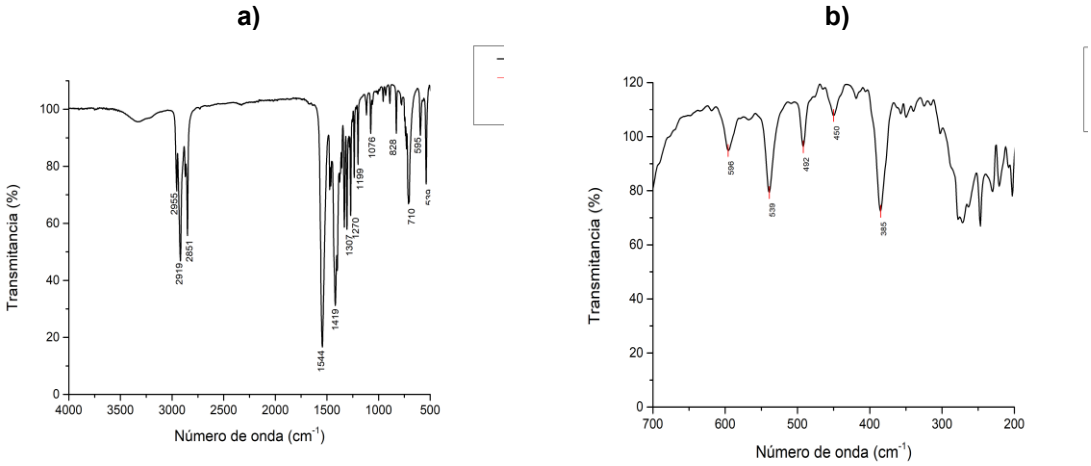


Figura 11. Espectros FT-IR medio (a) y lejano (b) de la ruta sintética 8 (Cd-AC).

El análisis termogravimétrico (TGA) de la ruta sintética 3 (Cd-AC) evidenció un perfil de descomposición en múltiples etapas. El material mostró estabilidad inicial hasta aproximadamente 230 °C, manteniendo cerca del 100% de su masa residual. Entre 230 y 330 °C se observó una pérdida marcada de peso, atribuida a la degradación inicial del ligando carboxilato derivado del ácido cáprico y a la ruptura de enlaces coordinados con el cadmio. El análisis diferencial (DTG) reveló un pico principal en torno a 330 °C, confirmando este proceso de descomposición. Posteriormente, se registraron pérdidas adicionales más graduales entre 530 y 630 °C, asociadas a procesos secundarios de degradación del esqueleto hidrocarbonado del ligando. Finalmente, la curva se estabilizó con un residuo cercano al 20%, lo que sugiere la formación de un residuo inorgánico estable, probablemente óxidos de cadmio. Este comportamiento confirma la formación de un complejo coordinado con estabilidad térmica moderada y una descomposición definida en etapas, coherente con la naturaleza del ligando carboxilato y la coordinación metálica[16].

De acuerdo con estos resultados de los análisis FT-IR y TGA, así como reportes previos se propone que los compuestos obtenidos por las rutas de síntesis 1 (Cu-AC), 2 (Zn-AC) y 3 (Cd-AC) pueden presentar la estructura química que se muestra en la Figura 12.

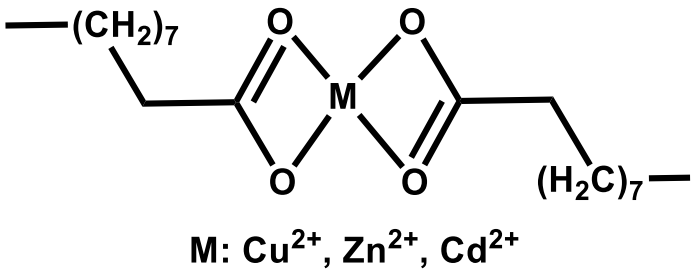


Figura 12. Posible estructura química para los carboxilatos de AC con Cu(II), Zn(II) y Cd(II).

CONCLUSIONES

En este trabajo se logró la síntesis de complejos metálicos de Cu(II), Zn(II) y Cd(II) empleando ácido cáprico como ligando. Los productos obtenidos presentaron características físicas distintivas y pudieron ser aislados con éxito como sólidos estables. A partir de los resultados de las distintas técnicas de caracterización se propusieron las fórmulas $[Cu(AC)_2]$, $[Zn(AC)_2]$ y $[Cd(AC)_2]$. Por espectroscopía FT-IR se confirmó la coordinación del grupo carboxilato a los centros metálicos mediante la identificación de las bandas características asociadas a los modos de vibración del carboxilato y los enlaces metal-oxígeno. Asimismo, los análisis termogravimétricos evidenciaron una adecuada estabilidad térmica de los complejos de Zn(II) y Cd(II), observándose una mayor resistencia a la descomposición en el complejo de zinc. En conjunto, los resultados demuestran que el ácido cáprico constituye un ligando eficiente para la obtención de carboxilatos metálicos, destacando su potencial para el desarrollo de nuevos materiales con posibles aplicaciones en los campos de la química de coordinación, la tecnología de materiales y la biomedicina.

BIBLIOGRAFÍA

1. Scaeteanu, G. V., Maxim, C., Badea, M., & Olar, R. (2023). Zinc(II) Carboxylate Coordination Polymers with Versatile Applications. Molecules, 28(3), 1132. https://doi.org/10.3390/molecules28031132.
2. Singh, S. (s. f.). Capric Acid Market Size, Share, and Growth Forecast, 2026 - 2033 - Persistence Market Research. Persistence Market Research. https://www.persistencemarketresearch.com/market-research/capric-acid-market.asp.
3. Baranov, V. V., Vikrishchuk, N. I., Zubenko, A. A., Estrin, I. A., Lipatov, E. S., & Svyatogorova, A. E. (2023). Synthesis, structure, and biological activity of new metal carboxylate complexes containing a glycoluril fragment. Журнал Общей Химии, 93(4), 602-609. https://doi.org/10.31857/s0044460x23040121.
4. Flores Bryone, R. (2022). Complejos de triorganoestaño (IV) con un ligante carboxilato derivado de la reacción de Bargellini (Tesis de licenciatura, Universidad Autónoma del Estado de Morelos). Repositorio Institucional de la UAEM.https://riaa.uaem.mx/xmlui/bitstream/handle/20.500.12055/2835/RUFBLR01.pdf?sequence=1&isAllowed=y.
5. Claudio-Rizo, J. A., Salazar, L. F. C., Flores-Guia, T. E., & Cabrera-Munguia, D. A. (2020). Estructuras metal-orgánicas (MOFs) nanoestructuradas para la liberación controlada de fármacos. Mundo Nano Revista Interdisciplinaria En Nanociencia y Nanotecnología, 14(26), 1e-29e. https://doi.org/10.22201/ceiich.24485691e.2021.26.69634.
6. Chai, W., Chen, X., Liu, J., Zhang, L., Liu, C., Li, L., Honiball, J. R., Pan, H., Cui, X., & Wang, D. (2023). Recent progress in functional metal–organic frameworks for bio-medical application. Regenerative Biomaterials, 11, rbad115. https://doi.org/10.1093/rb/rbad115.

7. Mondal, S., Mandal, S., Mondal, S., Midya, S. P., & Ghosh, P. (2024). Photocatalytic decarboxylation of free carboxylic acids and their functionalization. Chemical Communications, 60(72), 9645-9658. https://doi.org/10.1039/d4cc03189j.
8. Yoshinari, N., & Konno, T. (2022). Multitopic metal–organic carboxylates available as supramolecular building units. Coordination Chemistry Reviews, 474, 214850. https://doi.org/10.1016/j.ccr.2022.214850.
9. Ebenezer, P., Kumara, S. P. S. N. B. S., Senevirathne, S. W. M. A. I., Bray, L. J., Wangchuk, P., Mathew, A., & Yarlagadda, P. K. D. V. (2025). Advancements in Antimicrobial Surface Coatings Using Metal/Metaloxide Nanoparticles, Antibiotics, and Phytochemicals. Nanomaterials, 15(13), 1023. https://doi.org/10.3390/nano15131023.
10. Santos, P. R. D., Ely, M. R., Dumas, F., & Moura, S. (2015). Synthesis, structural characterization and previous cytotoxicity assay of Zn(II) complex containing 1,10-phenanthroline and 2,2′-bipyridine with valproic acid. Polyhedron, 90, 239-244. https://doi.org/10.1016/j.poly.2015.02.012.
11. Pich, C., Santos, P. D., Fortunato, T., Chiarello, M., De Oliveira, I., Soares, B., Ghermani, N., Machado, M., Roesch-Ely, M., Dumas, F., Terenzi, H., Henriques, J., & Moura, S. (2018). Mixed Ternary Mononuclear Copper(II) Complexes Based on Valproic Acid with 1,10-Phenanthroline and 2,2'-Bipyridine Ligands: DNA Interaction and Cytotoxicity in V79 Cells. Journal Of The Brazilian Chemical Society. https://doi.org/10.21577/0103-5053.20180229.
12. Diego, R. C. (2023, 1 diciembre). Síntesis y caracterización de complejos mixtos de cobre (II)-citrulina con 2.2'-bipiridina y 1,10-fenantrolina con capacidad farmacológica y su encapsulación en nanoplataformas. https://hdl.handle.net/20.500.12371/20376.
13. Nakamoto, K. (2009). Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds (6th ed.). Wiley.
14. Méndez, A. M., Penieres Carrillo, J. G., & Ortega Jiménez, F. (2023). Extracción líquido-líquido. Universidad Nacional Autónoma de México. Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán. https://ru.cuautitlan.unam.mx/handle/123456789/303.
15. Victoria, D. D. (2025). Síntesis y caracterización de MOFs basados en CoII y NiII, con ligando iminodiacético para su uso como catalizadores en la reacción oxidación de olefinas. En Repositorio Institucional. https://doi.org/10.58011/6fxj-2747.
16. Xu, B., Yao, W., Yu, X., Samsonenko, D. G., Fedin, V. P., & Gao, E. (2023). Cadmium(II)-Organic Coordination Polymer Containing Carboxyl Groups: Solvothermal Synthesis, Structure, and Properties. Russian Journal Of Coordination Chemistry, 49(12), 771-776. https://doi.org/10.1134/s1070328423600316.

EVALUACIÓN IN SILICO DEL POTENCIAL INHIBIDOR DE UNA CHALCONA NATURAL SOBRE LA ENZIMA 17 B-HSD1 IMPLICADA EN CÁNCER DE MAMA

Francisco Villanueva Mejia[1], Marissa Yocupicio Silva[1], Stephanie García Zavala[2], Judit Araceli Aviña Verduzco[2], Ramon Guzmán Mejía[2], Rafael Herrera Bucio[2] y Fredy Geovannini Morales Palacios[2]

[1] Instituto Tecnológico de Pabellón de Arteaga, [2] Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo
geovannini.morales@umich.mx

RESUMEN

El cáncer de mama es una de las principales causas de mortalidad de la mujer a nivel mundial y su desarrollo está estrechamente relacionado con la acción proliferativa de los estrógenos. La enzima 17β-hidroxiesteroide deshidrogenasa tipo 1 (17β-HSD1) desempeña un papel crucial en este proceso, ya que cataliza la conversión de estrona (E1), un estrógeno débil, en estradiol (E2), la forma potenciada y activa biológicamente. Esta reacción incrementa la estimulación de estrógeno en tejidos sensibles como el tejido de mama. Diversos estudios han demostrado que la sobreexpresión de 17β-HSD1 se encuentra en tumores mamarios en gran aumento en comparación con tejido normal, lo que se asocia con mayores concentraciones tumorales de E2 y una mayor proliferación celular. En la búsqueda de nuevos inhibidores de 17β-HSD1, los productos naturales representan una fuente estratégica debido a su diversidad estructural, disponibilidad y menor toxicidad relativa. Entre ellos, las chalconas, compuestos fenólicos presentes en diversas especies vegetales, han mostrado múltiples actividades biológicas, incluyendo propiedades antioxidantes, antiproliferativas y proapoptóticas. Su estructura química flexible favorece la interacción con distintas dianas moleculares implicadas en la progresión tumoral, lo que las convierte en candidatas atractivas para el desarrollo de agentes anticancerígenos dirigidos. El acoplamiento molecular (docking molecular) constituye una herramienta computacional clave en el diseño racional de fármacos, permitiendo predecir la afinidad y el modo de unión entre una molécula candidata y una proteína blanco. Mediante el análisis de interacciones como puentes de hidrógeno, interacciones hidrofóbicas y energías de unión, el docking facilita la evaluación preliminar de compuestos antes de su validación experimental. Por lo que en este trabajo se realizó un análisis de acoplamiento molecular de la chalcona 1-(2,4-dihidroxifenil)-3-(3,4-dihidroxifenil)-1-propanona, aislada del árbol *Comocladia engleriana*, como posible inhibidora de 17β-HSD1. Asimismo, se llevó a cabo un análisis comparativo con el inhibidor conocido como PBRM. El estudio se realizó empleando el software AutoDock Vina, permitiendo la libre interacción del ligando sobre toda la superficie enzimática. Los resultados mostraron que la chalcona se une al sitio catalítico con una energía de unión de −7.6 kcal/mol, estableciendo interacciones fuertes similares a las del inhibidor PBRM con los aminoácidos His221, Asn152, Glu282, Ser142 y Tyr155, residuos esenciales para el reconocimiento y acomodo de sustratos hacia el sitio del cofactor $NADP^+$. Estos resultados sugieren que la chalcona podría modular la actividad enzimática de 17β-HSD1. Si bien PBRM ha demostrado eficacia mediante la formación de enlaces covalentes irreversibles, su uso puede asociarse con efectos secundarios indeseados. Por lo que el empleo de herramientas computacionales integrando productos naturales puede representar una estrategia innovadora para el desarrollo de terapias más selectivas y potencialmente menos tóxicas contra el cáncer de mama.

INTRODUCCIÓN

El cáncer de mama es uno de los tipos de cáncer más comunes diagnosticado y una de las principales causas de muerte a nivel mundial entre mujeres. Su clasificación se basa, en la presencia o ausencia de receptores hormonales como el receptor de estrógenos (ER), el receptor de progesterona (PR) y el receptor HER2. De estos receptores, el ER tiene un papel importante, debido a que es un factor de transcripción que se activa con la expresión de estrógenos especialmente el estradiol (E2), el cual es una molécula lipofílica derivada del colesterol que pueden atravesar la

membrana celular y unirse al ER en el citoplasma o al núcleo de la célula, al formarse el complejo estrógeno-ER se activa o inhibe la expresión de genes que regulan los procesos claves del crecimiento celular, proliferación y la apoptosis [1,2]. Por lo que la sobreexpresión de estrógeno y activación excesiva de ER puede provocar alteraciones que conllevan al desarrollo de cáncer de mama y/o mutaciones [3].
En este contexto, los compuestos presentes en plantas principalmente el grupo de compuesto polifenólicos denominado flavonoides (isoflavonoides, flavonas, flavonoles, flavanonas, flavanonoles, flavanoles, antocianidinas, chalconas), han cobrado un gran interés [4,5]. Esto se debe a su gran similitud estructural con los estrógenos humanos, lo que les permite unirse al ER y llevar a cabo modificaciones de los receptores lo que conlleva a la regulación de los procesos celulares. Una característica favorable de estos compuestos es que pueden actuar como moduladores selectivos del receptor, esto significa que puede imitar los efectos de las hormonas en este caso el de los estrógenos (efecto agonista) en el ER o puede bloquearlos (efecto antagonista), dando como resultado la capacidad de influir en los procesos reguladores hormonales relacionados con la proliferación celular y el desarrollo de cáncer [6,7,8]. Por esto, es fundamental su estudio para comprender mejor sus efectos en el organismo y evaluar su posible aplicación en estrategias terapéuticas y preventivas.

Una manera de llegar a comprender mejor los procesos de los flavonoides con el receptor ER, es mediante su interacción a nivel molecular, por lo que se han desarrollado métodos de simulación computacional (estudios in silico), destacando el acoplamiento molecular o docking que nos permiten predecir la selectividad de un compuesto hacia un receptor, como el ER, y así evaluar su afinidad, es decir, su capacidad competitiva del compuesto frente a los estrógenos por el sitio de unión del receptor [9,10]. Así como. la formación del complejo flavonoide-ER (fuerza de unión) y las interacciones que se establecen entre ambos [11,12]. Estos métodos son de gran relevancia, ya que se puede conocer el potencial de un compuesto antes de realizar estudios experimentales [13,14]. En el caso del cáncer de mama, estos estudios facilitan la identificación de moléculas que pueden modular la actividad de ER y así optimizar el desarrollo de estrategias y/o tratamientos de esta enfermedad [15].

TEORÍA

Los estrógenos son un grupo de hormonas esteroideas fundamentales para el funcionamiento del organismo humano, especialmente en el sistema reproductor femenino. Ya que cumplen con un gran número de funciones, como el mantenimiento del sistema reproductor femenino, estimula el crecimiento y maduración de órganos, regulación del ciclo menstrual, regulación del sistema cardiovascular, etc [16,17]. Esto se lleva a cabo al unirse a las proteínas especificas conocidas como receptores de estrógenos (ER), una vez que se unen forman un complejo que interactúa con el ADN en regiones especificas regulando múltiples procesos celulares, como el crecimiento y división celular. Los estrógenos son principalmente tres tipos: la estrona (E1) que es la menos activa y se encuentra en mayor proporción después de la menopausia, generándose sobre el tejido adiposo a partir de andrógenos; el estradiol (E2) que es el más potente y predominante durante la edad reproductiva de la mujer producido principalmente por los ovarios (**Figura 1**); y el estriol (E3) es el más débil, producido durante el embarazo por la placenta [18,19]. Todos ellos derivan del colesterol mediante transformaciones enzimáticas por los órganos como ovarios, las glándulas suprarrenales, el tejido adiposo y en menor medida en los testículos en el caso de los hombres.

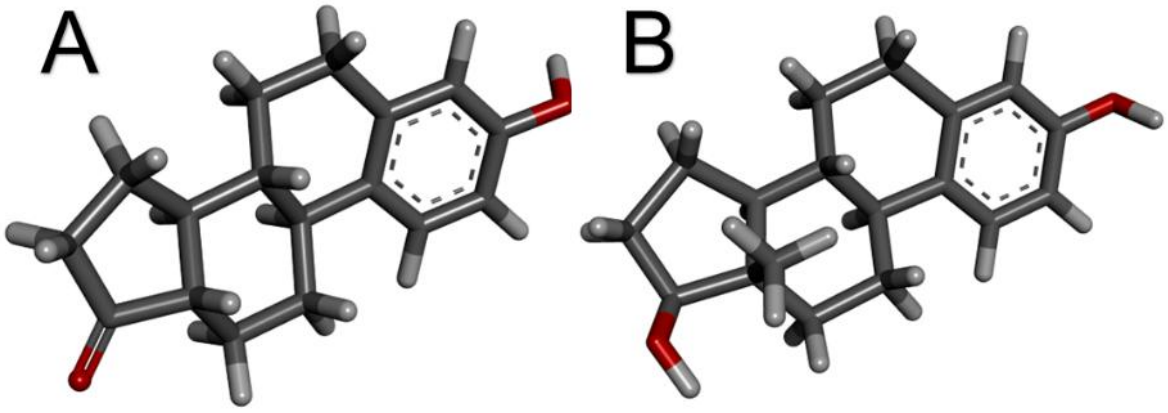


Figura 1. Estructura de los estrógenos estrona (A) y estradiol (B).

Como se ha mencionado la producción de estrógenos, así como la formación del complejo estrógenos-ER en condiciones normales son procesos esenciales para el funcionamiento, desarrollo y mantenimiento del tejido mamario, sin embargo, la sobreexpresión y exposición prolongada de estradiol y/o activación excesiva de ER, puede estimular un aumento de la proliferación celular, aumentando el riesgo de mutaciones y como consecuencia el desarrollo de cáncer de mama [18,20] A partir de este punto, es donde interviene la enzima 17β-hidroxiesteroide deshidrogenasa tipo 1 (17β-HSD1), la cual es la responsable de catalizar la conversión de estrona (E1) a estradiol (E2).

Numerosos estudios en cáncer de mama han demostrado que la sobreexpresión de la enzima 17β-HSD1 está asociada con un incremento en los niveles de E2 y a su vez la activación constante de ER [21,22]. Por lo que ha surgido como medida estratégica el desarrollo de inhibidores de 17β-HSD1, con el objetivo de reducir y regular la producción local de estradiol en tejidos mamario [23,24]. De lo cual algunos compuestos con este fundamento han demostrado efecto antiproliferativo en líneas celulares de cáncer de mama dependientes de estrógenos, al igual que se ha reportado en modelos celulares y animales la reducción significativa de la producción de estradiol [25].

Dentro de los compuestos con esta actividad, destacan los de origen vegetal debido a su diversidad estructural, potencial biológico (actividades farmacológicas como antioxidantes, antiinflamatorios y anticancerígenos) y de mayor importancia, su reducida generación de efectos secundarios [26]. Estas moléculas han demostrado la capacidad de interferir en diversas rutas de señalización implicadas en cáncer, regulando procesos de inhibición celular, inducción de apoptosis y regulación de enzimas claves como 17β-HSD1 [27,28]. Esto se debe en gran medida a que algunos flavonoides pueden comportarse como fitoestrógenos, atravesar la membrana celular y competir por los ER [29,30].

De la familia de los flavonoides, las chalconas han despertado un gran interés y relevancia por su potencial anticancerígeno. Estos compuestos son estructuras químicas abiertas formadas por dos anillos aromáticos unidos por una cadena de tres carbonos con un sistema α, β-insaturados, estas características le confieren alta reactividad, una estructura flexible y dependiente de sus sustituyentes (-OH y -OCH_3) su capacidad antioxidante, lo que permite un aumento en la selectividad y biodisponibilidad para diferentes receptores [31,32]. Por lo que ha sido ampliamente estudiada su capacidad para interferir en diferentes etapas del desarrollo tumoral. Destacando el mecanismo de regulación selectivo de ER, uniéndose a este y bloqueando la activación de genes asociados a la proliferación celular, impidiendo la división de células tumorales [33,34].

Por estas razones, las chalconas al ser compuestos con amplias características químicas, estructurales y biológicas se han posicionado como potenciales candidatos terapéuticos en cáncer de mama. Sin embargo, a pesar de los resultados en diversos estudios, aun se requiere mayor investigación en sus mecanismos, de biodisponibilidad, metabolismo y efectos secundarios.

PARTE EXPERIMENTAL

El aislamiento de la chalcona [1-(2,4-dihidroxifenil)-3-(3,4-dihidroxifenil)-1-propanona], se realizó a partir de la corteza del árbol *Comocladia engleriana* colectado en Taretan, Michoacán, Mexico. La corteza se sometió a extracciones mediante equipo Soxhlet, en reflujos con el disolvente tetrahidrofurano (THF) durante 4 horas. La purificación del compuesto se realizó mediante cromatografía en columna cromatográfica y su identificación se realizó mediante la obtención de los desplazamientos de RMN H^1 y C^{13}, y el comparativo de estos con los reportados en la literatura [35,36] .

Desplazamientos de ^{1}H RMN (400 MHz, $COCD_3$) δ 12.81 (s, HO-H), 7.82 (d, *J* = 8.8 Hz, 1H, H-6´), 6.75 (d, *J* = 2.0 Hz, 1H, H-5), 6.71 (d, *J* = 8.0 Hz, 1H, H-8), 6.59 (dd, *J* = 8.0, 2.1 Hz, 1H, H-9), 6.41 (dd, *J* = 8.8, 2.4 Hz, 1H, H-5´), 6.31 (d, *J* = 2.4 Hz, 1H, H3´), 3.22 (t, *J* = 9.8 Hz, 2H, H-2), 2.85 (t, *J* = 9.5 Hz, 2H, H-3). ^{13}C RMN (101 MHz, $CDCl_3$) δ 205.0 (C=O), 166.2 (C-4´), 165.4 (C-2´), 145.7 (C-6), 144.0 (C-7), 133.6 (C-4), 133.6 (C-6´), 120.3 (C-9), 116.3 (C-5), 115.9 (C-8), 113.8 (C-1), 108.6 (C-5´), 103.5 (C-3´), 40.3 (C-2), 29.8 (C-3).

La construcción de la chalcona y el inhibidor PBRM [3-(2-bromoetil)-16β-(m-carbamoilbencil)-17β-hidroxi-1,3,5(10)-estratrieno] de manera virtual se realizó empleando el software Molden, y fueron optimizados mediante la teoría DFT con el funcional hibrido B3LYP con un nivel de base 6-311G** empleando Gaussian 16 (**Figura 2**). La estructura tridimensional de la enzima 17β-HSD1 fue obtenida del Protein Data Bank (PDB) con el código 6CGE [37]. El docking molecular fue realizado empleando el software de código abierto AutoDock Vina [38]. La preparación del acoplamiento se realizó mediante AutoDockTools, con el cual se asignaron cargas parciales, se asignó de manera automática el número de torsiones permitidas para la chalcona favoreciendo conformaciones más flexibles, y se empleó el algoritmo Vina para la búsqueda conformacional y la obtención de las energías de unión del complejo proteína-ligando. Las especificaciones de interacción en la proteína 6CGE se consideraron centrando una caja cubica compuesta por 126 × 126 × 126 puntos de cuadricula con un espacio de 0.375 Å entre cada punto. Por otra parte, las interacciones de la chalcona y del PRBM con los aminoácidos en el sitio de unión se visualizaron con el software BIOVIA Discovery Studio.

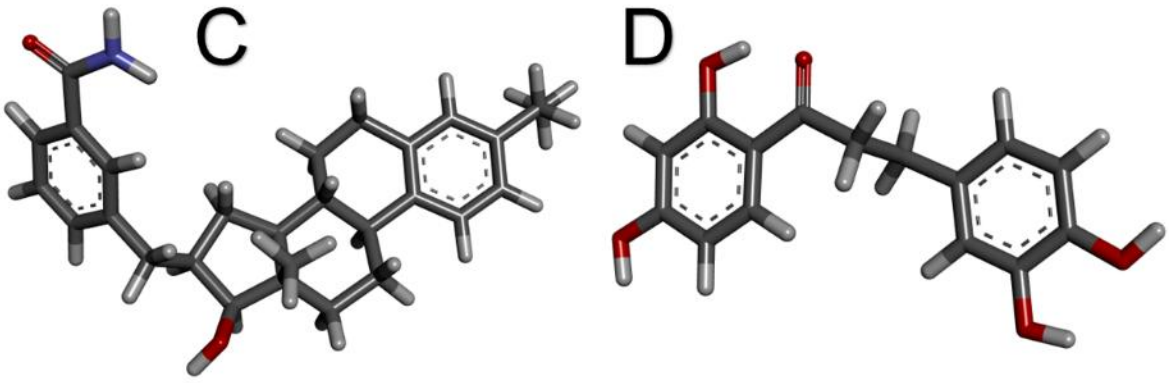


Figura 2. Estructuras del inhibidor PBRM (C) y la chalcona aislada de *C. engleriana* (D), optimizadas con el funcional B3LYP y el conjunto de base 6-311G**, empelando Gaussian 16.

RESULTADOS

Con la obtención de los desplazamientos de RMN y el comparativo de estos con distintas bases de datos, se identificó a la chalcona de este estudio, lo que demostró que no es un compuesto nuevo, sin embargo, es de mencionarse que este solo ha sido aislado mediante síntesis química, inicialmente como tratamiento antiulceroso [35] y como activadores de la enzima bacterial enoato

reductasas [36], y no existe reporte de su aislamiento de alguna fuente natural. Si bien estos reportes promueven el empleo de la chalcona para distintos tratamientos, en este trabajo se plantea la posibilidad de la actividad de este compuesto con propiedades hacia la regulación de células generadoras de cáncer de mama, esto se plantea de acuerdo a lo revisado en la literatura antes mencionada donde algunas chalconas con características semejantes (estructura) han demostrado este tipo de actividades. Por lo que, aprovechando el empleo de la tecnología se buscó conocer este potencial mediante su análisis in silico sobre la enzima 17β-HSD1 y su posible inactivación, mediante mecanismos semejantes a los descritos por el inhibidor PBRM.

Por lo que el análisis de docking molecular, se realizó dejando interactuar de manera libre a la chalcona en el total de la superficie de la enzima 17β-HSD1, con la finalidad de identificar si se favorecía el anclaje de la chalcona en el mismo sitio que el inhibidor PBRM [37]. Dando como resultado, la afinidad de la chalcona por el mismo sitio que el inhibidor PBRMN (**Figura 3**), con una energía de unión de -7.6 kcal/mol y en el caso del inhibidor la energía fue de -11.1 kcal/mol, esta energía demuestra la estabilidad y afinidad por el sitio de unión principalmente, lo cual demuestra que el inhibidor PBRM es más afín por este sitio. Sin embargo, es de mencionarse que la estructura de PBRM proviene de una modificación del E1 lo que puede favorecer este resultado, ya que E1 por naturaleza es afín a este sitio es de esperarse un mejor resultado en este aspecto, además de que PBRM estructuralmente es más grande comparado con la chalcona lo que también tiene influencia sobre la energía de unión, ya que el software al identificar un número mayor de interacciones sobre el sitio de anclaje incrementa esta energía de unión.

Por otra parte, al comparar las estructuras de la chalcona y PBRM en el anclaje y superponer estas (**Figura 3**), se puede observar la gran diferencia en el tamaño de estas estructuras (peso molecular de la chalcona 273 g/mol; PBRM 496.48 g/mol), pero también la posición (conformación) que la chalcona adquiere en el sitio de unión, destacando que si bien no cubre en su totalidad el espacio ocupado por el inhibidor, esta conformación de la chalcona tiende a semejar la conformación de la estructura base del inhibidor que es el E2.

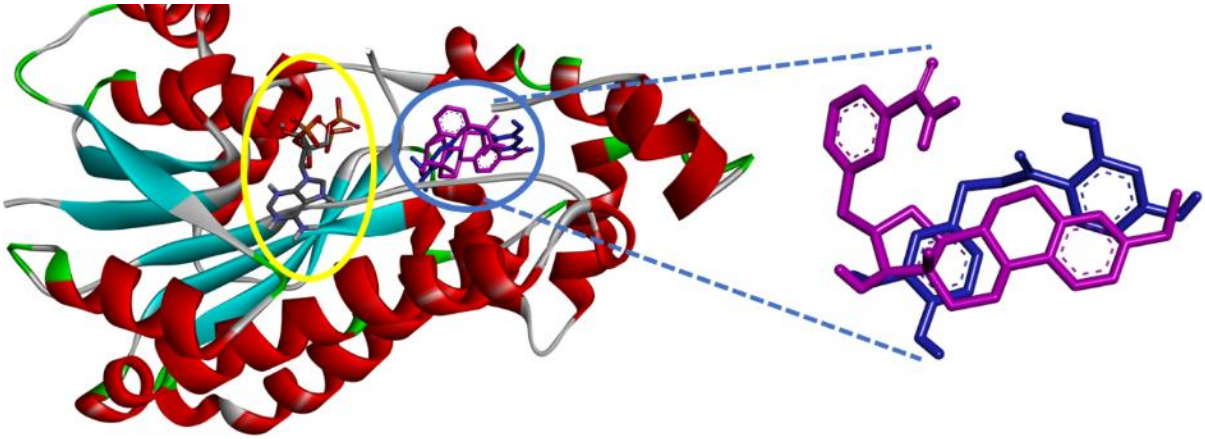


Figura 3. Anclaje de la chalcona y el inhibidor PBRM (Circulo azul), ampliación y comparativo de las estructuras en el sitio de anclaje. En la estructura de la enzima 17β-HSD1 se encuentra el cofactor $NADP^+$ (Circulo amarillo) tomado en cuenta durante el docking molecular.

Por lo tanto, el anclaje de la chalcona sobre 17β-HSD1 es un resultado destacable, y esto se puede comprender de una mejor manera al describir la función y relevancia de este sitio. De lo cual, la literatura señala que este sitio es por el cual se lleva a cabo el reconocimiento y orientación del sustrato, en este caso E1, para que pueda atravesar hacia el cofactor $NADP^+$ y posteriormente ser trasformado en E2 [25,37]. En este contexto, diversos estudios han demostrado que el inhibidor PBRM ha disminuido en un 77% la conversión de E1 en E2, debido a su anclaje irreversible en este sitio. Asimismo, existen reportes de otros compuestos con mecanismo de unión reversible, pero estos solo indujeron una inhibición de conversión en un 33%. Estos antecedentes, demuestran la

relevancia de este sitio catalítico, sin embargo, esta unión irreversible, así como el mismo PBRM puede generar efectos secundarios no deseados, lo que resalta la importancia de la búsqueda de nuevos compuestos con características semejantes de afinidad y de inhibición.

En relación con lo anterior, es de mencionarse que la estabilidad de la unión en este sitio catalítico está determinada por las interacciones que se forman entre el ligando con los residuos de los aminoácidos His221, Tyr155, Asn152, Ser142, Leu95 y Glu282. De los cuales, la formación de interacciones fuertes con el residuo His221 es relevante para que el ligando se fije en el sitio catalítico, de semejante importancia es la formación de puentes de hidrogeno con los residuos Tyr155 y Ser142, ya que estas interacciones moleculares dan como resultado un anclaje más estable y como consecuencia una mejor actividad inhibitoria del ligando sobre 17β-HSD1.

Bajo este enfoque, se realizó un análisis de las interacciones de la chalcona y del inhibidor en el sitio catalítico de 17β-HSD1. Donde se pudo observar la formación de interacciones fuertes y de importancia, como son los puentes de hidrogeno formados con los residuos Ser142, Tyr155, Tyr218 y Ser222, aminoácidos clave en estabilidad del complejo enzima-ligando, así como la formación del enlace hidrogeno-carbono con His221, aunque es un enlace más débil que un puente de hidrogeno convencional si contribuye con la estabilización y orientación del ligando en el sitio de anclaje. Además, se observaron interacciones hidrofóbicas de tipo π-alquilo y π-sigma con los residuos Gly186, Val225, Val 143 y Pro187, las cuales contribuyen a la estabilización y favorecimiento del anclaje del ligando en el sitio catalítico (**Figura 4**).

De igual manera se analizaron las interacciones con el inhibidor PBRM, concordando estas interacciones con las descritas en la literatura lo que valida los resultados obtenidos del docking molecular en este trabajo [25,37]. Destacando las interacciones fuertes de puentes de hidrogeno con los residuos Ser142, Asn152, Tyr218 y Ser222, y la interacción π-alquilo con el residuo His221 principalmente, además de las interacciones π-alquilo, alquilo y π-π con los residuos Leu149, Phe259, Met147, Pro187, Val225, Met279 y Val283, que favorecen la estabilidad y anclaje de PBRM en el sitio catalítico (**Figura 4**).

Otro punto a considerar, son las interacciones de Van der Waals formadas por la chalcona y el inhibidor PBRM dentro del sitio catalítico. Aunque estas interacciones son relativamente débiles, son de suma importancia debido a que desempeñan un papel fundamental en el proceso de acoplamiento molecular, ya que permiten evaluar la factibilidad del anclaje en los sitios de unión, determinado por las fuerzas electroestáticas de atracción-repulsión de los residuos de aminoácidos. De lo cual, tanto la chalcona como el inhibidor mostraron este tipo de interacciones con diversos residuos del sitio activo, lo que favorece la afinidad de los ligandos por el sitio de anclaje.

Si bien se observa un mayor número de interacciones del PBRM en comparación con la chalcona en el sitio catalítico, es de destacar que muchas interacciones son semejantes a las previamente descrita para la chalcona. A pesar de que el inhibidor es una molécula de mayor tamaño molecular, la chalcona mostro la capacidad de establecer interacciones con los residuos clave del sitio activo. Esto podría indicar que la flexibilidad y movilidad conformacional de la chalcona le permite adoptar una disposición espacial favorable para interactuar con los residuos responsables de no solo la afinidad por el sitio catalítico, sino también de la estabilidad del anclaje en este sitio.

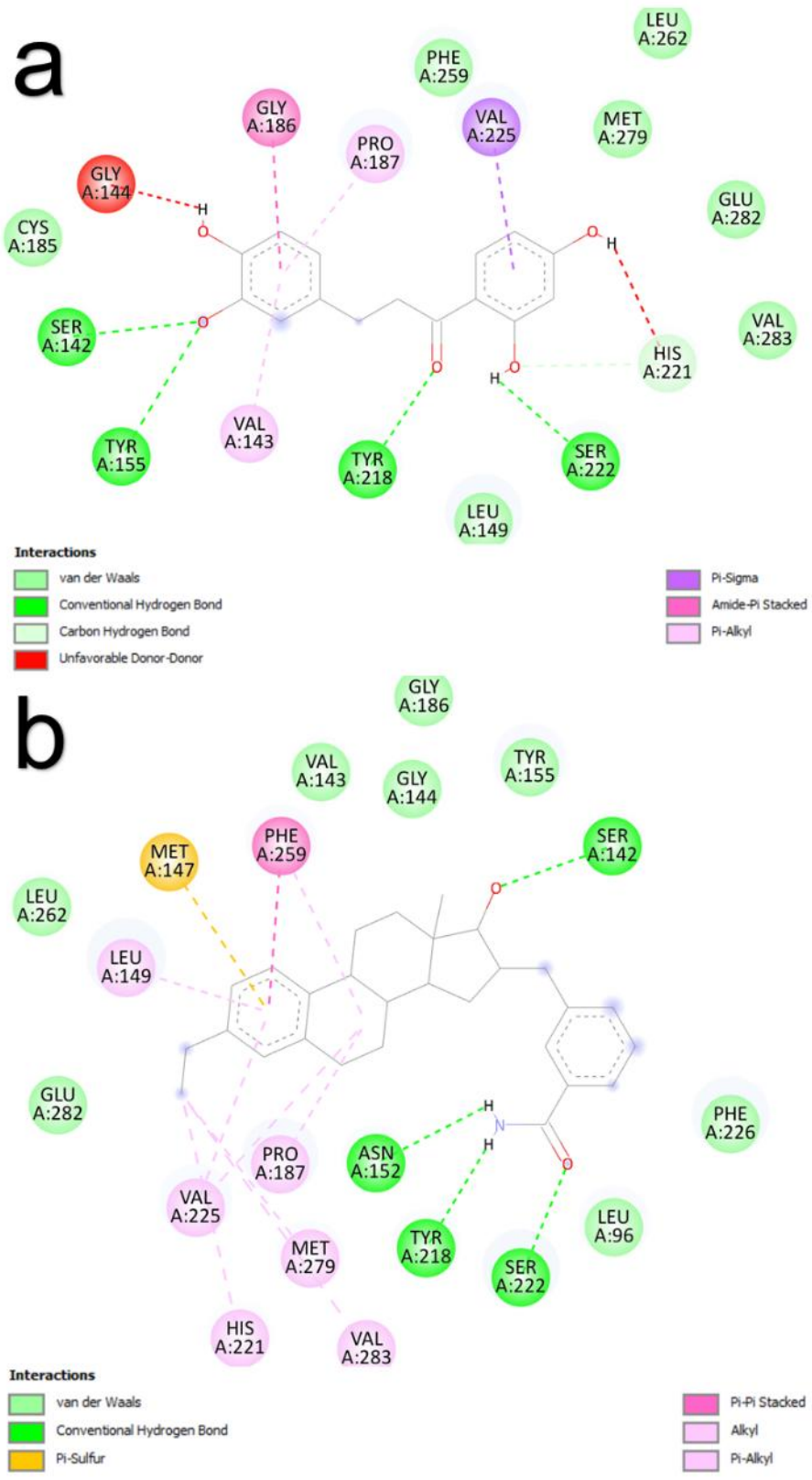


Figura 4. Interacciones moleculares de la chalcona (a) y el inhibidor PBRRM (b) en el sitio catalítico de la enzima 17β-HSD1, visualizadas con el software BIOVIA.

CONCLUSIONES

Los resultados de este estudio sugieren que la chalcona aislada de *C. engleriana* podría representar un candidato potencial para inhibir los procesos de la enzima 17β-HSD1 y regular la transformación de E1 a E2, así como regular la sobreexpresión del ER, lo que podría contribuir a disminuir el riesgo asociado al desarrollo de cáncer de mama.

Esta propuesta tiene como fundamento, la capacidad de la chalcona para interactuar en el mismo sitio catalítico que el inhibidor PBRM, el cual ya ha demostrado efectos sobre los procesos de regulación de E2 y ER. Si bien, el inhibidor mostro valores superiores en la energía de unión y el número de interacciones en comparación que la chalcona, esto no disminuye la relevancia de los resultados observados por la chalcona, la cual mostro interacciones moleculares similares y de relevancia dentro del sitio catalítico. Posiblemente estas interacciones se vieron favorecidas por sus características estructurales, como la flexibilidad conformacional y sus sustituyentes que la conforman; hidroxilos (-OH) y un grupo carbonilo (O=C), los cuales mostraron una contribución a la afinidad y estabilidad del complejo generado por las interacciones con los residuos que conforman al sitio activo.

Si bien, este estudio se basa únicamente en estudios de simulación, su viabilidad se demostró al reflejar la similitud de las interacciones que han sido reportadas para el inhibidor PBRM sobre la 17β-HSD1. Lo que favorece los resultados obtenidos con la chalcona en este estudio, por lo que es necesario continuar no solo con estudios más especializados de simulación, si no estudios de carácter biológico y experimental, tomando en consideración a la chalcona como un posible candidato con actividad hacia la regulación del cáncer de mama.

BIBLIOGRAFÍA

[1] L. Clusan, F. Ferrière, G. Flouriot, and F. Pakdel, “A Basic Review on Estrogen Receptor Signaling Pathways in Breast Cancer,” International Journal of Molecular Sciences, Vol. 24, no. 7, Apr. 2023, doi: 10.3390/IJMS24076834.

[2] M. Pegram, C. Jackisch, and S. R. D. Johnston, “Estrogen/HER2 receptor crosstalk in breast cancer: combination therapies to improve outcomes for patients with hormone receptor-positive/HER2-positive breast cancer,” npj Breast Cancer, Vol. 9, no. 1, pp. 45-, May 2023, doi: 10.1038/s41523-023-00533-2.

[3] X. Huang, Y. Yu, S. Luo, W. Fu, J. Zhang, and C. Song, “The value of oral selective estrogen receptor degraders in patients with HR-positive, HER2-negative advanced breast cancer after progression on ≥ 1 line of endocrine therapy: systematic review and meta-analysis,” BMC Cancer, Vol. 24, no. 1, pp. 21-, Jan. 2024, doi: 10.1186/S12885-023-11722-4.

[4] S. Mitra and R. Dash, “Natural Products for the Management and Prevention of Breast Cancer,” Evidence‐Based Complementary and Alternative Medicine, Vol. 2018, no 1, pp. 8324696, 2018. doi: 10.1155/2018/8324696.

[5] S. Alexander V., “Phytoestrogens and their effects,” European Journal of Pharmacology, Vol. 741, pp. 230-236, 2014, Elsevier. doi: 10.1016/j.ejphar.2014.07.057.

[6] H. B. Patisaul and W. Jefferson, “The pros and cons of phytoestrogens,” Frontiers in neuroendocrinology, Vol. 31, no 4, p. 400-419. Oct., 2010. doi: 10.1016/j.yfrne.2010.03.003.

[7] M. Mostrom and T. J. Evans, “Phytoestrogens,” in Reproductive and Developmental Toxicology, Elsevier, 2011, pp. 707–722. doi: 10.1016/B978-0-12-382032-7.10052-9.

[8] L. G. S. Ponte et al., “The Hallmarks of Flavonoids in Cancer,” Molecules, Vol. 26, no. 7, Apr. 2021, doi: 10.3390/MOLECULES26072029.

[9] J. Suganya, M. Radha, D. L. Naorem, and M. Nishandhini, “In silico docking studies of selected flavonoids - Natural healing agents against breast cancer,” Asian Pacific Journal of Cancer Prevention, Vol. 15, no. 19, pp. 8155–8159, 2014, doi: 10.7314/APJCP.2014.15.19.8155.

[10] R. Hossain et al., “Natural Compounds or Their Derivatives against Breast Cancer: A Computational Study,” Biomed Res. Int., Vol. 2022, 2022, doi: 10.1155/2022/5886269.

[11] S. Dutta, P. S. Kharkar, N. U. Sahu, and A. Khanna, “Molecular docking prediction and in vitro studies elucidate anti-cancer activity of phytoestrogens,” Life Sci., Vol. 185, pp. 73–84, Sep. 2017, doi: 10.1016/j.lfs.2017.07.015.
[12] R. Acharya, S. Chacko, P. Bose, A. Lapenna, and S. P. Pattanayak, “Structure Based Multitargeted Molecular Docking Analysis of Selected Furanocoumarins against Breast Cancer,” Sci. Rep., Vol. 9, no. 1, Dec. 2019, doi: 10.1038/s41598-019-52162-0.
[13] C. M. F. Ancajas, A. S. Oyedele, C. M. Butt, and A. S. Walker, “Advances, opportunities, and challenges in methods for interrogating the structure activity relationships of natural products,” Natural Product Reports, Vol. 41, no 10, pp. 1543-1578. Oct., 2024, Royal Society of Chemistry. doi: 10.1039/d4np00009a.
[14] C. Cava and I. Castiglioni, “Integration of Molecular Docking and In Vitro Studies: A Powerful Approach for Drug Discovery in Breast Cancer,” Applied Sciences 2020, Vol. 10, no. 19, pp. 1–18, Oct. 2020, doi: 10.3390/APP10196981.
[15] H. Huang et al., “Reverse screening methods to search for the protein targets of chemopreventive compounds,” Frontiers in chemistry, Vol. 6, pp. 138. May 01, 2018. doi: 10.3389/fchem.2018.00138.
[16] Z. Bai and R. Gust, “Breast cancer, estrogen receptor and ligands,” Archiv der Pharmazie: An International Journal Pharmaceutical and Medicinal Chemistry, Vol. 342, no 3, pp. 133-149. Mar., 2009. doi: 10.1002/ardp.200800174.
[17] K. Yu, Z. Y. Huang, X. L. Xu, J. Li, X. W. Fu, and S. L. Deng, “Estrogen Receptor Function: Impact on the Human Endometrium,” Front. Endocrinol. (Lausanne), Vol. 13, p. 827724, Feb. 2022, doi: 10.3389/FENDO.2022.827724/FULL.
[18] L. A. Haldosén, C. Zhao, and K. Dahlman-Wright, “Estrogen receptor beta in breast cancer,” Jan. 25, 2014. doi: 10.1016/j.mce.2013.08.005.
[19] P. C. Li, Y. F. Zhu, W. M. Cao, and B. Li, “ER-positive and BRCA2-mutated breast cancer: a literature review,” European Journal of Medical Research, Vol. 29, no. 1, pp. 30-, Jan. 2024, doi: 10.1186/S40001-023-01618-1.
[20] P. Miziak et al., “Estrogen Receptor Signaling in Breast Cancer,” Oct. 01, 2023, Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI). doi: 10.3390/cancers15194689.
[21] J. M. Day et al., “17β-Hydroxysteroid dehydrogenase Type 1, and not Type 12, is a target for endocrine therapy of hormone-dependent breast cancer,” Int. J. Cancer, Vol. 122, no. 9, pp. 1931–1940, May 2008, doi: 10.1002/ijc.23350.
[22] C. Y. Zhang, J. Chen, D. C. Yin, and S. X. Lin, “The contribution of 17beta-hydroxysteroid dehydrogenase type 1 to the estradiol-estrone ratio in estrogen-sensitive breast cancer cells,” PLoS One, Vol. 7, no. 1, Jan. 2012, doi: 10.1371/journal.pone.0029835.
[23] D. Song et al., “Expression of aromatase and 17β-hydroxysteroid dehydrogenase types 1, 7 and 12 in breast cancer. An immunocytochemical study,” Journal of Steroid Biochemistry and Molecular Biology, Vol. 101, no. 2–3, pp. 136–144, Oct. 2006, doi: 10.1016/j.jsbmb.2006.06.015.
[24] M. Mazumdar, D. Fournier, D. W. Zhu, C. Cadot, D. Poirier, and S. X. Lin, “Binary and ternary crystal structure analyses of a novel inhibitor with 17β-HSD type 1: A lead compound for breast cancer therapy,” Biochemical Journal, Vol. 424, no. 3, pp. 357–366, Dec. 2009, doi: 10.1042/BJ20091020.
[25] Y. Laplante, C. Cadot, M. A. Fournier, and D. Poirier, “Estradiol and estrone C-16 derivatives as inhibitors of type 1 17β-hydroxysteroid dehydrogenase: Blocking of ER+ breast cancer cell proliferation induced by estrone,” Bioorg. Med. Chem., Vol. 16, no. 4, pp. 1849–1860, Feb. 2008, doi: 10.1016/J.BMC.2007.11.007.
[26] Y. Li, S. Li, X. Meng, R. Y. Gan, J. J. Zhang, and H. Bin Li, “Dietary Natural Products for Prevention and Treatment of Breast Cancer,” Nutrients 2017, Vol. 9, no. 7, Jul. 2017, doi: 10.3390/NU9070728.
[27] K. M. Yap et al., “Mangifera indica (Mango): A promising medicinal plant for breast cancer therapy and understanding its potential mechanisms of action,” Breast Cancer: Targets and Therapy, pp. 471-503. 2021. doi: 10.2147/BCTT.S316667.
[28] M. C. Canivenc-Lavier and C. Bennetau-Pelissero, “Phytoestrogens and Health Effects,” Nutrients 2023, Vol. 15, no. 2, Jan. 2023, doi: 10.3390/NU15020317.

[29] M. Younas, C. Hano, N. Giglioli-Guivarc'H, and B. H. Abbasi, "Mechanistic evaluation of phytochemicals in breast cancer remedy: Current understanding and future perspectives," RSC Adv., Vol. 8, no. 52, pp. 29714–29744, 2018, doi: 10.1039/c8ra04879g.
[30] B. Salehi et al., "Phytotherapeutics in cancer invasion and metastasis," Phytotherapy Research, Vol. 32, no 8, pp. 1425-1449. Aug., 01, 2018, John Wiley and Sons Ltd. doi: 10.1002/ptr.6087.
[31] A. Siddiqa et al., "Synthesis, molecular docking, bio-evaluation and quantitative structure activity relationship of new chalcone derivatives as antioxidants," J. Mol. Struct., Vol. 1277, p. 134814, Apr. 2023, doi: 10.1016/J.MOLSTRUC.2022.134814.
[32] K. A. Sheikh et al., "Advances in chalcone derivatives: Unravelling their anticancer potential through structure-activity studies," J. Mol. Struct., Vol. 1299, p. 137154, Mar. 2024, doi: 10.1016/J.MOLSTRUC.2023.137154.
[33] Y. Ouyang, J. Li, X. Chen, X. Fu, S. Sun, and Q. Wu, "Chalcone Derivatives: Role in Anticancer Therapy," Biomolecules 2021, Vol. 11, no. 6, Jun. 2021, doi: 10.3390/BIOM11060894.
[34] R. Michalkova et al., "Anticancer Potential of Natural Chalcones: In Vitro and In Vivo Evidence," International Journal of Molecular Sciences 2023, Vol. 24, no. 12, Jun. 2023, doi: 10.3390/IJMS241210354.
[35] Y. Komazawa, S. Takeda, K. Hosaka, H. Mitsuhashi, and T. Watanabe, "Anti-ulcer agent comprising chalcone derivative as effective ingredient and novel chalcone derivative," U.S. Patent No 5, 106, 871, 21 Abr. 1992.
[36] J. Michael Hilmer et al., "Method for biotechnological production of dihydrochalcones," U.S. Patent No 9,359,622, 7 Jun. 2016. Accessed: May 17, 2026. [Online]. Available: www.uniprot.org.*
[37] T. Li, R. Maltais, D. Poirier, and S. X. Lin, "Combined Biophysical Chemistry Reveals a New Covalent Inhibitor with a Low-Reactivity Alkyl Halide," Journal of Physical Chemistry Letters, Vol. 9, no. 18, pp. 5275–5280, Sep. 2018, doi: 10.1021/acs.jpclett.8b02225.
[38] O. Trott and A. J. Olson, "AutoDock Vina: Improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading," J. Comput. Chem., Vol. 31, no. 2, pp. 455–461, Jan. 2010, doi: 10.1002/jcc.21334.

IDENTIFICACIÓN DE MICROORGANISMOS EN CERVEZAS ARTESANALES POR MALDITOF BIOTYPER®

Johan Axel Alfaro Valadez[1], Irazú Margarita Calderón Tinajero[2], Katarzyna Wrobel[1], Kazimierz Wrobel[1] y Alma Rosa Corrales Escobosa[1]

[1]Departamento de Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Guanajuato, [2]Universidad de Guanajuato, División de Ciencias Naturales y Exactas.
ja.alfarovaladez@ugto.mx

RESUMEN

La cerveza es una de las bebidas alcohólicas más consumidas en el mundo. En general, la cerveza comercial es considerada un producto "seguro" microbiológicamente debido a la combinación de factores durante su elaboración, como etanol, metabolitos del lúpulo, alto contenido de CO_2, reducida cantidad de oxígeno disuelto y bajo pH, además, se realizan procesos de pasteurización y filtración, que en conjunto evitan la proliferación de microorganismos no deseados. No obstante, la cerveza artesanal, producida por pequeñas cervecerías, presenta una gran variedad de productos y procesos de fabricación, diversidad de materia prima y generalmente no incluyen las etapas de filtración y pasteurización, lo que hace a estas bebidas más susceptibles a contaminación microbiana. El principal riesgo microbiológico es la proliferación de bacterias ácido-lácticas (LAB), las cuales podrían favorecer la producción de compuestos indeseados como aminas biogénicas, tóxicas en altas concentraciones para el consumidor, por lo que garantizar la inocuidad del proceso de fabricación es de vital importancia. En este sentido, es importante implementar métodos rápidos y confiables que permitan la identificación de posibles microorganismos contaminantes y contribuir en el control de calidad en la industria cervecera. En este trabajo se analizaron muestras de cervezas artesanales producidas en el estado de Guanajuato clasificadas según estilo y presentación. Los microorganismos fueron aislados utilizando medios selectivos y posteriormente identificados mediante comparación de sus perfiles proteicos con la base de datos del sistema MALDI-Biotyper®. Los resultados mostraron la presencia de *Saccharomyces cerevisiae* como microorganismo predominante, junto con otros microorganismos de interés sanitario incluyendo bacterias ácido-lácticas, bacterias coliformes y hongos filamentosos. Los resultados demuestran la utilidad de MALDI-TOF MS como una metodología eficiente para el monitoreo microbiológico de cervezas artesanales. La detección de bacterias ácido-lácticas, coliformes y hongos filamentosos evidencia la necesidad de fortalecer las prácticas de control sanitario durante la producción y distribución, con el fin de garantizar la calidad e inocuidad del producto final.

Palabras clave: **Cerveza artesanal, MALDI-TOF, control microbiológico.**

INTRODUCCIÓN

La producción y el consumo de cerveza artesanal han presentado un crecimiento importante en México durante los últimos años, observando considerable diversificación de estilos y procesos de elaboración. A diferencia de la producción industrial estandarizada, la cerveza artesanal se elabora en pequeñas cervecerías independientes que priorizan la innovación y el uso de ingredientes locales. Esta libertad creativa, si bien favorece la aparición de una amplia gama de estilos (con aproximadamente 120 variedades distintas) (Koller & Perkins, 2022), introduce una notable falta de estandarización en los procesos de producción, higiene y control de calidad.

Aunque en términos generales la cerveza es considerada un producto microbiológicamente seguro debido a una combinación de factores que dificultan el crecimiento de la mayoría de los microorganismos. Entre estos factores se encuentran la presencia de etanol (generalmente entre 4% y 6% v/v), los metabolitos del lúpulo con actividad antimicrobiana, el alto contenido de dióxido de carbono, la baja concentración de oxígeno disuelto y el pH ácido (típicamente entre 4.0 y 4.5). En la

industria cervecera industrial, estos factores se complementan con procesos de filtración y pasteurización (que inactivan y eliminan microorganismos residuales) que garantizan la estabilidad microbiológica del producto final. Sin embargo, en el contexto de la cerveza artesanal, la ausencia de estas etapas de procesamiento adicionales, sumada a la gran variabilidad en las prácticas de elaboración y a la diversidad de materias primas utilizadas, hace que estos productos sean más susceptibles a la contaminación microbiológica. Los microorganismos responsables del deterioro pueden provenir de las materias primas, como la malta, o ser introducidos durante el proceso de elaboración, almacenamiento o distribución.

Controlar el tipo y carga microbiológica en cerveza es importante debido a que ciertos microorganismos pueden modificar las propiedades organolépticas del producto y generar compuestos indeseables. Entre los microorganismos de interés se encuentran levaduras, LAB, bacterias coliformes y hongos filamentosos (López, Roche, & Rodríguez, 2020). Por ejemplo, algunas bacterias poseen actividad descarboxilasa sobre aminoácidos libres presentes en la cerveza, produciendo aminas biogénicas que en concentraciones elevadas pueden representar un riesgo para la salud del consumidor. Además, la detección de bacterias coliformes fecales puede indicar deficiencias higiénico-sanitarias durante la elaboración, manipulación o almacenamiento de la cerveza.

Por otra parte, algunos hongos filamentosos pueden producir micotoxinas u otros metabolitos tóxicos. Géneros como *Aspergillus* y *Penicillium* han sido asociados con la producción de aflatoxinas, ocratoxina A y otras micotoxinas, mientras que especies de *Fusarium* pueden producir fumonisinas, tricotecenos y zearalenona. Por otra parte, hongos del género *Mucor* se relacionan principalmente con deterioro microbiológico y alteraciones organolépticas del producto. Aunque cabe señalar que estos microrganismos no son típicos en la cerveza bien elaborada, pero se pueden encontrar en las materias primas.

Tradicionalmente, la identificación microbiológica se realiza mediante pruebas bioquímicas y métodos basados en cultivo, los cuales suelen ser laboriosos y requieren tiempos prolongados de análisis. Frente a la necesidad de un control microbiológico rápido y eficaz, la espectrometría de masas MALDI-TOF MS (desorción/ionización láser asistida por matriz con el analizador de masa tipo tiempo de vuelo de sus siglas en inglés) se ha establecido como una herramienta confiable (García Lara et al., 2021; Silva-Jiménez et al., 2018). Su principio se basa en la generación de un "perfil de masa" o "huella dactilar" proteica característico de las proteínas más abundantes para cada microorganismo obteniendo los resultados en tan solo minutos. El software BioTyper® actúa comparando el espectro obtenido experimentalmente con librerías de espectros de masas de referencia para diferentes tipos de microorganismos, obteniendo un score de acuerdo con la similitud del espectro, lo que permite la identificación del microorganismo a nivel de género y especie con una alta fiabilidad. La técnica MALDI-TOF MS, está ampliamente documentada en el ámbito clínico y alimentario, lo que la convierten en una herramienta ideal para evaluar el proceso microbiológico en la industria cervecera (Zhang, Plowman et al. 2025).

En resumen, la creciente oferta de las cervezas artesanales en el mercado y deficiente control microbiológico durante su elaboración en pequeñas cervecerías exigen métodos de análisis que permitan controlar este importante parámetro de calidad y que sean a la vez rápidos y confiables. La técnica analítica MALDI-TOFMS adaptada al software BioTyper® y la disponibilidad de librerías espectrales, se presenta como la herramienta para la identificación microbiológica a partir de perfiles proteicos característicos, permitiendo no solo un control de calidad más efectivo, sino también abriendo la puerta a futuras investigaciones sobre la microbioma específica de cada estilo de cerveza.

El objetivo de este estudio fue identificar y caracterizar los microorganismos presentes en cervezas artesanales producidas en el estado de Guanajuato mediante espectrometría de masas MALDI-TOF MS con el sistema MALDI-Biotyper®.

PARTE EXPERIMENTAL

Muestras y medios de cultivo utilizados

Se analizaron cervezas artesanales obtenidas en el estado de Guanajuato. Las cervezas fueron clasificadas de acuerdo con su estilo y presentación. Además, como referencia se incluyeron cervezas industriales

Para el aislamiento de microrganismos, se utilizaron cinco medios selectivos en cajas Petri: a) VRBA (Agar Bilis Rojo Voleta) para coliformes; b) YPD (Yeast Peptone Dextrose) para levaduras; c) MRS (Man Rogosa Sharpe), para bacterias lácticas, d) Agar ROGOSA, para lactobacillus y e) Agar Sabouraud para el aislamiento de hongos y levaduras.

Aislamiento de microorganismos

En cada placa, se inocularon 100 µL de cerveza (sin diluir) por extensión con una varilla de vidrio y se incubaron a 20- 35 °C por 24 – 48 h o hasta la aparición de colonias. Posteriormente, se realizó el conteo de unidades formadoras de colonias (UFC) y se aislaron colonias con morfología diferente.

Identificación de microorganismos

Para la identificación por MALDI-Biotyper®, se siguió el protocolo recomendado por el fabricante (Bruker Daltonics) con ligeras modificaciones. En breve, una alícuota (tomada con un palillo de dientes) de las colonias aisladas fue transferida a pocillos de la placa Polished Steel, cubiertos con 1 µL de ácido fórmico (AF) al 70%, se deja secar y 1 µL acido alfa-ciano-4-hidroxicinámico (HCCA 10 mg/mL en 50% MeCN:50% TFA al 1%) como matriz química. Una vez seca la muestra se lleva la placa al espectrómetro de masas MALDI-TOF para su análisis. Antes del análisis, el equipo fue calibrado utilizando el estándar BTS (Bacterial Test Standard, Bruker Daltonics) de acuerdo con las recomendaciones del fabricante. Los espectros de masa fueron adquiridos en modo lineal positivo dentro de un intervalo de *m/z* 2,000–20,000. Para aquellos aislamientos en los que obtuvieron scores < 1.7, se resembraron por 24 h y se les realizó un proceso de extracción de proteínas utilizando agua-etanol, AF al 70 %, y acetonitrilo previo al análisis. La identificación de los microorganismos se realizó mediante comparación de los espectros de masas incluidos en la base de datos del software MALDI-Biotyper®, (versión 3.0, Bruker Daltonics), que contiene aproximadamente 5,000 espectros de referencia. Se consideran los siguientes criterios de identificación recomendados por el fabricante:

- Score ≥ 2.0: identificación confiable a nivel de especie.
- Score 1.7–1.99: identificación probable a nivel de género y tentativa a nivel de especie.
- Score < 1.7: identificación no confiable.

RESULTADOS

Crecimiento microbiológico en medios selectivos

Se analizaron 37 muestras de cervezas, 12 de barril y 25 de botella, de las cuales 2 correspondían a cervezas industriales como referencias y 35 cervezas artesanales. En la Tabla 1 se resume el crecimiento microbiológico observado en los diferentes medios de cultivo. En las cervezas industriales no se observó crecimiento de microrganismos en ninguno de los medio evaluados, por lo que indicaría el adecuado control de calidad del producto. En las cervezas artesanales (n=35), se observó crecimiento en YPD en 10 muestras de barril y 15 de botella, sumando un total de 25 muestras (71%). En MRS, crecieron 9 muestras de barril y 9 de botella, totalizando 18 muestras (51%). En Rogosa, crecieron 8 muestras de barril y 8 de botella, totalizando 16 muestras (46%). En Sabouraud, crecieron 7 muestras de barril y 5 de botella, totalizando 12 muestras (34%). En VRBA, solo crecieron 2 muestras de barril, totalizando 2 muestras (6%). Nueve muestras artesanales no presentaron crecimiento en ningún medio: 1 de barril y 8 de botella (26% del total de artesanales)

Tabla 1. Crecimiento microbiológico por medio de cultivo, según el tipo (artesanal e industrial) y presentación (barril o botella) de cerveza.

Medio de cultivo	Tipo de microorganismos	Cervezas Artesanal (n=35)			Cervezas Industriales (n=2)
		Barril (n=12)	Botella (n=23)	Total	Botella
YPD	Levaduras	10 (83%)	15 (65%)	25 (71%)	-
MRS	Bacterias ácido-lácticas	9 (75%)	9 (39%)	18 (51%)	--
Rogosa	Lactobacilos	8 (67%)	8 (35%)	16 (46%)	--
Sabouraud	Hongos y levaduras	7 (58%)	5 (22%)	12 (34%)	--
VRBA	Coliformes	2 (17%)	----	2 (6%)	--
Sin crecimiento en ningún medio		2 (17%)	8 (35%)	11 (29 %)	---

Identificación de microorganismos por MALDI-Biotyper®

Los microorganismos aislados en diferentes medios de cultivo fueron identificados mediante espectrometría de masas MALDI-TOF con el sistema Biotyper®. En la Tabla 2 se presentan los resultados agrupados por categorías microbiológicas para las cervezas artesanales (n=35).
Las levaduras fermentativas del género *Saccharomyces spp* fueron las más frecuentes, detectándose en 25 muestras artesanales (71%), con scores ≥ 2.0 en más del 80% de los casos, lo que indica una identificación confiable a nivel de especie.

Las bacterias ácido-lácticas del género *Lactobacillus spp* y otras levaduras del género *Candida spp* se detectaron en aproximadamente el 23% de las cervezas artesanales (8 muestras cada una), con scores ≥ 2.0 en alrededor del 70% de los aislamientos. Los hongos filamentosos (géneros *Mucor spp, Geotrichum spp, Wickerhamomyces spp*) se identificaron en 5 muestras artesanales mayoritariamente con scores en el rango de identificación probable a género (1.7-1.9, 100%).

Los coliformes se detectaron exclusivamente en 2 muestras de cerveza artesanal de con scores ≥ 2.0 en el 100% de los casos. Otras bacterias de los géneros *Bacillus* y *Paenibacillus* se identificaron en aproximadamente el 5% de las muestras artesanales (2 muestras), con scores de 1.76 y 2.17. Finalmente, un porcentaje de aislamientos (≈5% de las colonias aisaladas) no pudo ser identificado de manera confiable (score < 1.7), incluso después de aplicar un protocolo de extracción de proteínas.

Tabla 2 Identificación de microorganismos por MALDI-TOF en cervezas

Categoría microbiológica	Artesanales (n=35)	Score de identificación
Levaduras fermentativas (*Saccharomyces* spp.)	25 (≈71%)	≥ 2.0 en ≈80%
Bacterias ácido-lácticas (*Lactobacillus* spp.)	8 (≈23%)	≥ 2.0 en ≈70%
Otras levaduras (*Candida* spp.)	8 (≈23%)	≥ 2.0 en ≈70%
Hongos filamentosos (*Mucor*, *Geotrichum*, *Wickerhamomyces*)	5 (≈14%)	1.7-1.99 (100%)
Coliformes	2 (≈5%)	≥ 2.0 (100%)
Otras bacterias (*Bacillus*, *Paenibacillus*)	2 (≈15%)	1.76 y 2.17
No identificados	11 aislamientos (≈ 5%)	< 1.7

La detección de bacterias ácido-lácticas, coliformes y hongos filamentosos es relevante, ya que estos microorganismos pueden producir aminas biogénicas y otros metabolitos que afectan la calidad e inocuidad de la cerveza artesanal.

Con estos resultados se hace evidente la falta de pasteurización y filtración en la producción de las cervezas como era esperado, esto debido a que la presencia de microorganismos distintos a *S. cerevisiae*, si no se agregaron voluntariamente para obtener un perfil organoléptico en específico, representan contaminación microbiana del producto en alguna fase de su producción, almacenamiento y/o distribución. La detección de *coliformes.* constituye un hallazgo de interés sanitario, ya que su presencia podría indicar deficiencias en las condiciones higiénicas durante la producción o manipulación del producto.

CONCLUSIONES

En este estudio, se analizaron 35 cervezas artesanales, principalmente, del estado de Guanajuato de distintos estilos de barril y de botella, y 2 cervezas industriales como referencia. De las muestras artesanales, aproximadamente el 74% presentaron crecimiento microbiológico en al menos un medio selectivo, mientras que el 26% restante no mostró crecimiento en ninguno de los medios utilizados. La mayoría de las muestras presentaron crecimiento de *S. cerevisiae*, la levadura típica de la fermentación alcohólica, también se detectaron otros microorganismos de interés sanitario y de calidad, incluyendo bacterias ácido-lácticas, otras levaduras, coliformes, hongos filamentosos y otras bacterias. La presencia de estos microorganismos, particularmente en cerveza artesanal de barril, evidencia la necesidad del monitoreo microbiológico continuo, así como de fortalecer las prácticas de control sanitario durante la producción, almacenamiento y distribución para lograr una mejor calidad de las cervezas para su adecuada distribución en el mercado.

BIBLIOGRAFÍA

1. Garcia Lara, B., Wrobel, K., Corrales Escobosa, A. R., Serrano Torres, O., Enciso Donis, I., & Wrobel, K. (2
2. 021). Mass spectrometry-based identification of bacteria isolated from industrially contaminated site in Salamanca (Mexico) and evaluation of their potential for DDT degradation. Folia Microbiologica, 66, 355-369.
3. Koller, H., & Perkins, L. B. (2022). Brewing and the Chemical Composition of Amine-Containing Compounds in Beer: A Review. Foods, 11(3). doi:10.3390/foods11030257
4. López, M. G., Roche, E., & Rodríguez, E. (2020). Contaminant microbiota in craft beers. Journal of microbiology, biotechnology and food sciences, 9(6), 1181-1186.
5. Silva-Jiménez, H., Araujo-Palomares, C. L., Macías-Zamora, J. V., Ramírez-Álvarez, N., García-Lara, B., & Corrales-Escobosa, A. R. (2018). Identification by MALDI-TOF MS of environmental bacteria with high potential to degrade pyrene. Journal of the Mexican Chemical Society, 62(2), 214-225.
6. Zhang, J., J. Plowman, S. Clerens, L. Vanhanen and S. L. W. On (2025). "Decoding brewing yeast signatures: a MALDI-TOF MS approach to strain identification and beer style correlation." Journal of Applied Microbiology 136(12).

SÍNTESIS ONE POT DE FLUOROQUINOLONAS A PARTIR DE ANILINAS SUSTITUIDAS

[1]Luis Felipe Cortez Torres, [1]Hiram Hernández López, [1]Jesús Adrián López, [2]Christian Hans Correa Aguado.

[1]Universidad Autónoma de Zacatecas, [2]Instituto Politécnico Nacional
lfelipecoto@uaz.edu.mx

RESUMEN

Las fluoroquinolonas son un grupo de antibióticos que han presentado gran utilidad en la práctica clínica, entre sus principales propiedades farmacológicas se encuentran como: antibacterianos, antineoplásicos, antifúngicos, entre otras[1]. Su estructura le confiere características químicas únicas, las cuales permiten su manipulación para modificar sus propiedades biológicas. Sin embargo, los métodos clásicos de síntesis presentan desventajas importantes derivadas de los procesos continuos de purificación, como excesiva utilización de recursos energéticos y de insumos; lo que lleva a que disminuya el rendimiento de reacción[2]. Por lo que es necesario encontrar mejores procesos de reacción que reduzcan estas desventajas. Una alternativa de gran peso son las reacciones multicomponentes, principalmente los procesos one pot, donde al menos tres reactivos son combinados en un mismo matraz de reacción para generar un producto, el cual contiene de manera proporcional todos los componentes de los materiales de partida; poseen alto poder exploratorio y son procesos selectivos y convergentes[3]. En el presente trabajo, se enfocó al desarrollo metodológico one-pot para la síntesis de fluoroquinolonas basados en la reacción de Gould-Jacobs que involucra las reacciones de secuenciación de cinco pasos, de los cuales es posible acoplarlos. Para tal propósito se evaluaron dos estrategias de síntesis. En primera estrategia se montó un sistema de destilación añadiendo bajo cantidades equimolares, las diferentes anilinas sustituidas (de manera individual) junto con el etoximetilenmalonato de dietilo a 110 °C entre 10-12 minutos; posteriormente se añadieron yodoetano, acetonitrilo como disolvente y carbonato de potasio como catalizador, esto para añadir el grupo alquilo, a la misma temperatura durante 2 horas y media y al final se añadieron difenil éter y se aumentó la temperatura a 250 °C durante 1 hora y 20 minutos lo que favoreció a la ciclación intramolecular, formando el núcleo de la quinolona. En la segunda estrategia, no fue posible la adición del grupo alquilo en el nitrógeno de la quinolona, vía one-pot, generando la 4-quinolona con un 50% de reacción. En conclusión, la reacción de secuenciación propuesta pot Gould-Jacobs posee ciertas características químicas que permiten adecuar cada paso en un método one-pot, acotando tiempos y costos de producción al generar los compuestos intermediarios.

INTRODUCCIÓN

Existen gran variedad de medicamentos antimicrobianos que han permitido contraatacar diversas infecciones ocasionadas por células bacterianas. La importancia y uso de estos medicamentos se debe al enfoque en su mecanismo de acción, principalmente, la inhibición de algunas de las enzimas requeridas para que se lleve a cabo el crecimiento y reproducción de las bacterias (Bueso 2016).

Se tiene el desafío de encontrar los métodos para que se lleve a cabo la producción de estos medicamentos de forma tal que, el requerimiento de la población actual sea favorecido, sumado a esto, el impacto económico y ambiental que traen consigo los métodos convencionales de síntesis llevados a cabo a nivel industrial, por lo que se requieren procesos de síntesis química que cumplan ciertas consecuencias positivas, como, por ejemplo; que los métodos de síntesis tengan altos rendimientos del producto con menor consumo tanto energético como de reactivos, además de obtenerse una alta capacidad de exploración y selectividad química; que permitiría mayor disponibilidad de sustancias con capacidad farmacológica que puedan ser aprovechadas para satisfacer las necesidades actuales de la población.

Tienen diversas propiedades entre las cuales se encuentran: antiinflamatorios, inhibidores de la actividad de la anhidrasa carbónica, función antioxidante e inhibición de la acetilcolinesterasa (Prashant 2019), agentes antivirales, antifúngicos, antiparasitarios antibacterianos y antineoplásicos (Ginelle 2016). En relación con estas dos últimas, se están realizando investigaciones para obtener una mayor diversidad de estos compuestos que permitan aumentar su ventana terapéutica (figura 1).



Figura 5.Algunas quinolonas utilizadas como anticancerígenos (Ginelle 2016)

Con respecto a su farmacocinética, las quinolonas son generalmente bien absorbidas por vía oral, la bioviabilidad excede el 75% para la mayoría de los agentes; la mayoría de las quinolonas son excretadas en cantidades moderadas a altas sin cambios por vía urinaria; la naturaleza zwiterionica de las quinolonas los hace posible para el transporte por los sistemas aniónico y catiónico (Dudle 2003).

El grupo carboxilo en la posición 3 y el carbonilo exocíclico en posición 4 conforman la parte de la molécula que se une a la DNA girasa bacteriana (figura 2). Al incorporar un átomo de flúor en la posición 6 y un grupo piperazínico en la posición 7, le confiere un incremento notable en las propiedades antibacterianas de la molécula.

La posición N1 confiere las propiedades farmacocinéticas y la potencia en general. La posición 2 no debe contener grupos voluminosos para que obstruya el sitio de unión. La posición 5 puede ser sustituida con grupos pequeños como metilo para incrementar la potencia contra grampositivos (Langer 2024).

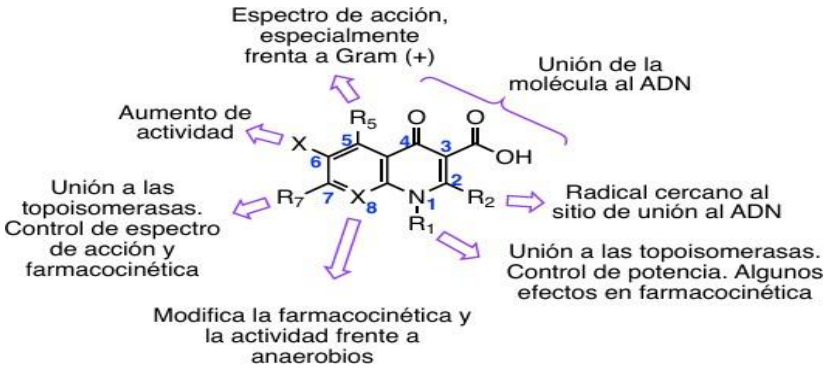


Figura 6. Relación estructura actividad (Dudle 2003).

La síntesis clásica incluye varias desventajas como, por ejemplo, que incluyen procesos lineales que involucran una purificación posterior, aumentando significativamente el gasto energético, la producción de desechos tóxicos y la disminución del rendimiento de reacción.

TEORÍA

Las reacciones multicomponente (MCR) son transformaciones químicas, donde al menos tres reactivos, de fácil accesibilidad, son combinados en un mismo matraz de reacción para generar un producto, el cual, contiene de manera proporcional todos los componentes de los materiales de partida (figura 3).



Figura 3. Ventajas de las reacciones multicomponente (Hayashi 2021).

El proceso one pot es definido como una estrategia en la cual los reactivos sean sometidos a procesos químicos sucesivos en un solo reactor.

Estos procesos pueden ser; de un solo paso, en el que todos los componentes sean agregados al mismo tiempo; o secuenciales, en el que se agregan los componentes en diferentes momentos del proceso y sin aislar los productos intermedios (Hayashi 2021).

Se han desarrollado diferentes hallazgos con respecto a la síntesis de quinolonas por medio de RMC ya sea por tipos de reacción específicos o procesos aislados particulares. Entre los cuales se encuentran:

Reacción de Povarov: Esta reacción es útil para obtener tetrahidroquinolinas que se oxidan para dar lugar a la quinolona correspondiente.

De acuerdo con la síntesis propuesta por Xi Li y col; se producen quinolonas 2,3- disustituidas a partir de aldehído, anilina y una enaminona (figura 4) (Li 2017).

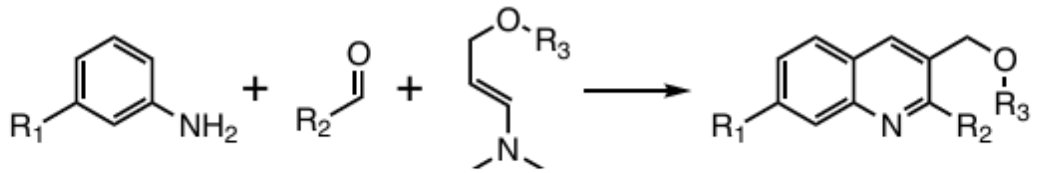


Figura 4. Reacción de Povarov (Li 2017).

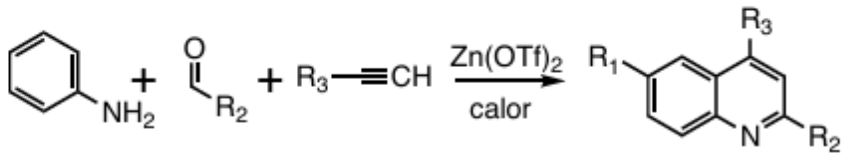
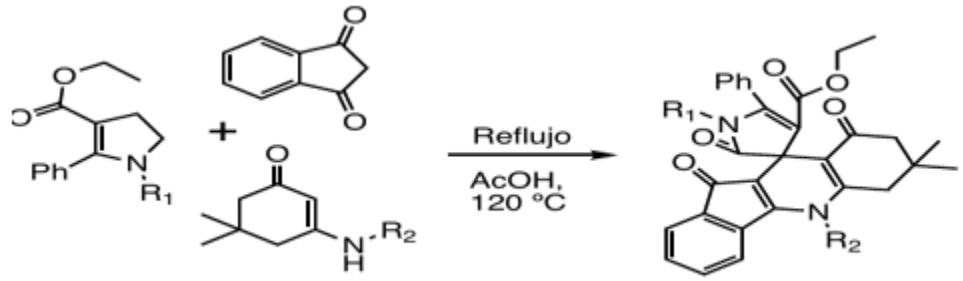


Figura 5. Reacción de Hantszch (Dmitriev 2016).

Reacción de Hantszch: Esta reacción es utilizada ampliamente para la construcción de las indenoquinolonas. Según la síntesis reportada por Maksim V. Dmitriev y col; se involucra en un proceso one pot de tres componentes, utilizando un 1H-pirrol-2,3 diona, un aminociclohexanona y 1,3-indanediona en ácido acético a reflujo. La adición del fragmento pirrol-2-ona incrementa las capacidades antimicrobianas del compuesto (figura 5) (Dmitriev 2016).

Las quinolonas 2,3-disustiuidas se han sintetizado mediante reacciones multicomponente de alquilo, amino y aldehído usando una sal triflato de zinc como catalizador. Bao y col reportaron un protocolo de reacción simple y efectivo para la construcción de quinolonas sulfoniladas (2,3-disustituidas) en agua a través de acoplamiento regulado por polvo de zinc (figura 6) (Weyesa 2020).



Fígura 6. Reacción one pot particular (Weyesa 2020).

Objetivo

Formar el anillo de quinolona usando anilina mediante el método one pot.

PARTE EXPERIMENTAL

Se montará un sistema de reacción en donde se colocará 1 equivalente de 3,4-difluoroanilina y 1 equivalente de etoximetilenmalonato de dietilo (relación 1:1) en un matraz bola pequeño en presencia de un baño de aceite. La reacción se llevará a cabo a 110-120˚C (figura 7), el tiempo óptimo de la reacción se determinará mediante el monitoreo por cromatografía en capa fina (CCF). Al terminar, se agregará difenil éter y se elevará la temperatura hasta 250˚C, al igual que la etapa anterior, el tiempo de reacción será determinada por monitoreo en CCF. De la misma manera se realizará empleando anilina en lugar de 3,4-difluoroanilina. Se realizará caracterización mediante espectroscopia infrarroja.

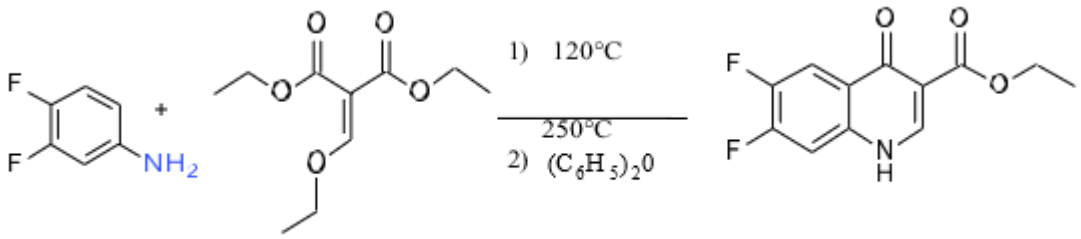


Figura 7. Reacción one pot para formar el anillo quinolónico

RESULTADOS

Utilizando 3,4-dfluoroanilina se obtuvo el producto 6,7-difluoro-4-oxo-1,4-dihidro-quinolin-3-carboxilato de etilo en forma de un polvo blanco con 50% de rendimiento. Realizando una comparación de rendimientos con respecto a la síntesis clásica el cual es de 72%; además de comparación de tiempos de reacción y gasto económico y con respecto a lo primero es superior los resultados en el one pot que llevó 1 día y medio contra 3 días de la síntesis clásica y respecto al gasto económico también es menor en del one pot que de la reacción clásica.

Utilizando anilina se obtuvo el producto 4-oxo-1,4-dihidro-quinolin-3-carboxilato de etilo en forma de un polvo de color ligeramente café con 30% de rendimiento. Realizando la misma comparación del producto anterior, el gasto económico también es ligeramente menor, no hay rendimientos

reportados por la síntesis clásica para comparar rendimientos; la ventaja de tiempo es similar al producto anterior.

Se realizó una gráfica con el seguimiento cromatográfico comparando el reactivo anilina, el primer producto intermediario y el producto final. En una gráfica comprando porcentaje de presencia y minutos de reacción (figura 8).

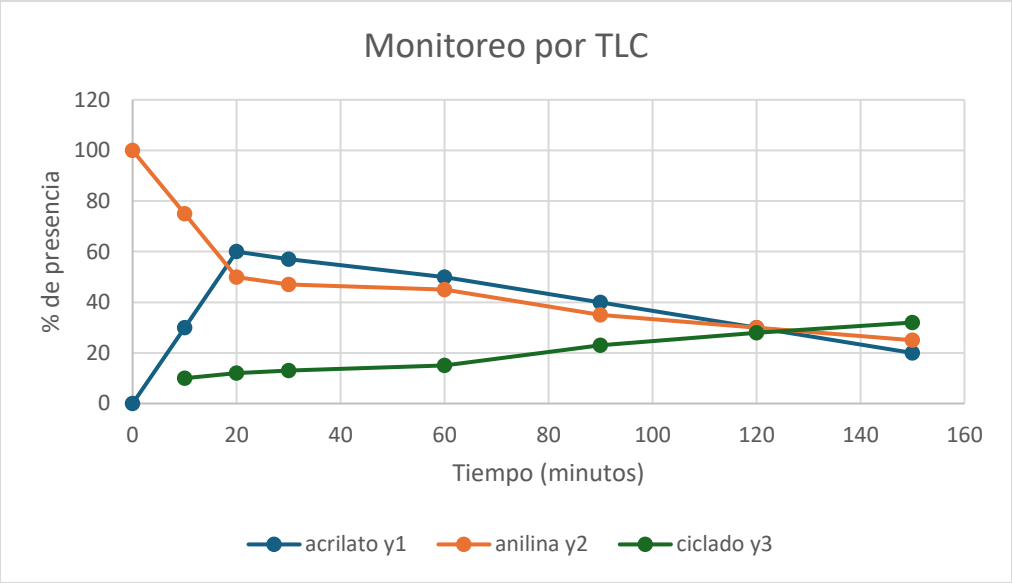


Figura 8. Seguimiento por cormatografía

Se realizó un espectro de infrarrojo para el producto 4-oxo-1,4-dihidro-quinolin-3-carboxilato de etilo en el que se incluyen los grupos funcionales incluidos en el producto.

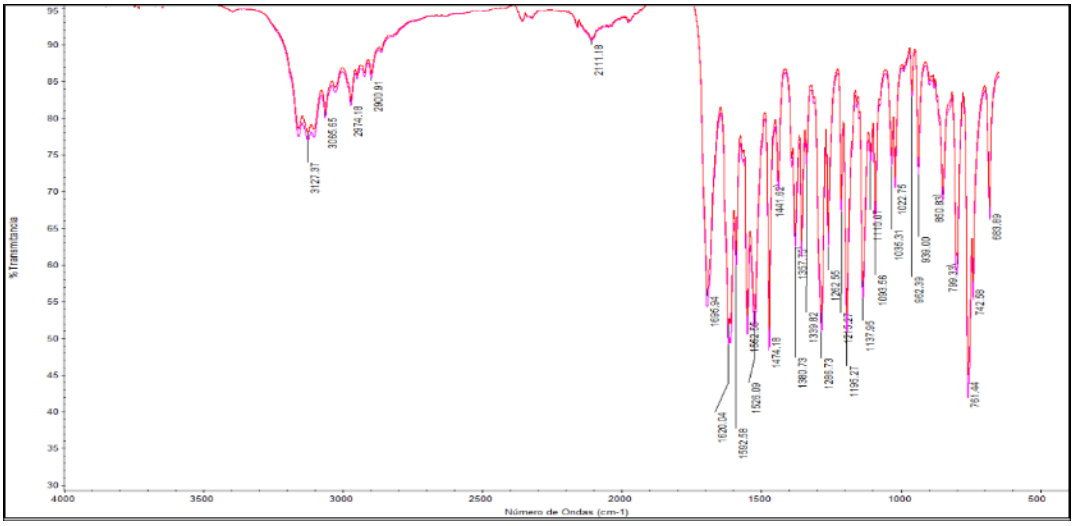


Figura 9. Espectro infrarrojo de 4-oxo-1,4-dihidro-quinolin-3-carboxilato de etilo

CONCLUSIONES

La reacción clásica tiene características que pueden ser adecuadas al proceso one pot, teniendo como perspectiva acoplar más reacciones e incluir más anilinas para generar mayor cantidad de productos. Esto considerando las principales problemáticas que existen en la salud pública como lo son el desabasto y la falta de diversidad de medicamentos, pensando a futuro, con el uso de estas reacciones satisfacer estas necesidades.

BIBLIOGRAFÍA

1.-Prashant D. (2019). Recent advances in the synthetic and medicinal perspective of quinolones: a review. Bioorganic chemistry. 1-3. DOI: 10.1016/J.bioorg.2019.103291

2. Langer P. (2024). Adventures in the Chemistry of Multicomponent and Domino Reactions. Europal Journal Of Organic Chemistry. 1-3. DOI: 10.1002/ejoc.202400153

3.- Hayashi Y. (2021). Time and pot economy in total synthesis. Accounts of chemical research. 1386. DOI: 10.1021/acs.accounts.0c00803

4.-Bueso Bordils J I. (2016). Desarrollo de un modelo matemático topológico a partir de quinolonas para predecir actividad antibacteriana frente a Staphylococcus aureus resistente a meticilina. Búsqueda y obtención de nuevos antibacterianos. Universidad Cardenal Herrera. 21-22.

5.-Ginelle A. (2016). Recent advances in metal-free quinoline synthesis. Molecules. Review. 1-3.

6.- Dudley M N. (2003). Quinolone antimicrobial agents. ASM press. 3a edición. Chapter 6: pharmacokinetics of fluoroquinolones. Washington USA. P 119-128.

7.- Dmitriev M V, Salnikova T V, Silaichev P S y Maslivets A N. (2016). One pot, the component synthesis of sipir [indeno[1,2-b]-quinoline-10,3-pyrroles] via the Hantzsch-type reaction of 1H-pyrrole-2,3-diones. Tetrahedron letters. 1 2.

8.- Weyesa A, Mulugeta E. (2020). Recent advances in the synthesis of biologically and pharmaceutically active quinoline and its analogues: a review. Royal society of chemistry. 20787-20789.

ESTUDIO COMPARATIVO ENTRE EL CARBÓN VEGETAL EN FORMA DE POLVO Y PELLETS COMO MATERIAL BIOADSORBENTE DE COLORANTES TEXTILES EN AGUA

Karla Mariana Barragan Jaramillo, Gabriela Camarillo Martínez, José Antonio Pérez Tavares

Centro Universitario de los Lagos, Universidad de Guadalajara.
karla.barragan1718@alumnos.udg.mx

RESUMEN

La contaminación del agua por descargas industriales, particularmente de la industria textil, representa un problema ambiental significativo debido a la presencia de colorantes con alta estabilidad química y baja biodegradabilidad. Estos compuestos afectan la calidad del agua, reducen la penetración de la luz y pueden generar efectos adversos en los ecosistemas acuáticos. Entre las tecnologías empleadas para su remoción, la adsorción mediante carbón activado se ha consolidado como una alternativa eficiente, de bajo costo y fácil implementación; sin embargo, su desempeño depende en gran medida de sus características físicas, como la forma y el área superficial. En este trabajo se realizó un estudio comparativo entre carbón activado en polvo y en pellets para evaluar su eficiencia en la adsorción de colorantes textiles en soluciones acuosas. Se utilizaron dos colorantes comerciales (El Caballito): rosa mexicano y rojo granada. Para el colorante rosa mexicano se preparó una solución madre de 350 ppm, a partir de la cual se realizaron diluciones seriadas hasta alcanzar una concentración final de 15 ppm. De forma similar, para el colorante rojo granada se elaboró una solución madre de 200 ppm y se efectuaron diluciones sucesivas hasta 15 ppm, con el objetivo de construir curvas de calibración. La cuantificación de los colorantes se llevó a cabo mediante espectrofotometría UV-Vis, determinándose las longitudes de onda máximas de absorción en 525 nm para el rosa mexicano y 500 nm para el rojo granada. Para los ensayos de adsorción se seleccionaron las cuatro concentraciones más altas de cada colorante. En tubos cónicos con tapa se colocaron 0.5 g de carbón activado, ya sea en polvo o en pellets, junto con 40 mL de cada solución, manteniéndose las muestras bajo agitación constante. En el caso del carbón activado en pellets, se tomaron alícuotas cada hora para el seguimiento del proceso de adsorción, mientras que para el carbón activado en polvo las alícuotas se extrajeron cada 20 minutos, considerando su mayor velocidad de adsorción. Posteriormente, las muestras fueron filtradas y analizadas por espectrofotometría UV-Vis para determinar la concentración residual y calcular el porcentaje de remoción. Los resultados mostraron que ambas presentaciones de carbón activado presentan alta eficiencia en la remoción de colorantes textiles. El carbón activado en polvo exhibió una cinética de adsorción significativamente más rápida, atribuida a su mayor área superficial. Se observó la remoción completa del colorante rosa mexicano (350–200 ppm) tras 1h 20min, mientras que el rojo granada (200–75 ppm) se eliminó totalmente en aproximadamente 40min. En contraste, el carbón activado en pellets mostró una remoción más gradual, alcanzando entre 80 y 97% para el rosa mexicano tras 6h, mientras que el rojo granada presentó hasta un 95% de adsorción en 5h. Se concluye que la forma física del adsorbente influye de manera determinante en la eficiencia y velocidad del proceso de adsorción.

INTRODUCCIÓN

En la actualidad, la sociedad enfrenta desafíos críticos derivados del crecimiento exponencial de la población, la expansión económica acelerada y las practicas intensas dela agricultura e industria. Estos factores han provocado la acumulación masiva de residuos y una dependencia insostenible de recursos limitados, lo que genera fenómenos globales como el cambio climático y la alteración de los ciclos biológicos naturales.

El agua es el recurso natural más valioso, pero su escasez y degradación representan una de las mayores amenazas del siglo XXI. El sector industrial es uno de los principales consumidores y contaminantes; se estima que en naciones en vías de desarrollo hasta el 70% de los residuos tóxicos

industriales se vierten directamente a los cuerpos de agua sin tratamiento previo. Dentro de estos vertidos, la industria textil es especialmente problemática debido al uso de colorantes sintéticos que poseen una alta esta estabilidad química y una baja biodegradabilidad. Estos compuestos impiden la penetración de la luz solar, inhibiendo la fotosíntesis y alterando gravemente los ecosistemas acuáticos.

Aunque existen tecnologías avanzadas, muchas enfrentan limitaciones por sus altos costos energéticos y operativos. Por ello, se hace indispensable el desarrollo de materiales bioadsorbentes de bajo costo obtenidos a partir de residuos abundantes o biomasas. La adsorción con carbón activado destaca por su versatilidad y alta eficiencia para retirar contaminantes orgánicos gracias a su elevada porosidad y área superficial.

Considerando que la efectividad del carbón activado depende no solo de su química superficial sino también de su presentación física, este trabajo tiene como objetivo general evaluar y comparar la eficiencia y cinética de adsorción del carbón vegetal en dos presentaciones distintas: polvo y pellets. Se busca determinar como la variación en el área superficial disponible influye en la capacidad de remoción de colorantes textiles comerciales en soluciones acuosas.

TEORÍA

El proceso de remoción de colorantes mediante materiales carbonosos se fundamenta en la adsorción, un fenómeno fisicoquímico eminentemente superficial en el que se produce un aumento de la concentración de una sustancia (adsorbato) en la interfase de una fase sólida denominada adsorbente. Este mecanismo ocurre debido a que la estructura superficial del adsorbente presenta fuerzas moleculares desequilibradas que atraen y retienen a las moléculas del colorante en sus paredes o poros. Dependiendo de la naturaleza de estas fuerzas y de la energía involucrada, el fenómeno se clasifica principalmente en fisisorción y quimisorción.

La fisisorción o adsorción física se caracteriza por interacciones débiles de tipo Van der Waals, con energías de interacción bajas que generalmente oscilan entre los -10 y -40 kJ/mol. Debido a esta baja energía, es un proceso reversible donde las moléculas pueden disponerse en multicapas sobre la superficie del sólido. Por el contrario, la quimisorción implica fuerzas mucho más intensas derivadas de la formación de enlaces químicos específicos entre el adsorbato y el adsorbente. En este caso, la energía puesta en juego es considerablemente mayor, situándose entre los -80 y -500 kJ/mol, lo que suele resultar en un proceso irreversible limitado a la formación de una monocapa molecular.

El carbón activado se define como un material de estructura amorfa y elevada porosidad, cuya eficiencia depende de su red interna de poros. Esta se clasifica en microporos (< 2 nm), responsables de la mayor parte del área superficial; mesoporos (2-50 nm), que actúan como canales de transporte; y macroporos (> 50 nm), que facilitan el acceso del fluido al material. Por lo tanto, la capacidad de adsorción está intrínsecamente ligada al área superficial disponible y a la accesibilidad del adsorbato a los sitios activos del carbón.

En consecuencia, de lo anterior relatado, este estudio compara el desempeño del carbón activado en dos presentaciones físicas. Por una parte, el carbón activado en polvo posee un tamaño de partícula reducido, lo que minimiza las resistencias a la transferencia de masa y ofrece una cinética de adsorción más rápida debido a su mayor área superficial externa inmediatamente expuesta. En contra parte, el carbón activado en pellets consiste en un formato granular compacto que presenta una difusión intraparticular más lenta; sin embargo, aunque su cinética es más gradual, ofrece ventajas operativas en sistemas de flujo continuo al reducir la caída de presión y facilitar su separación.

Finalmente, la cuantificación del proceso se fundamenta en la espectrofotometría UV-Vis, utilizando la Ley de Beer-Lambert para relacionar la absorbancia de la solución con la concentración residual de los colorantes (rosa mexicano y rojo granada) a sus respectivas longitudes de onda máximas, permitiendo así el seguimiento preciso del proceso de remoción en el tiempo.

PARTE EXPERIMENTAL

1. Preparación de las soluciones y curvas de calibración

Se utilizaron dos colorantes comerciales de la marca "El Caballito": rosa mexicano y rojo granada. Para el colorante rosa mexicano, se preparó una solución madre de 350 ppm, mientras que para el rojo granada fue de 200 ppm. A partir de estas, se realizaron diluciones seriadas hasta alcanzar una concentración de 15 ppm. La cuantificación se realizó mediante espectrofotometría UV-Vis, determinando las longitudes de onda de máxima absorción en 525 nm para el rosa mexicano y 500 nm para el rojo granada, permitiendo la construcción de las curvas de calibración correspondientes.

2. Ensayos de adsorción

Para evaluar la capacidad de remoción, se seleccionaron las cuatro concentraciones más altas de cada colorante. El experimento se llevó a cabo en tubos cónicos con tapa, donde se depositaron 0.5 g de carbón activado (en presentación de polvo o pellets) y 40 mL de la solución del colorante. Las muestras se mantuvieron bajo agitación constante para favorecer el contacto entre el adsorbato y el adsorbente.

3. Monitoreo y análisis de datos

El seguimiento del proceso se realizó mediante la extracción de alícuotas a intervalos definidos: cada 20 minutos para el carbón activado en polvo (debido a su cinética rápida) y cada hora para el carbón en pellets. Cada alícuota fue filtrada y analizada nuevamente por espectrofotometría UV-Vis. Finalmente, se calculó el porcentaje de remoción mediante la diferencia entre la concentración inicial (C_i) y la concentración residual (C_t) mediante la ecuación: $\% \, remoción = \frac{Ci - Ct}{Ci} * 100$

RESULTADOS

Primeramente, se establecieron los parámetros analíticos para la cuantificación de los colorantes. Las curvas de calibración obtenidas (Figura 1) mostraron una relación lineal consistente entre la absorbancia y la concentración en el rango de 15 a 350 ppm.

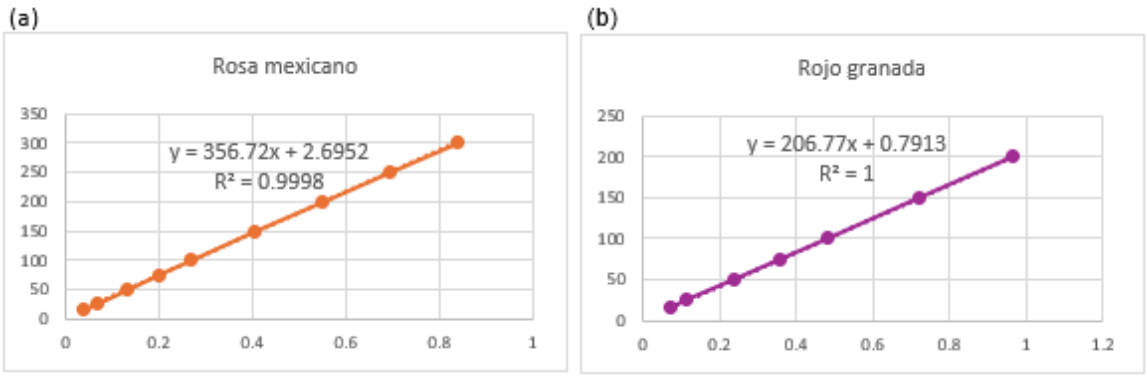


Figura 1. Curvas de calibración por espectrofotometría UV-Vis para los colorantes (a) Rosa mexicano y (b) Rojo granada. Los coeficientes de determinación (R^2) superiores a 0.99 confirman la fiabilidad del método para el seguimiento de la adsorción.

Posteriormente, se evaluó la capacidad de remoción en función del tiempo para ambos formatos de carbón vegetal. Los ensayos del carbón activado en polvo mostraron la eficiencia de remoción excepcionalmente rápida. Como se observa en la figura 2, se logró la adsorción total de colorante rosa mexicano en un tiempo de 80 minutos para las concentraciones más bajas. En el caso del rojo granada, el proceso fue aún más acelerado, alcanzando hasta un 100% de remoción en aproximadamente 40 minutos. Esta rapidez se atribuye a la gran área superficial del polvo, que permite un contacto inmediato entre los sitios activos y las moléculas del colorante.

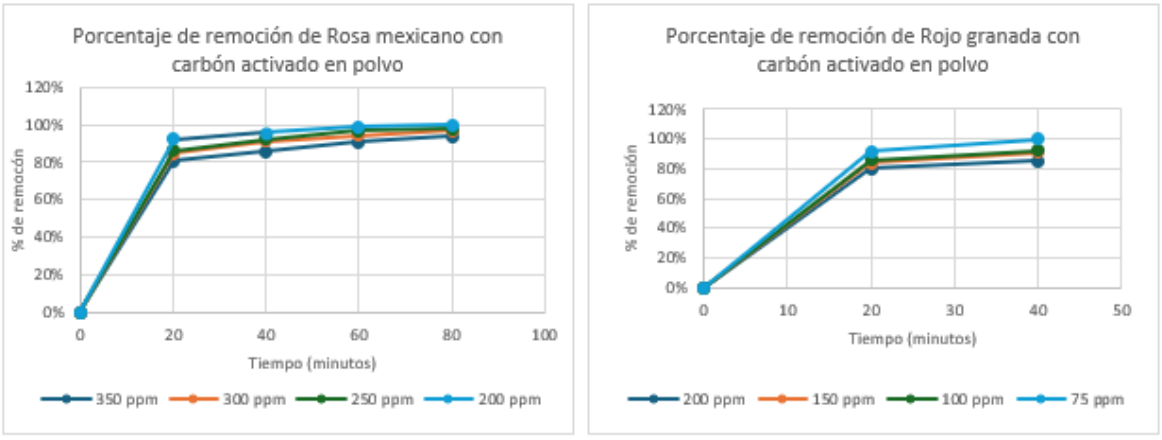


Figura 2. Graficas de porcentaje de remoción vs. Tiempo utilizando carbón activado en polvo. Se aprecia una remoción de hasta el 100% en las concentraciones más bajas de ambos colorantes en tiempos menores a 80 minutos, mientras que en las concentraciones mayores la eficiencia de remoción se mantuvo entre el 85% y 95%.

En contraste, el carbón activado en pellets presentó un comportamieinto más gradual. Aunque el material demostró una alta capacidad de adsorción, el tiempo necesario para alcanzar el equilibrio fue significativamente mayor. Tras 6 horas de contacto, el colorante rosa mexicano alcanzó remociones entre el 80 y 97%, mientras que el rojo granada llegó a 95% en 5 horas. Este retraso en la cinetica se atrubuye a que debido a la forma fisica las moléculas de colorante deben difundirse a través de los poros internos del pellet para ser retenidas.

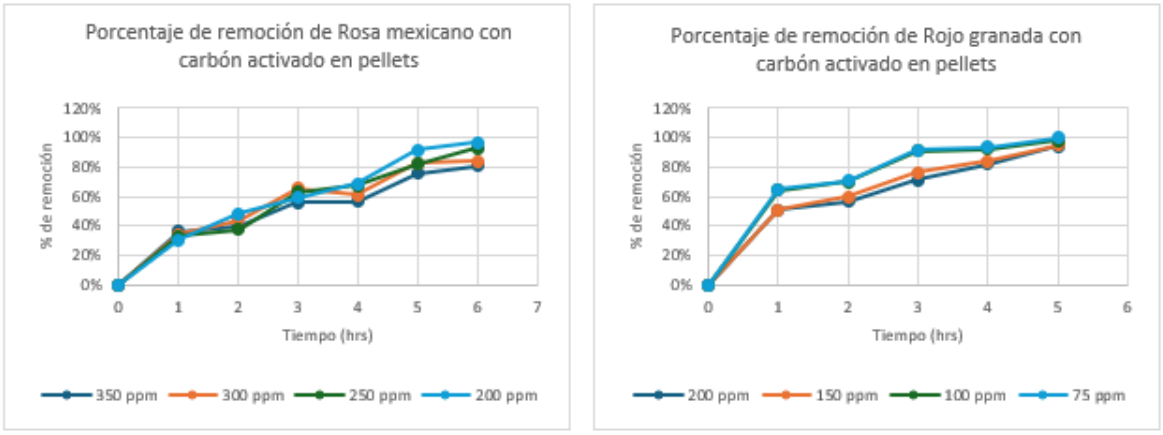


Figura 3. Graficas de porcentaje de remoción vs. Tiempo utilizando carbón activado en pellets. Se observa una adsorción gradual y prolongada, logrando niveles de remoción de entre el 80% y 97% para el rosa mexicano tras 6 horas, y de hasta un 95-100% para el rojo granada tras 5 horas de contacto.

Finalmente, para evidenciar los resultados obtenidos mediante el análisis espectrofotométrico, se puede apreciar un cambio en la coloración de las soluciones. Como se muestra en la figura 4, el uso de filtros de jeringa permitió separar eficientemente el adsorbente de las soluciones utilizadas, obteniendo una transparencia evidente. Esta evidencia cualitativa respalda los altos porcentajes de remoción calculados y demuestra la viabilidad del carbón vegetal como bioadsorbente para remover colorantes textiles en agua.

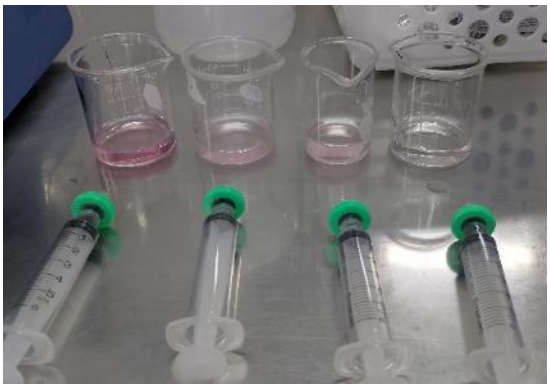


Figura 4. Evidencia visual del proceso de bioadsorción y metodología de separación. Se observa la transición de las diferentes concentraciones tras la filtración, confirmando la retención efectiva del colorante en el carbón

CONCLUSIÓN

El estudio confirma que el carbón vegetal activado es una herramienta altamente eficiente para la remoción de colorantes textiles en agua. Se concluye que la forma física del adsorbente es un factor determinante en el desempeño del tratamiento: mientras que la presentación en polvo ofrece una cinética significativamente más rápida debido a su mayor área superficial disponible, logrando remociones completas en tiempos menores a 80 minutos, los pellets presentan un proceso de adsorción más gradual, alcanzando niveles de eficiencia finales de entre 80% y 97% en periodos de 5 a 6 horas.

Estos resultados demuestran que ambas presentaciones son alternativas bioadsorbentes viables para mitigar el impacto ambiental de las descargas textiles, permitiendo elegir el formato más adecuado según los requerimientos de velocidad o diseño del sistema de tratamiento de agua. Para futuros trabajos, se sugiere ampliar el estudio hacia otros contaminantes orgánicos e inorgánicos, modificar las condiciones de pH y temperatura, así como explorar modelos cinéticos que permitan describir con mayor precisión los mecanismos de reacción observados.

BIBLIOGRAFÍA

1. Carriazo, J. G., Saavedra, M. J., Molina, M. F. (2010). Propiedades adsortivas de un carbón activado y determinación de la ecuación de Langmuir empleando materiales de bajo costo. Educación Química, 21(3), 224–229.
2. Martínez Ramírez, J. (2024). Estudio mediante espectroscopía UV-Vis de la eliminación de colorantes empleando carbones activos procedentes de biomasas.
3. Gallego Ramírez, C y Rubio Clemente, A. (2022). Remoción de colorantes en aguas procedentes de la industria textil mediante el uso de biocarbón. Asociación de Químicos e Ingenieros del Instituto Químico de Sarriá.
4. Álvarez Merino, M. Á., & Carrasco Marín, F. (Eds.). (2016). Aplicaciones de adsorbentes y catalizadores en procesos medioambientales y energéticos. Servicio de Publicaciones de la Universidad Internacional de Andalucía

RESPUESTA A ANTIBIÓTICOS POR BACTERIAS HETERÓTROFAS PROVENIENTES DE TRES POTREROS INUNDADOS EN EL CAMARÓN (MIXTEQUILLA, VERACRUZ)

María Teresa Núñez-Cardona, Patricia Castilla Hernández, Adriana Vargas Rosas y Facundo Rivera Becerril

Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Xochimilco.
mtnunez@correo.xoc.uam.mx

RESUMEN

En el Municipio de Ignacio de la Llave, Veracruz, se localiza el humedal de la Mixtequilla; es un ecosistema en la que se han establecido potreros ribereños que se inundan durante la época de lluvias y pierden el agua superficial en la época de secas mismos que son anegados por el Río Blanco y pequeños arroyos; los humedales son importantes para el reciclaje de nutrientes ya que son de los más productivos del planeta, sin embargo, al igual que otros humedales, el de la Mixtequilla se ve amenazado por las actividades agrícolas y, en los últimos años por la cría de ganado, actividad en la que se utilizan fertilizantes y agroquímicos, además de fármacos como los antibióticos y cuyo destino final es el agua. Con el objetivo de conocer la respuesta de las bacterias que habitan en tres potreros del humedal de la Mixtequilla, específicamente en la Comunidad de El Camarón, fueron colectadas muestras de agua de tres potreros, con estas se hicieron diluciones e inocularon cajas Petri conteniendo agar nutritivo, después de 24 horas de incubación, se hicieron asilamiento al azar, se obtuvieron cultivos puros que finalmente fueron sometidos a antibióticos específicos para bacterias Gram negativas y con formas de bacilos. Para el ensayo, se hicieron cultivos líquidos (caldo nutritivo) que fueron estriados en agar Müeller-Hinton y enseguida se colocaron sensidiscos compuestos por: Cefuroxima (XM), Norfloxacina (NOR), Aztreonam (AT), Cefotaxima (CTX), Ceftriaxona (CRO), Ácido nalidixico (NA), Nitrofurantoina (NI), Gentamicina (GM), Amikacina (AK), Ciprofloxacina (CI), Ofloxacina (OF), Ceftazidima (CAZ), Cefixima (FIX), Cefdinir (CD). De acuerdo con los resultados solo cinco de 23 cultivos presentaron resistencia a los antibióticos ensayados, así el cultivo PA3-14 fue resistente a dos (CRO y CD), el cultivo PA3-11 a cuatro (XM, CRO, FIX y CD); el PA1-20 a nueve (XM, NOR, AT, CTX, CRO, NI, CAZ, FIX, CD); el PA6-1 a cinco (NF, NI, GM, OF, CAZ); el cultivo PA6-14 a diez (XM, NOR, AT, CTX, CRO, NA, NI, CAZ FIX y CD), puede decirse que en cuatro de estos cultivos se observó resistencia a CRO. En los últimos años se ha resportado que la resistencia de los microorganismos a los antibióticos va en aumento, sin embargo los resultados observados en los aislados de la Mixtequilla revelan lo contrario pues si bien se detectaron al menos dos cultivos multirresistentes, 18 aislados de ellos fueron sensibles a todos los antibióticos ensayados, posiblemente esta respuesta se debe a que en la zona de estudio han sido poco utilizados estos fármacos o bien en el humedal está presenta un proceso de biodegradación por bacterias y la interacción de estas con plantas (especialmente a nivel de la raíz) ha servido para desarrollarse sistemas de biorremedación y eliminar estos fármacos del ambiente.

INTRODUCCIÓN

La Mixtequilla forma parte del municipio Ignacio de la Llave, considerado uno de los 52 municipios con mayor diversidad vegetal de Veracruz. Este municipio cuenta con 9,884.41 ha, conformadas por tres tipos de vegetación primaria (2,004.02 ha de manglar; 3,349.00 ha de popal-tular y 4,531.39 ha de sabana), su valor radica en que son ecosistemas con numerosas áreas naturales protegidas
El Camarón (La Mixtequilla, Veracruz), es una población rural, ubicada en la planicie costera del Golfo de México, está constituida por potreros ribereños y la transición del río Blanco. Las actividades principales de esta población son la ganadería, agricultura, pesca y captura de invertebrados (Ej. jaibas, langostinos, acociles y tegogolos). En las últimas décadas ha disminuido la pesca y captura de estos organismos, aumentando las actividades agropecuarias (la introducción de ganado va en aumento) e industriales (Ej. refinado de azúcar), por lo que el río Blanco recibe aguas residuales de

estas actividades y las generadas en los municipios y poblados aledaños lo que ha impactado negativamente la calidad del agua del río[1]. Cabe señalar que los pobladores de El Camarón utilizan el agua del río Blanco para sus actividades cotidianas, se consume agua envasada, con la que también se preparan los alimentos. El objetivo de este trabajo fue determinar la respuesta a antibióticos, por bacterias aisladas del agua de tres potreros ubicados en la comunidad de El Camarón, Mixtequilla, Veracruz (figura 1)

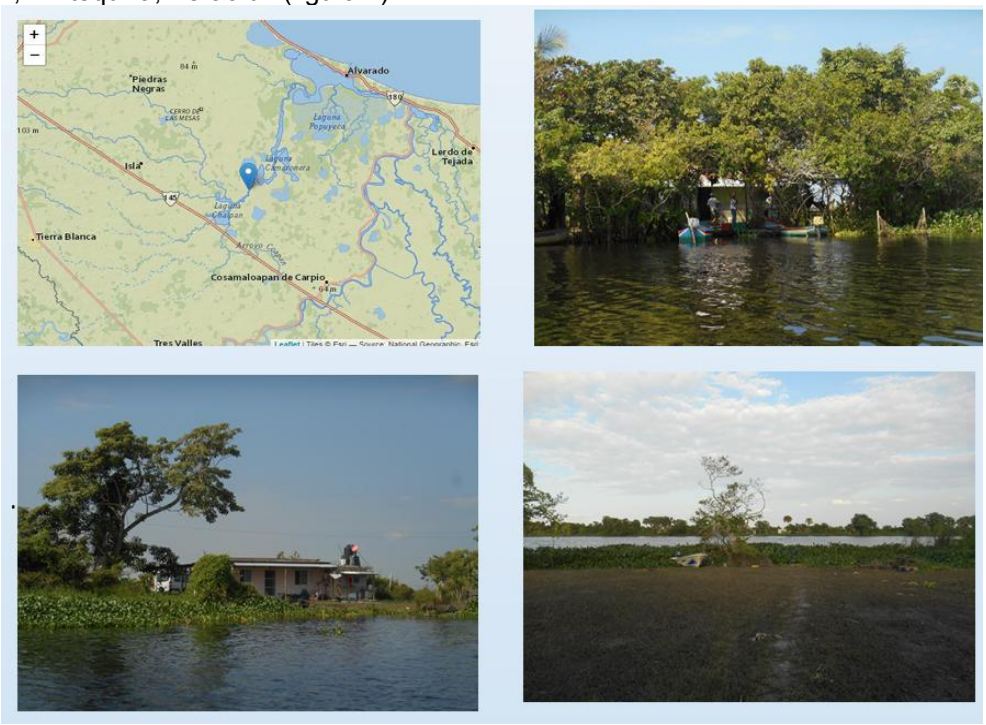


Figura. 1 Ubicación de la zona de estudio y puntos de muestreo.https://mexico.pueblosamerica.com/fotos-satelitales /el-camaron-16

TEORÍA

La resistencia bacteriana a los antibióticos es un problema de salud pública global que, según se estima, para 2050 causará más muertes que el cáncer [2]. Este fenómeno se agrava en contextos en los que el agua actúa como medio de transmisión, dispersión y evolución de bacterias resistentes, ya que puede funcionar como reservorio y vector de genes de resistencia[3].

La resistencia a los antibióticos se define como el aumento en las concentraciones inhibitorias mínimas (CIM) de un antibiótico, lo que provoca la falla terapéutica cuando ese antibiótico se utiliza contra el microorganismo en cuestión[4]. Las bacterias pueden desarrollar resistencia a través de diversos mecanismos tales como la transferencia horizontal de genes, un proceso que incluye la transformación (intercambio de ADN entre bacterias), la traducción o transducción (cuando un bacteriófago transfiere fragmentos de ADN de una bacteria a otra), y la conjugación en la cual una bacteria transfiere material genético a otra mediante un puente celular[5,6] Las bacterias también pueden adquirir resistencia a los antibióticos mediante la producción de enzimas que inactivan a estos fármacos, dificultando su acumulación y alterando su sitio de acción, ejemplos de ello son *Pseudomonas aeruginosa* resistente a carbapenémicos, *Acinetobacter* spp. resistentes a cefalosporinas, *Staphylococcus aureus* resistente a la meticilina (MRSA) y *Enterococcus faecium* resistente a la vancomicina, cuya resistencia se ha correlacionado directamente con el uso excesivo e inapropiado de estos antibióticos[3]

PARTE EXPERIMENTAL

Con frascos de vidrio estériles, se colectaron muestras de agua de tres potreros inundados, con estas se hicieron diluciones seriadas (solución salina (0.08% NaCl) e inocularon cajas Petri conteniendo agar nutritivo, después de 24 horas de incubación, se hicieron asilamiento al azar, se obtuvieron 23 cultivos puros que finalmente fueron expuestos a antibióticos específicos para bacterias Gram negativas y con formas de bacilos. Para este ensayo, se hicieron cultivos líquidos (caldo nutritivo) que fueron estriados en agar Müeller-Hinton y enseguida se colocaron sensidiscos con los antibióticos: Cefuroxima (XM), Norfloxacina (NOR), Aztreonam (AT), Cefotaxima (CTX), Ceftriaxona (CRO), Ácido nalidixico (NA), Nitrofurantoina (NI), Gentamicina (GM), Amikacina (AK), Ciprofloxacina (CI), Ofloxacina (OF), Ceftazidima (CAZ), Cefixima (FIX), Cefdinir (CD). Después de 18 horas de incubación a 28°C se determinó la resistencia a los antibióticos, considerando esta, positiva al observarse crecimiento alrededor de los sensidiscos.

RESULTADOS

De acuerdo con los resultados solo cinco de 23 cultivos, provenientes de un potrero, presentaron resistencia a los antibióticos ensayados (tabla 1). En los últimos años se ha reportado que la resistencia de los microorganismos a los antibióticos va en aumento, sin embargo en los aislados de la Mixtequilla revelan lo contrario pues si bien se detectaron al menos dos cultivos multirresistentes, 18 aislados fueron sensibles a todos los antibióticos ensayados, posiblemente esta respuesta se debe a que, en la zona de estudio, han sido poco utilizados estos fármacos o bien en el humedal podría presentase un proceso de biodegradación por bacterias y la interacción de estas con plantas (especialmente a nivel de la raíz) ha servido para desarrollarse sistemas de biorremedación y eliminar estos fármacos del ambiente.

Tabla 1. Aislados bacterianos (bacilos Gram negativos) provenientes de un potrero, resistentes (**azul intenso**) a los antibióticos ensayados.

Cultivo/antibiótico	Cefuroxima (XM)	Norfloxacina (NOR)	Aztreonam (AT)	Cefotaxima (CTX)	Ceftriaxona (CRO)	Ácido nalidixico (NA)	Nitrofurantoina (NI)	Gentamicina (GM)	Ofloxacina (OF),	Ceftazidima (CAZ)	Cefixima (FIX)	Cefdinir (CD)	N° de antibióticos
PA3-14													2
PA3-11													4
PA1-20													9
PA6-1													5
PA6-14													10

CONCLUSIONES

Los aislados de dos potreros fueron sensibles a los antibióticos ensayados y cinco de un potrero fueron resistentes al menos a dos de ellos; cuatro lo fueron ante ceftriaxona y Cefdinir (ambos pertenecientes a las cefalosporinas de tercera generación), son utilizados para tratar infecciones graves y las producidas por bacterias multirresistentes.

BIBLIOGRAFÍA

1. Rivera-Becerril, F., Signoret-Poillon, M., Ayala-Zermeno, M. A., Castilla-Hernández, P., García-Mena, J., Mier, T., ... & Viccon-Pale, J. A. (2008). Algunos aspectos ambientales y biológicos de dos potreros inundables de la Mixtequilla. ContactoS, 70, 31-39.
2. Camacho Silvas, L. A. (2025). Resistencia bacteriana, una crisis actual. Revista Española de Salud Pública, 97, e202302013.
3. Jovanovic, O., Amábile-Cuevas, C. F., Shang, C., Wang, C., & Ngai, K. W. (2021). What water professionals should know about antibiotics and antibiotic resistance: An overview. ACS ES&T Water,1(6), 1334-1351.

4. Amábile-Cuevas, C. F. (2018). Resistencia bacteriana: La crisis actual y por venir.Genómicas Hoy UACM,16, 9-12.
5. Amábile-Cuevas, C. F. (2022). Myths and misconceptions around antibiotic resistance: time to get rid of them. Infection & Chemotherapy,54(3), 393.
6. Medellín, A. M. (2011). El formidable reto de la resistencia bacteriana a los antibióticos. Revista de la Facultad de Medicina UNAM, 54(1), 18-27.

EVALUACIÓN DEL ESTADO DE CONSERVACIÓN DEL MURCIÉLAGO *Myotis Peninsularis* (MILLER, 1898) CON BASE EN LOS CRITERIOS DE DISTRIBUCIÓN GEOGRÁFICA DE LA UICN Y LA NOM-059-SEMARNAT

Claudia Ballesteros-Barrera[1], Bárbara Vargas-Miranda[1], Rocío Zárate-Hernández[1], Selene Ortiz-Burgos[2] & Angélica Martínez-Bernal[1]

[1]Universidad Autónoma Metropolitana. Unidad Iztapalapa, División de Ciencias Biológicas y de la Salud. [2]Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México.

bbc7@xanum.uam.mx

RESUMEN

Myotis peninsularis es un murciélago insectívoro de la familia Vespertilionidae, endémico de la región del Cabo en Baja California Sur, México. Se trata de una especie cavernícola y gregaria que puede formar colonias de gran tamaño, con pelaje que oscila entre café oscuro y tonos café amarillentos. A pesar de su relevancia ecológica como controlador de insectos, existe información limitada sobre su distribución precisa y los factores ambientales que determinan su presencia. Con el propósito de aportar elementos para su evaluación, se modeló su nicho ecológico a partir de 21 registros georreferenciados y variables bioclimáticas de WorldClim. El modelo de distribución potencial se desarrolló con MaxEnt 3.4.1 empleando capas climáticas con resolución de 1 km². Para la evaluación del riesgo se utilizó el criterio B de la UICN, estimando la extensión de presencia (EOO = 5,059.84 km²) y el área de ocupación (AOO = 76 celdas de 4 km²) mediante GeoCAT. Asimismo, se aplicó el criterio A de la NOM-059-SEMARNAT-2010, que evalúa la amplitud de distribución nacional. Los registros se concentran en los municipios de Los Cabos (14) y La Paz (7). El perfil bioclimático indica afinidad por ambientes cálidos y semiáridos, con temperatura media anual de 22.58 °C y precipitación de 383.48 mm. El modelo predijo una superficie potencial de 12,787 km², que incluye la Reserva de la Biosfera Sierra La Laguna. La EOO (5.059,84 km²) es ligeramente superior al umbral de 5.000 km² para En Peligro (EN), pero inferior al de 20.000 km² para Vulnerable (VU) bajo el criterio B1. No obstante, el AOO (304 km²) es inferior al umbral de 500 km² para EN bajo el criterio B2, por lo que la especie sí califica como En Peligro (EN) atendiendo al área de ocupación.

INTRODUCCIÓN

El orden Chiroptera agrupa actualmente más de 1,500 especies, cifra que representa aproximadamente una quinta parte de la diversidad mundial de mamíferos (Simmons & Cirranello, 2026). Esta riqueza taxonómica excepcional se acompaña de una diversidad funcional igualmente notable: los quirópteros ocupan prácticamente todos los ecosistemas terrestres del planeta y sostienen procesos ecológicos de primer orden, entre ellos la polinización, la dispersión de semillas, el reciclaje de nutrientes y la regulación natural de poblaciones de artrópodos nocturnos, incluidas especies de importancia agrícola y sanitaria (Kunz et al., 2011; Boyles et al., 2011). Pese a su relevancia, un número importante de especies de este grupo enfrenta riesgos crecientes derivados de la pérdida y fragmentación del hábitat, el desarrollo urbano no planificado y la perturbación directa de sus refugios (Jones. et al., 2009; Frick et al., 2020).

México concentra alrededor de 144 especies pertenecientes a nueve familias, lo que lo sitúa entre los países con mayor diversidad quiropterológica del mundo y representa cerca del 10% de las especies conocidas a nivel global (Sánchez-Cordero et al., 2014). Una proporción significativa de esa riqueza corresponde a taxones de distribución geográfica reducida o endémicos, condición que incrementa su vulnerabilidad ante presiones antrópicas y dificulta la implementación de medidas de conservación efectivas (Purvis et al., 2000; Cardillo et al., 2005; Schipper et al., 2008). La Península de Baja California constituye uno de los escenarios biogeográficos más singulares del país. Su

prolongado aislamiento continental desde el Mioceno impulsó procesos de especiación que derivaron en una elevada concentración de linajes endémicos (Riddle et al., 2000), y la región del Cabo, en su extremo meridional, destaca por condiciones climáticas, topográficas y geológicas que favorecen comunidades biológicas diferenciadas respecto al resto de la península (Joner Jr., 1965; León de la Luz et al., 2000; Morrone, 2019). Esta región ha sido reconocida como área prioritaria para la conservación de la biodiversidad en México (Arriaga & Rodríguez-Estrella, 1997). Sin embargo, el acelerado crecimiento urbano y turístico en los municipios de Los Cabos y La Paz ha transformado significativamente el paisaje, con efectos potenciales sobre la disponibilidad de refugios y áreas de alimentación para las especies que la habitan (Bojórquez Luque & Ángeles Villa, 2014).

Uno de los mamíferos endémicos más representativos de este contexto es *Myotis peninsularis* Miller, 1898, un murciélago insectívoro de la familia Vespertilionidae cuya distribución conocida no rebasa los límites de la región del Cabo (Álvarez-Castañeda & Bogan, 1998). Dentro del género *Myotis* —uno de los más diversos de la familia con representantes en casi todos los continentes (Simmons, 2005; Fenton & Simmons, 2015)— esta especie ocupa una posición biogeográfica y taxonómica particular. Su estatus como especie válida ha sido revisado en repetidas ocasiones: tratada inicialmente como subespecie de *M. velifer* (Miller & Allen, 1928), fue posteriormente restituida como especie plena con base en diferencias de tamaño y aislamiento geográfico (Hayward, 1970), aunque los análisis moleculares y de morfometría geométrica más recientes han vuelto a cuestionar esa distinción al encontrar distancias genéticas y variación craneal más acordes con diferenciación subespecífica (Nájera-Cortazar et al., 2015). Las evaluaciones de conservación vigentes, no obstante, la mantienen como entidad válida y la clasifican como En Peligro (EN) en la Lista Roja de la UICN, señalando su extensión de presencia reducida y el deterioro esperado de su hábitat como factores determinantes (Arroyo-Cabrales & Ospina-Garces, 2016). La NOM-059-SEMARNAT-2010, por su parte, no la incluye en su lista de especies en riesgo, lo que puede reflejar un vacío de información más que ausencia de amenaza real (SEMARNAT, 2010).

A pesar de su relevancia ecológica y de su condición de endemismo estricto, el conocimiento sobre la distribución geográfica precisa de *M. peninsularis*, los factores ambientales que la determinan y su estado de conservación sustentado en evidencia espacial explícita sigue siendo escaso (Álvarez-Castañeda & Bogan, 1998; Ceballos, 2014). Para avanzar en ese sentido, el modelado de nicho ecológico mediante MaxEnt constituye una aproximación metodológica apropiada: ha demostrado un desempeño consistente con conjuntos de registros reducidos y, combinado con los marcos normativos de la UICN y la NOM-059-SEMARNAT-2010, posibilita sustentar con evidencia objetiva las decisiones de gestión y política ambiental (Phillips et al., 2006; Peterson et al., 2011). Con base en lo anterior, el presente trabajo tuvo como objetivos: (1) identificar las variables bioclimáticas de mayor influencia en la distribución geográfica de *M. peninsularis*, (2) generar modelos de distribución potencial a escala de 1 km², y (3) evaluar su estado de conservación mediante los criterios B de la UICN —extensión de presencia y área de ocupación— y el criterio A de la NOM-059-SEMARNAT-2010, referido a la amplitud de distribución nacional.

TEORÍA

El concepto de nicho ecológico, formalizado por Hutchinson (1957) como el conjunto de condiciones ambientales que permiten la supervivencia y reproducción de una especie, constituye la base teórica de los modelos de distribución potencial empleados actualmente en estudios de conservación. Estos modelos relacionan registros de ocurrencia con variables ambientales para identificar áreas geográficas con condiciones adecuadas para un taxon determinado, y resultan particularmente útiles en especies con distribución restringida y escasos registros de campo (Soberón & Peterson, 2005; Peterson et al., 2011). Entre los algoritmos disponibles, MaxEnt estima la distribución de probabilidad más uniforme posible bajo las restricciones impuestas por las variables ambientales en los sitios de presencia, y ha demostrado un desempeño robusto incluso con tamaños de muestra reducidos (Phillips et al., 2006; Hernandez et al., 2006).

Para la evaluación formal del riesgo de extinción, la UICN emplea criterios cuantitativos basados en la extensión de presencia (EOO), estimada mediante el polígono convexo mínimo sobre los registros conocidos, y el área de ocupación (AOO), calculada con celdas de 4 km² (IUCN Standards and Petitions Committee, 2022; Bachman et al., 2011). El criterio B es aplicable cuando la EOO es menor a 20,000 km² o la AOO menor a 2,000 km², siempre que se cumplan condiciones adicionales de fragmentación, disminución continua o fluctuaciones extremas (IUCN, 2012). En el contexto nacional, la NOM-059-SEMARNAT-2010 evalúa la amplitud de distribución en el territorio mexicano como criterio central de vulnerabilidad, clasificando como de distribución muy restringida a las especies cuya área no rebasa el 5% del país o los 50,000 km² (SEMARNAT, 2010).

PARTE EXPERIMENTAL

Obtención y depuración de registros de presencia

Se realizó una revisión sistemática de registros de presencia de la especie a partir de tres fuentes: (1) literatura científica, (2) bases de datos de colecciones biológicas en línea —Global Biodiversity Information Facility (GBIF; http://www.GBIF.org, datos obtenidos el 22 de marzo de 2021; GBIF Occurrence Download: https://doi.org/10.15468/dl.juuqhz)—, y (3) registros de la Colección Mastozoológica del Centro de Investigaciones Biológicas del Noroeste (CIB). Los registros fueron depurados eliminando duplicados espaciales, registros sin información geográfica precisa y aquellos con errores de georeferenciación detectados mediante verificación sobre imágenes de satélite en Google Earth Pro. Las coordenadas finales fueron proyectadas en el sistema de referencia WGS84.

Obtención de datos ambientales y perfil bioclimático

Se emplearon 19 capas bioclimáticas para México en formato ráster (Cuadro 1), con información mensual de temperatura y precipitación para el período 1910–2009 y una resolución espacial de aproximadamente 1 km² (30 segundos de arco; Cuervo-Robayo et al., 2014). El área accesible para la especie (región M) se delimitó con base en criterios biogeográficos siguiendo a Peterson et al. (2011), y las capas fueron recortadas a esta extensión antes del modelado.

El perfil bioclimático se construyó extrayendo los valores de las 19 variables en cada localidad de registro mediante la herramienta Extract by mask del módulo Spatial Analyst de ArcMap 10.4.1 (ESRI, 2016). A partir de los valores obtenidos se calcularon estadísticos descriptivos —promedio, mínimo, máximo y desviación estándar— para caracterizar las condiciones climáticas de los sitios de presencia y aproximar el espacio ecológico en el que la especie puede persistir bajo condiciones naturales (Fischer et al., 2001).

Selección de variables y generación de modelos de distribución potencial

Para reducir la multicolinealidad entre predictores se aplicó un procedimiento de selección en dos etapas: primero, un análisis exploratorio con MaxEnt 3.4.1 mediante la prueba de Jackknife para identificar las variables de mayor contribución al modelo; posteriormente se calculó el coeficiente de correlación de Pearson entre pares de variables, reteniéndose las que presentaron valores de $|r| < 0.70$ (Dormann et al., 2013). Las tres variables que cumplieron ambos criterios y fueron usadas en el modelado final están marcadas con asterisco en el Cuadro 1: BIO3 (isotermalidad), BIO15 (estacionalidad de la precipitación) y BIO18 (precipitación del trimestre más cálido).

Previo al modelado se eliminaron registros duplicados y se aplicó un filtro espacial mediante la herramienta Spatially rarefy occurrence data de SDMToolbox en ArcMap 10.4.1 (Brown, 2014), con una distancia euclidiana mínima de 1 km entre puntos. La partición de datos en entrenamiento (80%) y prueba (20%) se realizó con el paquete ENMeval (Muscarella et al., 2014).

La calibración de MaxEnt se llevó a cabo evaluando cinco tipos de funciones de respuesta (L, LQ, H, LQH, LQHP) combinadas con multiplicadores de regularización de 0.5 a 5.0 en incrementos de 0.5 (Merow et al., 2013). El modelo óptimo (beta = 1.5) se seleccionó con base en el valor de AUC, la tasa de omisión mínima y el valor de ΔAICc más cercano a cero. La contribución de cada variable

se evaluó mediante el análisis de Jackknife. Para obtener el mapa de distribución booleano se empleó la salida cloglog con un umbral del décimo percentil (Pearson et al., 2007). La validación final se realizó mediante el análisis ROC parcial con el programa Tool for Partial-ROC (Narayani, 2008).

Cuadro 1. Perfil bioclimático de *Myotis peninsularis* (n = 21 localidades). Mín = valor mínimo; Max = valor máximo; DE = desviación estándar.

Código	Descripción	Mín.	Máx.	Promedio	DE
BIO1	Temperatura media anual (°C)	17.5	23.7	22.58	1.34
BIO2	Intervalo de temperatura diurna (°C)	12.6	16.9	15.27	1.33
BIO3	Isotermalidad (cociente entre parámetros 2 y 7)	0.50	0.61	0.56	0.03
BIO4	Estacionalidad de la temperatura (coeficiente de variación, %)	1.21	1.57	1.45	0.11
BIO5	Temperatura máxima del mes más cálido (°C)	27.5	37.3	35.74	2.15
BIO6	Temperatura mínima del mes más frío (°C)	5.0	10.4	8.36	1.16
BIO7	Intervalo de temperatura anual (°C) (parámetros 5 y 6)	22.5	29.5	27.38	1.90
BIO8	Temperatura prom. del trimestre más húmedo (°C)	21.5	28.8	27.58	1.62
BIO9	Temperatura prom. del trimestre más seco (°C)	17.2	24.1	22.88	1.62
BIO10	Temperatura prom. del trimestre más cálido (°C)	22.1	29.1	27.93	1.59
BIO11	Temperatura prom. del trimestre más frío (°C)	12.7	18.7	17.19	1.17
BIO12	Precipitación anual (mm)	130	711	383.48	125.80
BIO13	Precipitación del mes más húmedo (mm)	12	72	41.10	13.73
BIO14	Precipitación del mes más seco (mm)	0	0	0.00	0.00
BIO15	Estacionalidad de la precipitación (coeficiente de variación, %)	119	153	143.62	9.11
BIO16	Precipitación del trimestre más húmedo (mm)	84	598	301.05	113.79
BIO17	Precipitación del trimestre más seco (mm)	0	0	0.00	0.00
BIO18	Precipitación del trimestre más cálido (mm)	82	386	235.62	69.50
BIO19	Precipitación del trimestre más frío (mm)	28	58	35.86	6.39

Evaluación del estado de conservación

Para la aplicación del criterio B de la UICN se empleó la herramienta GeoCAT (Bachman et al., 2011). La EOO fue calculada mediante el polígono convexo mínimo sobre todos los registros de presencia, y la AOO fue estimada superponiendo una cuadrícula de celdas de 2 × 2 km² sobre los mismos registros, siguiendo las directrices de la UICN (IUCN Standards and Petitions Committee, 2022). Se evaluaron los subcriterios B1 y B2 junto con las condiciones adicionales: a) número de localidades ≤ 10, b) disminución continua proyectada en extensión u ocupación del hábitat, y c) fluctuaciones extremas en el número de individuos maduros. Para la NOM-059-SEMARNAT-2010, se calculó el valor del criterio A comparando el área modelada con el umbral de 50,000 km² y con la superficie total del territorio mexicano.

RESULTADOS

Registros de presencia y distribución geográfica

La revisión exhaustiva de fuentes bibliográficas y colecciones biológicas permitió obtener 21 localidades únicas de presencia de la especie (Fig. 1), todas ubicadas en el estado de Baja California Sur. Los registros se distribuyen en dos municipios: Los Cabos con 14 localidades (66.7%) y La Paz con 7 localidades (33.3%), lo que coincide con los reportes históricos que sitúan su distribución conocida en la región del Cabo (Álvarez-Castañeda & Bogan, 1998; Nájera-Cortazar et al., 2015). Geográficamente, las localidades se ubican entre los 22°50' y 24°10' de latitud norte y los 109°20' y 110°05' de longitud oeste, confirmando la condición de endemismo estricto de la especie.

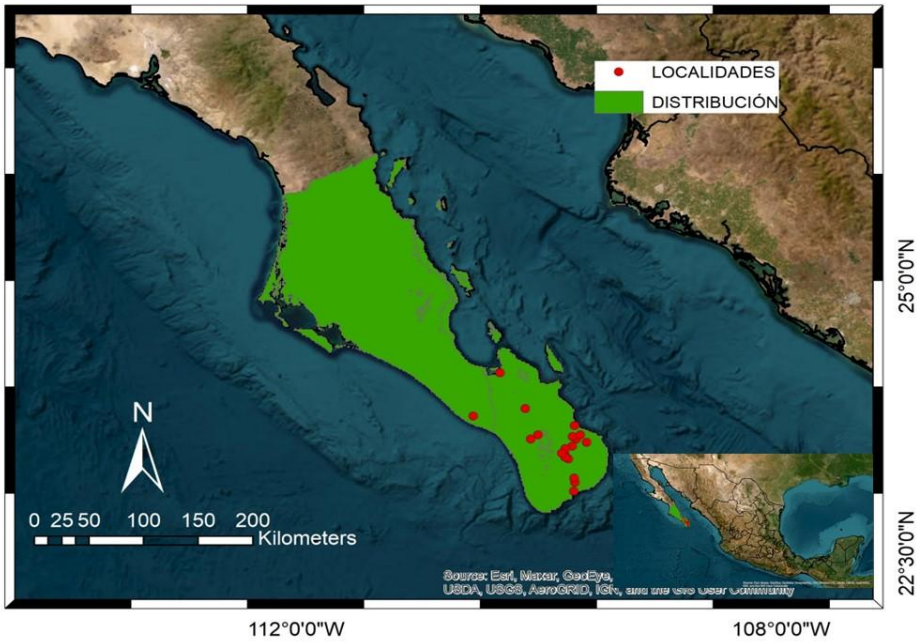


Figura 1. Distribución potencial de *Myotis peninsularis* en Baja California Sur, México, estimada con MaxEnt. El área verde representa la superficie con condiciones ambientales adecuadas (12,787 km²) y los puntos rojos las 21 localidades de presencia utilizadas en el modelado.

Perfil bioclimático

M. peninsularis habita en ambientes cálidos y semiáridos, característicos del tipo climático BSh (árido cálido de Köppen-Geiger) que predomina en la región del Cabo. La temperatura media anual en las localidades de registro fue de 22.58 °C (rango: 17.5–23.7 °C; DE = 1.34), la temperatura máxima del mes más cálido alcanzó en promedio 35.74 °C (rango: 27.5–37.3 °C; DE = 2.15), y el intervalo de temperatura anual fue de 27.38 °C en promedio (rango: 22.5–29.5 °C; DE = 1.90). La precipitación anual promedio fue de 383.48 mm (rango: 130–711 mm; DE = 125.80), con una marcada estacionalidad: el trimestre más seco registró 0 mm en todas las localidades, mientras que el trimestre más húmedo promedió 301.05 mm (rango: 84–598 mm; DE = 113.79). Los resultados completos del perfil bioclimático se presentan en el Cuadro 1.

Modelo de distribución potencial

El modelo MaxEnt mostró un desempeño estadístico alto, con un valor de AUC promedio de 0.94 (DE = 0.02) en los datos de prueba. La tasa de omisión al umbral E10 fue de 0.08, dentro del rango esperado por azar. La variable de mayor contribución al modelo fue la estacionalidad de la precipitación (BIO15, 35.4%), seguida por la isotermalidad (BIO3, 28.2%) y la precipitación del trimestre más cálido (BIO18, 17.6%). El jackknife confirmó que BIO15 es la variable de mayor importancia independiente.

La superficie con condiciones adecuadas proyectada por el modelo (Fig. 1) alcanzó 12,787 km² dentro de Baja California Sur, concentrada principalmente en la vertiente del Pacífico y las sierras interiores de la región del Cabo (Sierra La Laguna y sierras adyacentes). Dentro del área modelada se encuentra la Reserva de la Biosfera Sierra La Laguna, área natural protegida que alberga parte del hábitat potencial de la especie. El modelo no proyectó superficies adecuadas fuera de la Península de Baja California, lo que refuerza la conclusión de endemicidad estricta.

Evaluación del estado de conservación

Según los criterios de la UICN, la EOO calculada fue de 5,059.84 km², valor inferior al umbral de 20,000 km² para Vulnerable (VU) bajo B1 pero superior al umbral de 5,000 km² para EN. Sin embargo, la AOO de 304 km² es inferior al umbral de 500 km² del criterio B2 para EN. La categoría En Peligro (EN) se sustenta por tanto en el criterio B2. El área de ocupación (AOO) fue de 76 celdas de 4 km² (304 km²), inferior al umbral de 500 km² del criterio B2 para EN. Con base en estos valores, *M. peninsularis* califica para la categoría En Peligro (EN) bajo el criterio B de la UICN, resultado consistente con la evaluación oficial de Arroyo-Cabrales & Ospina-Garces (2016). La concentración de todos los registros en una sola región biogeográfica evidencia fragmentación funcional del hábitat disponible, y el desarrollo turístico e inmobiliario acelerado en Los Cabos y La Paz constituye una fuente de disminución continua y proyectada de la calidad del hábitat (condición b del criterio B), lo que complementa los criterios geométricos para sostener la categoría En Bajo el criterio A del Método de Evaluación del Riesgo (MER) de la NOM-059-SEMARNAT-2010, la especie obtuvo la puntuación máxima de 4 puntos, al presentar una distribución en territorio nacional considerada muy restringida: el área modelada (12,787 km²) representa menos del 0.7% de la superficie del país y es considerablemente inferior al umbral de 50,000 km² establecido en la norma. A pesar de ello, la especie no aparece en el listado vigente de la NOM-059-SEMARNAT-2010, lo que probablemente refleja un vacío histórico de información más que la ausencia de riesgo real.

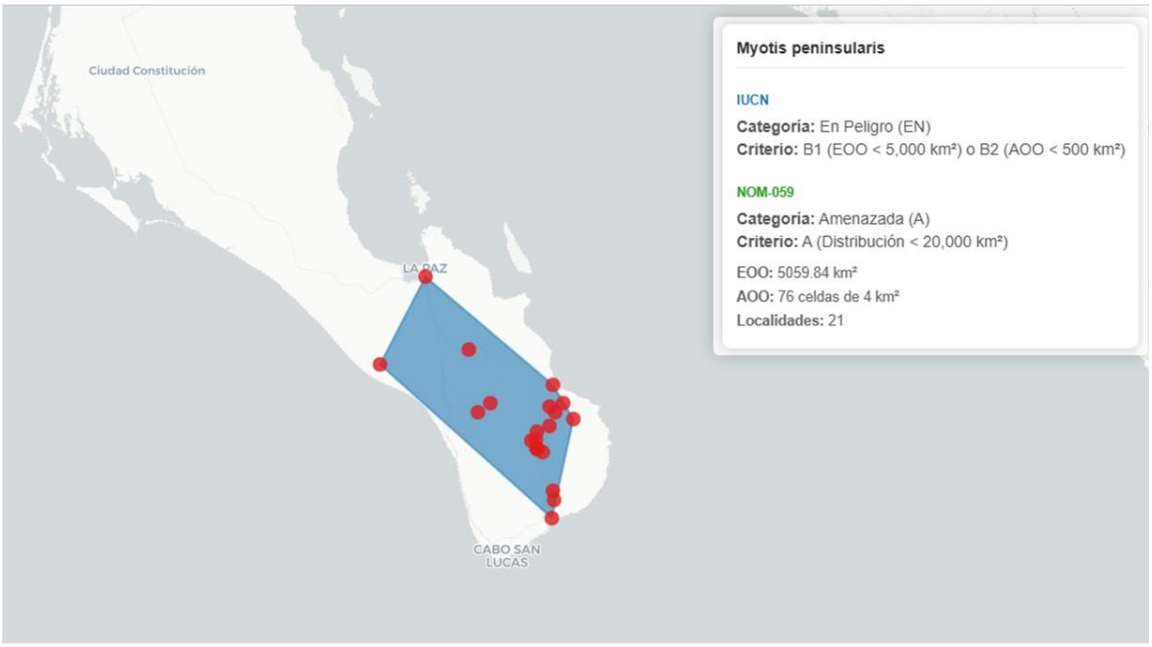


Figura 2. Extensión de presencia (EOO = 5,059.84 km²) y área de ocupación (AOO = 76 celdas de 4 km²) de *Myotis peninsularis* estimadas con GeoCAT a partir de las 21 localidades de presencia en la región del Cabo, Baja California Sur. El polígono azul delimita la EOO calculada mediante el polígono convexo mínimo.

CONCLUSIONES

Myotis peninsularis representa un caso paradigmático de especie endémica vulnerable cuya situación de riesgo ha permanecido subestimada por la falta de información sistemática. Los resultados de este trabajo demuestran que las herramientas de modelado de nicho ecológico, combinadas con marcos normativos de evaluación estandarizados, permiten subsanar esa brecha y generar evidencia objetiva para la toma de decisiones en conservación, incluso en taxa con escasos registros verificados.

La convergencia entre los criterios de la UICN y la NOM-059-SEMARNAT-2010 apunta en la misma dirección: la especie enfrenta un riesgo real derivado no solo de la pequeñez de su rango geográfico (EOO = 5,059.84 km², AOO = 304 km²), sino de la acelerada transformación del único territorio que habita. Su ausencia del listado oficial mexicano de especies en riesgo no refleja seguridad biológica, sino un vacío normativo que este estudio contribuye a evidenciar y que debería corregirse en las próximas actualizaciones de la NOM-059-SEMARNAT-2010.

Más allá de la categoría de riesgo asignada, la conservación efectiva de *M. peninsularis* dependerá de acciones concretas: la protección de sus refugios cavernícolas, la ampliación de la superficie bajo figura de protección en la región del Cabo y el establecimiento de programas de monitoreo poblacional a largo plazo. Sin información continua sobre el tamaño y tendencia de sus colonias, cualquier evaluación futura seguirá siendo incompleta. En ese sentido, este trabajo es un punto de partida, no un diagnóstico definitivo.

BIBLIOGRAFÍA

1. S. T. Álvarez-Castañeda & M. A. Bogan, *Myotis peninsularis*. Mammalian Species, Vol. 573, 1998, pp. 1–2.
2. L. Arriaga & R. Rodríguez-Estrella, *Los oasis de la Península de Baja California",r* (Centro de Investigaciones Biológicas del Noroeste, La Paz, 1997), 237 pp.
3. J. Arroyo-Cabrales & S. Ospina-Garces, *Myotis peninsularis*. The IUCN Red List of Threatened Species, 2016: e.T14189A22066405. doi: 10.2305/IUCN.UK.2016-1.RLTS.T14189A22066405.en
4. S. Bachman, J. Moat, A. W. Hill, J. de la Torre & B. Scott, "Supporting Red List threat assessments with GeoCAT: geospatial conservation assessment tool," ZooKeys, Vol. 150, 2011, pp. 117–126.
5. J. Bojórquez Luque & M. Ángeles Villa, "Expansión turística y acumulación por desposesión: el caso de Cabo San Lucas, Baja California Sur (México)," Cuadernos de Geografía: Revista Colombiana de Geografía, Vol. 23, 2, 2014, pp. 179–202. doi: 10.15446/rcdg.v23n2.43452
6. J. G. Boyles, P. M. Cryan, G. F. McCracken & T. H. Kunz, "Economic importance of bats in agriculture," Science, Vol. 332, 6025, 2011, pp. 41–42.
7. J. L. Brown, "SDMtoolbox: a python-based GIS toolkit for landscape genetic, biogeographic and species distribution model analyses," Methods in Ecology and Evolution, Vol. 5, 7, 2014, pp. 694–700.
8. M. Cardillo, G. M. Mace, K. E. Jones, J. Bielby, O. R. P. Bininda-Emonds, W. Sechrest, C. D. L. Orme & A. Purvis, "Multiple causes of high extinction risk in large mammal species," Science, Vol. 309, 5738, 2005, pp. 1239–1241. doi: 10.1126/science.1116030
9. G. Ceballos (Ed.), *Mammals of Mexico* (Johns Hopkins University Press, Baltimore, 2014).
10. A. P. Cuervo-Robayo, O. Téllez-Valdés, M. A. Gómez-Albores, C. S. Venegas-Barrera, J. Manjarrez & E. Martínez-Meyer, "An update of high-resolution monthly climate surfaces for Mexico," International Journal of Climatology, Vol. 34, 2014, pp. 2427–2437. doi: 10.1002/joc.3848

11. C. F. Dormann, J. Elith, S. Bacher, C. Buchmann, G. Carl, G. Carré, J. R. García-Marquéz, B. Gruber, B. Lafourcade, P. J. Leitão, T. Münkemüller, C. McClean, P. E. Osborne, B. Reineking, B. Schröder, A. K. Skidmore, D. Zurell & S. Lautenbach, "Collinearity: a review of methods to deal with it and a simulation study evaluating their performance," Ecography, Vol. 36, 2013, pp. 27–46. doi: 10.1111/j.1600-0587.2012.07348.x

12. ESRI (Environmental Systems Research Institute), *ArcGIS Desktop: Release 10* (Environmental Systems Research Institute, Redlands, California, 2016).

13. M. B. Fenton & N. B. Simmons, *Bats: A World of Science and Mystery* (University of Chicago Press, Chicago, 2015).

14. J. Fischer, D. B. Lindenmayer, H. A. Nix, J. L. Stein & J. A. Stein, "Climate and animal distribution: a climatic analysis of the Australian marsupial *Trichosurus caninus*," Journal of Biogeography, Vol. 28, 2001, pp. 293–304.

15. W. F. Frick, T. Kingston & J. Flanders, "A review of the major threats and challenges to global bat conservation," Annals of the New York Academy of Sciences, Vol. 1469, 1, 2020, pp. 5–25. doi: 10.1111/nyas.14045

16. B. J. Hayward, "The natural history of the cave bat *Myotis velifer*," Western New Mexico University Research in Science, Vol. 1, 1970, pp. 1–74.

17. P. A. Hernandez, C. H. Graham, L. L. Master & D. L. Albert, "The effect of sample size and species characteristics on performance of different species distribution modeling methods," Ecography, Vol. 29, 5, 2006, pp. 773–785.

18. G. E. Hutchinson, "Concluding remarks," Cold Spring Harbor Symposia on Quantitative Biology, Vol. 22, 1957, pp. 415–427.

19. IUCN, *IUCN Red List Categories and Criteria: Version 3.1*, 2a ed. (IUCN, Gland y Cambridge, 2012).

20. IUCN Standards and Petitions Committee, *Guidelines for Using the IUCN Red List Categories and Criteria. Version 15.1* (IUCN, 2022). https://www.iucnredlist.org/documents/RedListGuidelines.pdf

21. G. Jones, D. Jacobs, T. Kunz, M. Willig & P. Racey, "*Carpe noctem:* the importance of bats as bioindicators," Endangered Species Research, Vol. 8, 2009, pp. 93–115. doi: 10.3354/esr00182

22. J. K. Jones Jr., J. D. Smith & T. Alvarez, "Notes on the bats of the Cape Region of Baja California," Transactions of the San Diego Society of Natural History, Vol. 14, 1965, pp. 53–56.

23. T. H. Kunz, E. Braun de Torrez, D. Bauer, T. Lobova & T. H. Fleming, "Ecosystem services provided by bats," Annals of the New York Academy of Sciences, Vol. 1223, 2011, pp. 1–38.

24. J. L. León de la Luz, J. J. Pérez-Navarro & A. Breceda, "A transitional xerophilous forest of the Cape Region, Baja California Sur, Mexico," Journal of Vegetation Science, Vol. 11, 4, 2000, pp. 555–564. doi: 10.2307/3246589

25. C. Merow, M. J. Smith & J. A. Silander, "A practical guide to MaxEnt for modeling species' distributions: what it does, and why inputs and settings matter," Ecography, Vol. 36, 2013, pp. 1058–1069. doi: 10.1111/j.1600-0587.2013.07872.x

26. G. S. Miller, "Description of a new bat from Lower California," Annals and Magazine of Natural History, Series 7, Vol. 2, 1898, pp. 124–125.

27. G. S. Miller & G. M. Allen, "The American bats of the genus *Myotis* and *Pizonyx*," Bulletin of the United States National Museum, Vol. 144, 1928, pp. 1–218.

28. J. J. Morrone, "Regionalización biogeográfica y evolución biótica de México: encrucijada de la biodiversidad del Nuevo Mundo," Revista Mexicana de Biodiversidad, Vol. 90, 2019, e902980. doi: 10.22201/ib.20078706e.2019.90.2980

29. R. Muscarella, P. J. Galante, M. Soley-Guardia, R. A. Boria, J. M. Kass, M. Uriarte & R. P. Anderson, "ENMeval: An R package for conducting spatially independent evaluations and estimating optimal model complexity for Maxent ecological niche models," Methods in Ecology and Evolution, Vol. 5, 11, 2014, pp. 1198–1205.

30. L. A. Nájera-Cortazar, S. T. Álvarez-Castañeda & E. De Luna, "An analysis of *Myotis peninsularis* (Vespertilionidae) blending morphometric and genetic datasets," Acta Chiropterologica, Vol. 17, 1, 2015, pp. 37–47.

31. B. Narayani, *Tool for Partial-ROC (ver. 1.0)* (Biodiversity Institute, University of Kansas, Lawrence, Kansas, 2008).

32. R. G. Pearson, C. J. Raxworthy, M. Nakamura & A. T. Peterson, "Predicting species distributions from small numbers of occurrence records: a test case using cryptic geckos in Madagascar," Journal of Biogeography, Vol. 34, 2007, pp. 102–117. doi: 10.1111/j.1365-2699.2006.01594.x

33. A. T. Peterson, J. Soberón, R. G. Pearson, R. P. Anderson, E. Martínez-Meyer, M. Nakamura & M. B. Araújo, *Ecological Niches and Geographic Distributions* (Princeton University Press, Princeton, 2011).

34. S. J. Phillips, R. P. Anderson & R. E. Schapire, "Maximum entropy modeling of species geographic distributions," Ecological Modelling, Vol. 190, 3–4, 2006, pp. 231–259.

35. A. Purvis, J. L. Gittleman, G. Cowlishaw & G. M. Mace, "Predicting extinction risk in declining species," Proceedings of the Royal Society B: Biological Sciences, Vol. 267, 1456, 2000, pp. 1947–1952. doi: 10.1098/rspb.2000.1234

36. B. R. Riddle, D. J. Hafner, L. F. Alexander & J. R. Jaeger, "Cryptic vicariance in the historical assembly of a Baja California Peninsular Desert biota," Proceedings of the National Academy of Sciences, Vol. 97, 26, 2000, pp. 14438–14443.

37. V. Sánchez-Cordero, F. Botello, J. J. Flores-Martínez, R. A. Gómez-Rodríguez, L. Guevara, G. Gutiérrez-Granados & Á. Rodríguez-Moreno, "Biodiversidad de Chordata (Mammalia) en México," Revista Mexicana de Biodiversidad, Vol. 85, supl., 2014, pp. 496–504. doi: 10.7550/rmb.31688

38. J. Schipper, J. S. Chanson, F. Chiozza, N. A. Cox, M. Hoffmann, V. Katariya, J. Lamoreux, A. S. L. Rodrigues, S. N. Stuart, H. J. Temple [...] & B. E. Young, "The status of the world's land and marine mammals: diversity, threat, and knowledge," Science, Vol. 322, 5899, 2008, pp. 225–230. doi: 10.1126/science.1165115

39. SEMARNAT, "Norma Oficial Mexicana NOM-059-SEMARNAT-2010. Protección ambiental — Especies nativas de México de flora y fauna silvestres — Categorías de riesgo y especificaciones para su inclusión, exclusión o cambio — Lista de especies en riesgo," Diario Oficial de la Federación, 30 de diciembre de 2010.

40. N. B. Simmons, "Order Chiroptera," en *Mammals of the World: A Taxonomic and Geographic Reference*, 3a ed. (D. E. Wilson & D. M. Reeder, eds.; Johns Hopkins University Press, Baltimore, 2005), pp. 312–529.

41. N. B. Simmons & A. L. Cirranello, *Bat Species of the World: A Taxonomic and Geographic Database*. Versión 1.10. Consultado el 02 de junio de 2026. https://batnames.org

42. J. Soberón & A. T. Peterson, "Interpretation of models of fundamental ecological niches and species' distributional areas," Biodiversity Informatics, Vol. 2, 2005, pp. 1–10.

EFECTO DE LAS CONDICIONES AMBIENTALES SOBRE LA CAPTURA DE INSECTOS ASOCIADOS A LA MADERA DE LOS TEMPLOS DE SANTIAGO UNDAMEO Y SAN JERÓNIMO PURENCHÉCUARO, MICHOACÁN 2026

Eva Kikey Cardenas Barajas[1], Jorge Enrique Ambriz Parra[1], César Marco Aurelio Jurado Vargas[2]

[1]Facultad de Ingeniería en Tecnología de la Madera (UMSNH), [2]Facultad de Biología (UMSNH).
1312656f@umich.mx

RESUMEN

Los insectos constituyen el grupo más diverso de organismos en la Tierra y desempeñan un papel importante en el deterioro de materiales como la madera. Entre los factores que influyen en su actividad y abundancia destacan la temperatura y la humedad relativa, las cuales condicionan su desarrollo, reproducción y supervivencia, particularmente en ambientes cerrados como los templos. El muestreo se realizó de junio a septiembre de 2025 en los templos de San Jerónimo Purenchécuaro y Santiago Undameo, Michoacán. En cada sitio se instalaron dos trampas de luz, una en la zona del coro y otra en la parte posterior del retablo, efectuando seis colectas por templo. En cada colecta se registraron variables ambientales como temperatura y humedad relativa. El material recolectado fue identificado a nivel de familia en el Laboratorio de Investigación de Invertebrados de la Facultad de Biología, UMSNH, y se cuantificó el número de individuos por trampa. Se observará una mayor abundancia de insectos en el templo de San Jerónimo Purenchécuaro en comparación con el templo de Santiago Undameo, así como una mayor captura en las trampas ubicadas en la zona del coro. En ambos templos predominó la familia *Ptinidae* sobre el resto de las familias identificadas. La abundancia de insectos mostró variaciones a lo largo del período de muestreo, con un incremento notable durante el mes de julio, coincidente con condiciones de mayor temperatura y humedad relativa. Los resultados evidencian la influencia de las condiciones ambientales en la abundancia de insectos asociados a la madera, lo que resalta la importancia de considerar estos factores en la implementación de estrategias para la conservación de estructuras de madera en templos históricos.

INTRODUCCIÓN

El grupo de los insectos es por mucho el más diverso entre los seres vivos habitantes de la Tierra donde más de la mitad (54%) de todas las especies de organismos conocidos y el 75% de todas las especies de animales son insectos (Zumbado-Arrieta y Azofeifa-Jiménez, 2018). En este grupo encontramos familias que participan en el deterioro de materiales como la madera.

Dentro del grupo de los insectos encontramos a los llamados xilófagos, estos son definidos como aquellos que se alimentan de la madera, se agrupan en distintas familias en las que se encuentra un gran número de especies, capaces de atacar madera viva, recién cortada, seca, en descomposición, en bruto y/o elaborada (Ripa *et a*l., 2004), los cuales al seguir su curso natural de alimentación y de anidación, causan deterioro en la madera en uso dañando: vigas, marcos, puertas, ventanas, techo, pisos de madera y arte sacro; lo cual acorta significativamente la vida útil de este material (Yela,1997).

Entre los factores que influyen en la actividad y abundancia de los insectos destacan la temperatura y la humedad relativa, las cuales condicionan su desarrollo, reproducción y supervivencia, particularmente en ambientes cerrados como los templos de madera.

Para el estado de Michoacán Jurado-Vargas (2003, 2020) ha realizado estudios previos de insectos en edificios históricos donde ha reconocido la familia *Ptinidae* del orden coleóptera y la familia *Kalotermitidae* del orden Isóptera como las principales causantes del deterioro de la madera en templos.

La madera es el material natural más antiguo utilizado en la construcción, generalmente esta se ve afectada en forma negativa por la exposición a condiciones ambientales como son la temperatura, lluvia, viento, humedad, luz, además del ataque de organismos que la utilizan como alimento, sustrato de protección o medio para completar su ciclo reproductivo (Sáez, 2002).

Las construcciones históricas simbolizan la identidad nacional de un país (Carrasco *et al*.,2009), en el estado de Michoacán contamos con un gran acervo cultural por lo que es muy importante realizar estudios sobre los grupos causantes del deterioro en los elementos de madera.

PARTE EXPERIMENTAL

El trabajo de campo se realizó en el mes de julio del año 2025 en 2 edificios históricos del estado de Michoacán los cuales fueron el templo de San Jerónimo Purenchécuaro municipio de Quiroga y el templo de Santiago Undameo perteneciente al municipio de Morelia (Figura 1).



Figura 1. Localización geográfica de los sitios de estudio

En los sitios de estudio se colocaron dos trampas de luz blancas como las que se muestran en la Figura 2, estas se situaron en la techumbre de los edificios históricos donde se observó presencia de los insectos encargados de causar deterioro en la madera.



Figura 2. Trampa de Luz blanca

Las muestras fueron recolectadas en frascos con alcohol al 80% con revisiones cada dos semanas y los frascos con el material biológico fueron etiquetados con los datos de la localidad, fecha de colecta, colector y el método de colecta para su posterior traslado al Laboratorio de Investigación en Invertebrados de la Facultad de Biología perteneciente a la UMSNH.

El trabajo de laboratorio consistió en separar el material previamente colectado en campo y con ayuda de un microscopio se realizó la identificación mediante claves taxonómicas como fueron las de Borror y De Long (1987), las claves de Phillips (2000), White (1983) y Arango y Caballero (2012) además se consultaron libros como el Atlas de los escarabajos de México de Morón *et al*., 1997; escarabajos del estado de Guerrero de Deloya y Covarrubias, 2014.

Se elaboró una base de datos en una hoja en cálculo en el programa EXCEL con los datos básicos como son: estado, municipio, localidad, sitio de colecta, fecha de colecta, método de colecta, colector y número de organismos para calcular la abundancia de las especies.

En cada colecta se registraron variables ambientales como temperatura y humedad relativa con ayuda de un Higrómetro como el que se muestra en la Figura 3 y los datos fueron registrados en una libreta de campo para su posterior análisis en una base de datos EXCEL.



Figura 3. Higrómetro

RESULTADOS

Se observó una mayor abundancia de insectos en el templo de San Jerónimo Purenchécuaro en comparación con el templo de Santiago Undameo y una mayor captura en las trampas ubicadas en las zonas del coro en ambos sitios.

Se identificaron para el templo de San Jerónimo Purenchécuaro 1408 insectos pertenecientes a 7 familias: *Cerambycidae, Cleridae, Culicidae, Elateridae, Forficulidae, Kalotermitidae* y *Ptinidae*. La familia *Ptinidae* fue la que presentó la mayor abundancia de individuos colectados con 1303 insectos, seguido por la familia *Cleridae* con 32 individuos, la familia *Kalotermitidae* con 30 reproductores alados colectados, de la familia *Elateridae* con 18 individuos, 10 para la familia *Culicidae* y las familias que presentaron la menor abundancia fueron *Forficulidae* con 8 individuos y Cerambycidae con 7. De las familias identificadas en este sitio, 3 de ellas son consideradas de interés al ser clasificadas como xilófagas: *Cerambycidae*, *Kalotermitidae* y *Ptinidae*.

Para el templo de Santiago Undameo se identificaron 218 insectos pertenecientes a 4 familias: *Cleridae, Culicidae, Kalotermitidae* y *Ptinidae*.

De las cuales la que presentó la mayor abundancia fue la *Ptinidae* con 170 individuos, seguido por la familia *Cleridae* con 30 individuos colectados, la familia *Culicidae* con 16 individuos y la que presento el menor número de individuos fue la familia *Kalotermitidae* con 2 reproductores alados. En ambos sitios coincide con los trabajos previos de Jurado-Vargas (2003;2020) donde para edificios históricos de Michoacán registra la mayor abundancia de la familia *Ptinidae* en los templos de Arocutín, Nocutzepo, Tacícuaro y Ucareo.

Para la familia *Kalotermitidae* Hernandez-Calderon (2023) reportó únicamente dos reproductores alados colectados en el templo de Tupátaro, lo que coincide con los resultados de esta familia en el sitio de Santiago Undameo.

En el mes de julio se registraron los valores más elevados de temperatura para los dos sitios de estudio como se muestra en la Fig. 4 lo cual coincidió con que se registraron los números mas altos de insectos en las trampas de luz blancas

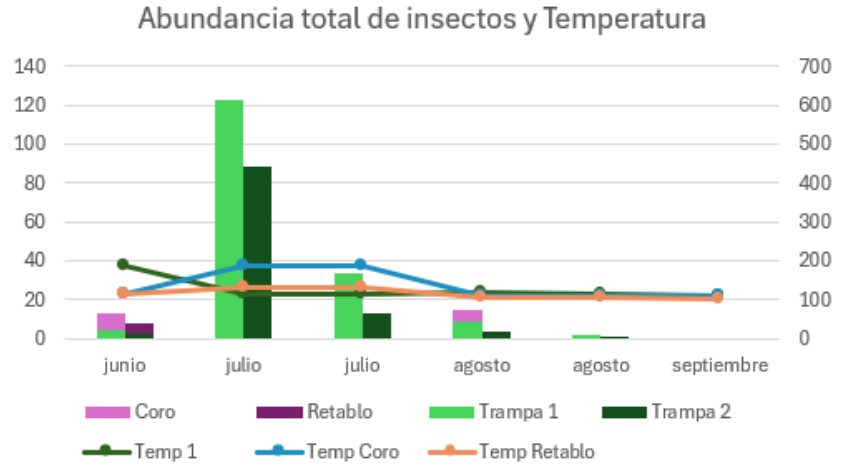


Figura 4. Abundancia total de insectos y temperatura para los dos sitios de estudio

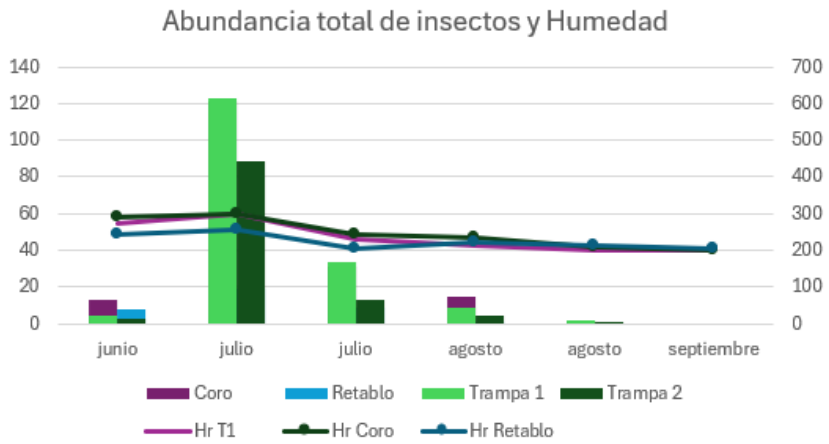


Figura 5. Abundancia de insectos y humedad relativa para los dos sitios de estudio

De igual manera en el mes de julio se registraron los valores más altos de humedad relativa lo que coincidió con el mayor número de insectos colectados en las trampas de luz blanca como se muestra en la Fig.5.

Diversos estudios han demostrado que las condiciones ambientales, principalmente la temperatura y la humedad relativa influyen significativamente en la fenología de las familias coincidiendo con los periodos de emergencia. Guo y Yuchuan (2010) obtuvieron resultados similares donde encontraron que los números de emergencia de insectos fue mayor en las condiciones de temperatura y humedad relativa mas altas.

CONCLUSIONES

En ambos templos predominó la familia *Ptinidae* sobre el resto de las familias identificadas y se observó que existe una relación entre los valores más altos registrados de temperatura y la humedad relativa con la mayor captura de insectos por trampas de luz blanca ya que influye directamente en sus procesos fisiológicos, lo que resalta la importancia de considerar estos factores en la implementación de estrategias para la conservación de estructuras de madera en templos históricos.

BIBLIOGRAFÍA

1. Carrasco, E. V. M., Teixeira, A. R., Azevedo, A. P., y Moreira, L. E. 2009. Metodología para análisis de la integridad de estructuras históricas de madera atacadas por insectos xilófagos por medio del ultrasonido. Revista Forestal Mesoamericana Kurú, 6(16), 17-25.
2. Guo, S., & Qin, Y. 2010. Effects of temperature and humidity on emergence dynamics of Plutella xylostella (Lepidoptera: Plutellidae). Journal of Economic Entomology, 103(6).
3. Hernandez-Calderon, D. Y. 2023. Insectos xilófagos en tres edificios históricos de Michoacán. Tesis de Licenciatura. UMSNH. 76 pp.
4. Jurado, V.C.M.A. 2003. Insectos que deterioran la madera de dos monumentos históricos de la Ribera Oeste del lago de Pátzcuaro Michoacán, México. Tesis de Maestría. FICTEMA.UMSNH. Morelia, Mich. 85 pp.
5. Jurado, V.C.M.A. 2020. Incidencia y daño de insectos en la techumbre de madera de cinco edificios históricos (Templos) de Michoacán. Tesis de Doctorado. FITECMA. UMSNH. Morelia. 233 pp.

6. Ripa, R., Luppichini, P., Krecek, J., Lenz, M., y Creffield, J. W. 2004. Termitas y otros insectos xilófagos en Chile: especies, biología y manejo. Instituto de Investigaciones Agropecuarias, INIA. Santiago, Chile, 147 pp.
7. Sáez Patricio. 2002. Coleópteros xilófagos asociados a la madera en el sector urbano de la comuna de padre la casas, IX Región de la Araucaria. Tesis ingeniero forestal. Universidad de la frontera. Facultad de ciencias agropecuarias y forestales, Temuco, Chile. 54 pp.
8. Yela, J. L. 1997. Insectos causantes de daños al patrimonio histórico y cultural: caracterización, tipos de daño y métodos de lucha (Arthropoda: Insecta). Bol. Sociedad Entom. Aragonesa, 20, 111-122.
9. Zumbado Arrieta, M y Azofeifa Jiménez, D. 2018. Insectos de importancia agrícola. Guía Básica de Entomología. Programa Nacional de Agricultura Orgánica (PNAO). 204 pp.

XEROGELES DE SÍLICE DOPADOS CON NANOPARTÍCULAS DE ALUMINIO PARA LA ADSORCIÓN DE ANIONES TÓXICOS PRESENTES EN SOLUCIÓN ACUOSA

Guillermo Andrade Espinosa, Claudia Palomares Rodríguez, Alberto Millán Montañez, Carmen Cecilia García Castillo, María Linda Herrera Herrera, Venus Andrea Espino Macswiney, Cathleen Daiana García Castañeda

Tecnológico Nacional de México / Instituto Tecnológico del Valle de Morelia
guillermo.ae@vmorelia.tecnm.mx

RESUMEN

Existe una extensa preocupación por la presencia de Fluoruros en el agua para consumo humano, debido a que al ingerirlo en concentración alta que sobrepasen los límites permisibles como lo establece la OMS que es de 0.5-1.5 mg/L ocasiona severos problemas en la población, ya que una parte es adsorbida por los tejidos del cuerpo y depositada en los huesos y dientes principalmente, ocasionando enfermedades como; fluorosis dental, esquelética, parálisis /invalides, en casos extremos, la muerte. Es por ello que en esta investigación se estudió la eliminación de fluoruros en agua mediante xerogeles de sílice impregnados de nanopartículas de AlCl3. Los xerogeles fueron caracterizados mediante titulaciones ácido/base, PCC, se determinó la distribución de carga del material mediante equilibrio de pH y se investigó el efecto del pH sobre la capacidad de adsorción de los fluoruros en adsorbedores por lotes, así como cinética de adsorción para determinar el decaimiento de concentración con respecto al tiempo. Los resultados muestran un incremento en las densidades de sitios funcionales tanto ácidos como básicos que van desde 0.22 – 0.51 mmol/g y 0.73 – 4.16 mmol/g respectivamente. Para el punto de carga cero (PCC) existió un aumento en el pH de 4.35 – 6.99. Para los experimentos de adsorción se obtuvo que a manera que disminuye el pH favorece a una máxima capacidad de adsorción de 27.1 mg/g en concentraciones en el equilibrio de 150 ppm a 25 °C, para las isotermas de adsorción se obtuvo que menor cantidad de la masa adsorbente favorecerá a la remoción de fluoruros teniendo resultados de 600 mg/g en concentraciones iniciales de 300 ppm con 5mg de XG1M aunpHde3y25°C. El modelo de la isoterma de Langmuir fue el que presentó el mejor ajuste indicando una adsorción homogénea y la formación de una monocapa en la superficie del material. Finalmente, los experimentos de cinética mostraron una disminución del 51% durante las primeras 4 y 18 h

INTRODUCCIÓN

El agua es uno de los recursos naturales más importantes para el desarrollo de la vida y para el funcionamiento de las actividades humanas, industriales y agrícolas. Sin embargo, el incremento de la contaminación de los cuerpos de agua ha generado una problemática ambiental y sanitaria de gran relevancia a nivel mundial. Entre los diversos contaminantes presentes en los sistemas acuáticos, los fluoruros han adquirido especial interés debido a los efectos adversos que pueden ocasionar en la salud humana cuando se encuentran en concentraciones superiores a los límites recomendados para consumo humano.

El flúor es un elemento químico altamente reactivo que generalmente se encuentra en la naturaleza formando compuestos denominados fluoruros. Estos pueden incorporarse al agua de manera natural mediante procesos geológicos asociados a la disolución de minerales presentes en rocas volcánicas, así como por actividades antropogénicas relacionadas con procesos industriales, agrícolas y mineros. Aunque en bajas concentraciones el fluoruro puede contribuir al fortalecimiento del esmalte dental, concentraciones elevadas representan un riesgo significativo para la salud pública.

De acuerdo con la Organización Mundial de la Salud (OMS), la concentración de fluoruro en agua destinada al consumo humano debe mantenerse dentro de un intervalo de 0.5 a 1.5 mg/L. Cuando

estos valores son excedidos y existe una exposición prolongada, el fluoruro puede acumularse progresivamente en tejidos calcificados del organismo, principalmente en dientes y huesos. Esta acumulación puede ocasionar alteraciones fisiológicas que derivan en enfermedades como fluorosis dental, fluorosis esquelética, deformaciones óseas, limitación de la movilidad, parálisis e incluso la muerte en casos severos.

La problemática asociada a los fluoruros representa un desafío importante en diversos países. En México, numerosas regiones presentan concentraciones elevadas de fluoruro en aguas subterráneas debido a las características geológicas del territorio. Particularmente, en estados con actividad volcánica histórica se han identificado acuíferos con concentraciones superiores a los límites establecidos para consumo humano. Esta situación ha impulsado el desarrollo de investigaciones enfocadas en la búsqueda de tecnologías eficientes para la remoción de fluoruros presentes en solución acuosa.

Actualmente existen diversos métodos para la eliminación de fluoruros del agua, entre los que destacan la precipitación química, la coagulación-floculación, los procesos de membrana, el intercambio iónico y la adsorción. Entre estas alternativas, la adsorción ha despertado un interés considerable debido a su simplicidad operativa, alta eficiencia, facilidad de implementación y menor costo en comparación con otros tratamientos convencionales. La eficiencia de este proceso depende en gran medida de las propiedades fisicoquímicas del material adsorbente, por lo que el desarrollo de nuevos materiales constituye una línea de investigación de gran relevancia.

En este contexto, los xerogeles de sílice han surgido como materiales prometedores para aplicaciones de adsorción debido a sus características estructurales y superficiales. Los xerogeles son materiales porosos obtenidos comúnmente mediante el método Sol-Gel, una técnica que permite controlar la estructura, composición química y propiedades superficiales del material final. Entre sus principales ventajas se encuentran su elevada área superficial, alta porosidad, estabilidad química y facilidad para ser modificados mediante la incorporación de diferentes especies químicas que incrementan su capacidad de interacción con contaminantes presentes en medios acuosos.

La modificación superficial de los xerogeles mediante la incorporación de nanopartículas metálicas representa una estrategia efectiva para mejorar sus propiedades adsorbentes. La presencia de especies de aluminio y titanio puede favorecer la generación de nuevos sitios activos sobre la superficie del material, incrementando la afinidad por aniones presentes en solución. Como consecuencia, es posible mejorar significativamente la capacidad de adsorción y la eficiencia de remoción de contaminantes como los fluoruros.

Dentro de los parámetros más importantes que influyen en los procesos de adsorción se encuentran la densidad de sitios funcionales superficiales, el punto de carga cero (PCC), el pH de la solución, la concentración inicial del contaminante y el tiempo de contacto. Estos factores determinan la interacción entre el adsorbente y el adsorbato, afectando directamente la capacidad de remoción alcanzada durante el proceso. Por ello, la caracterización adecuada de los materiales adsorbentes constituye una etapa fundamental para comprender los mecanismos involucrados en la eliminación de fluoruros.

En la presente investigación se estudió la síntesis y caracterización de xerogeles de sílice modificados con nanopartículas inorgánicas, así como su aplicación en la adsorción de fluoruros presentes en solución acuosa. Se evaluaron las propiedades superficiales de los materiales mediante la determinación de sitios funcionales ácidos y básicos, además de la medición del punto de carga cero. Asimismo, se analizó el efecto del pH sobre la capacidad de adsorción y se realizaron estudios de equilibrio y cinética con la finalidad de determinar el comportamiento del sistema durante el proceso de remoción.

Los resultados obtenidos permiten evaluar el potencial de estos materiales como adsorbentes para el tratamiento de aguas contaminadas con fluoruros y aportan información relevante para el

desarrollo de tecnologías sustentables orientadas a la mejora de la calidad del agua destinada al consumo humano.

TEORÍA

Fluoruros en sistemas acuosos

El flúor es el elemento más electronegativo de la tabla periódica y, debido a su elevada reactividad, rara vez se encuentra en estado libre en la naturaleza. Generalmente se presenta formando compuestos denominados fluoruros, los cuales pueden encontrarse en minerales, suelos, rocas y cuerpos de agua. La presencia de fluoruro en aguas naturales está asociada principalmente a procesos geológicos relacionados con la disolución de minerales que contienen este elemento, aunque también puede provenir de actividades industriales y agrícolas.

En concentraciones adecuadas, el fluoruro puede proporcionar beneficios para la salud dental, ya que favorece la mineralización del esmalte y ayuda a prevenir la aparición de caries. Sin embargo, cuando su concentración excede los límites recomendados para consumo humano, puede convertirse en un contaminante de alto impacto sanitario.

La Organización Mundial de la Salud establece que la concentración de fluoruro en agua potable debe mantenerse entre 0.5 y 1.5 mg/L. Valores superiores a este intervalo pueden provocar efectos tóxicos debido a la acumulación progresiva del fluoruro en tejidos calcificados. Una vez ingerido, parte del fluoruro es absorbido por el organismo y transportado mediante el torrente sanguíneo hacia huesos y dientes, donde puede permanecer durante largos periodos de tiempo.

Entre las principales enfermedades asociadas a la exposición prolongada a concentraciones elevadas de fluoruro se encuentra la fluorosis dental, caracterizada por la aparición de manchas blancas, amarillas o marrones en el esmalte dental. En casos más severos pueden presentarse fracturas, desgaste excesivo y alteraciones estructurales de las piezas dentales. Asimismo, la acumulación continua de fluoruro en los huesos puede generar fluorosis esquelética, enfermedad que ocasiona rigidez articular, dolor crónico, deformaciones óseas y reducción de la movilidad.

La problemática de los fluoruros representa un desafío importante para diversos países, especialmente aquellos con regiones volcánicas o con acuíferos naturalmente enriquecidos con este elemento. En México se han reportado numerosas zonas con concentraciones elevadas de fluoruro en aguas subterráneas, situación que ha impulsado el desarrollo de investigaciones orientadas a la búsqueda de tecnologías eficientes para su remoción.

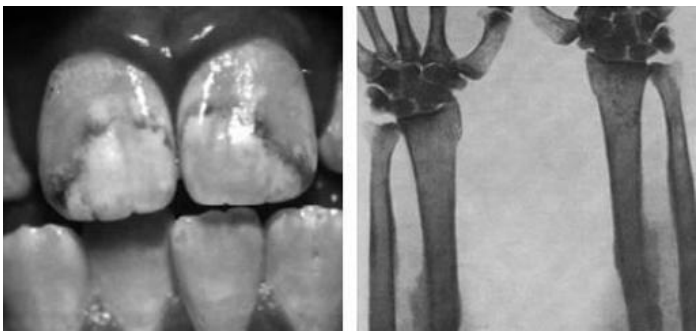


Figura 1. Efectos de la exposición prolongada a altas concentraciones de fluoruro en la salud humana (fluorosis dental y fluorosis esquelética).

Adsorción como tecnología de tratamiento de agua

La adsorción es uno de los métodos más utilizados para la eliminación de contaminantes presentes en soluciones acuosas. Este proceso consiste en la acumulación de moléculas, átomos o iones sobre la superficie de un material sólido denominado adsorbente. La especie que es retenida recibe el nombre de adsorbato.

La eficiencia de la adsorción depende de múltiples factores, entre ellos la naturaleza química del adsorbente, el área superficial disponible, la distribución de poros, la concentración del contaminante, el tiempo de contacto y las condiciones de operación, particularmente el pH y la temperatura.

Entre las principales ventajas de la adsorción destacan su facilidad de operación, bajo costo relativo, elevada eficiencia y posibilidad de regeneración de algunos materiales adsorbentes. Estas características han favorecido su aplicación en el tratamiento de aguas contaminadas con metales pesados, colorantes, compuestos orgánicos y aniones tóxicos como los fluoruros.

Los procesos de adsorción pueden clasificarse en dos categorías principales: fisisorción y quimisorción. La fisisorción ocurre mediante fuerzas intermoleculares relativamente débiles, tales como fuerzas de Van der Waals, mientras que la quimisorción implica la formación de enlaces químicos entre el adsorbato y la superficie del adsorbente. En muchos sistemas de remoción de fluoruros pueden coexistir ambos mecanismos dependiendo de las características del material utilizado.

Debido a su versatilidad, la adsorción continúa siendo una de las alternativas más prometedoras para el desarrollo de tecnologías destinadas al tratamiento y purificación del agua.

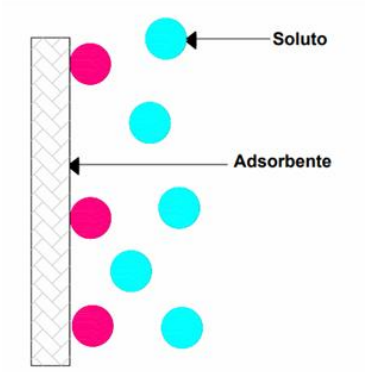


Figura 2. Esquema general del proceso de adsorción (Levy, 2016)

Xerogeles de sílice

Los xerogeles son materiales sólidos altamente porosos obtenidos a partir de procesos de gelificación y secado controlado. Dentro de esta categoría, los xerogeles de sílice han despertado un gran interés debido a sus propiedades fisicoquímicas, las cuales los convierten en materiales adecuados para aplicaciones ambientales, catalíticas y de separación.

Entre las principales características de los xerogeles de sílice se encuentran su elevada área superficial específica, gran volumen de poros, estabilidad química y facilidad para modificar su superficie mediante procesos de funcionalización. Estas propiedades permiten incrementar la cantidad de sitios activos disponibles para la interacción con diversas especies químicas presentes en solución.

La estructura porosa de los xerogeles favorece el transporte de masa y la difusión de los contaminantes hacia el interior del material, aumentando la probabilidad de interacción con los sitios adsorbentes. Como resultado, estos materiales pueden presentar elevadas capacidades de adsorción para diversos compuestos de interés ambiental.

Una de las ventajas más importantes de los xerogeles es la posibilidad de incorporar especies metálicas o nanopartículas durante o después de su síntesis. Esta modificación permite alterar sus propiedades superficiales y generar nuevos centros activos que incrementan la afinidad por determinados contaminantes. En el caso de la remoción de fluoruros, la incorporación de especies de aluminio y titanio puede favorecer significativamente la interacción entre el adsorbente y los aniones fluoruro.

Método Sol-Gel

La síntesis de xerogeles de sílice se realiza comúnmente mediante la técnica Sol-Gel, una metodología ampliamente utilizada para la obtención de materiales porosos con propiedades controladas.

El proceso inicia con la formación de una suspensión coloidal denominada "sol", la cual contiene especies precursoras capaces de reaccionar entre sí para formar una red tridimensional. A través de reacciones de hidrólisis y condensación, las partículas presentes en el sol comienzan a unirse progresivamente hasta formar una estructura sólida continua conocida como gel.

Posteriormente, el gel es sometido a procesos de envejecimiento y secado para eliminar el solvente contenido en su interior. Durante esta etapa ocurre la contracción de la estructura y se desarrolla la porosidad característica del material. Cuando el secado se realiza bajo condiciones atmosféricas convencionales, el producto obtenido recibe el nombre de xerogel.

La principal ventaja del método Sol-Gel radica en la posibilidad de controlar parámetros como composición química, tamaño de poro, área superficial y funcionalización, permitiendo diseñar materiales específicos para aplicaciones de adsorción.

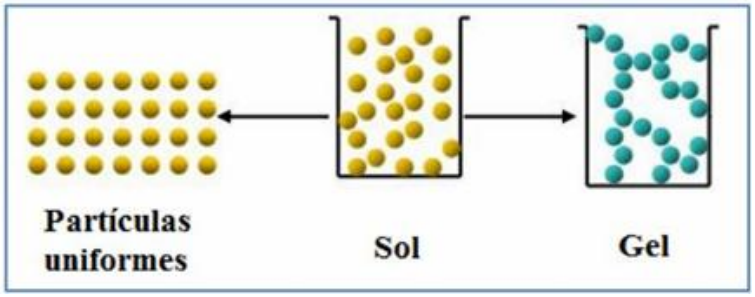


Figura 3. Representación esquemática del proceso sol-gel.

Punto de carga cero (PCC)

El punto de carga cero es una propiedad superficial fundamental en materiales adsorbentes. Se define como el valor de pH al cual la carga neta de la superficie del material es igual a cero.

Cuando el pH de la solución es inferior al PCC, la superficie del adsorbente presenta una carga positiva predominante. Por el contrario, cuando el pH es superior al PCC, la superficie adquiere una carga negativa.

Esta propiedad resulta especialmente importante en procesos de adsorción de aniones como el fluoruro. Una superficie con carga positiva favorece la atracción electrostática de especies aniónicas, incrementando la eficiencia de remoción. Por ello, el conocimiento del PCC permite identificar las condiciones óptimas de operación para maximizar la capacidad de adsorción.

Los cambios observados en el PCC después de la funcionalización de los xerogeles constituyen un indicador de las modificaciones químicas ocurridas en la superficie del material.

Isotermas de adsorción

Las isotermas de adsorción son herramientas fundamentales para describir la interacción entre un adsorbente y un adsorbato en condiciones de equilibrio. Su análisis permite determinar la capacidad máxima de adsorción y comprender el mecanismo mediante el cual ocurre el proceso.

Entre los modelos más utilizados se encuentran las isotermas de Langmuir y Freundlich.

El modelo de Langmuir asume que la adsorción ocurre sobre una superficie homogénea que posee un número finito de sitios activos energéticamente equivalentes. Además, considera que cada sitio puede adsorber únicamente una molécula, formando una monocapa sobre la superficie del material.

Por otra parte, el modelo de Freundlich describe sistemas con superficies heterogéneas donde existen diferentes niveles de energía de adsorción. Este modelo es ampliamente utilizado para materiales cuya superficie presenta una distribución no uniforme de sitios activos.

La comparación entre ambos modelos permite identificar cuál describe mejor el comportamiento experimental del sistema estudiado. En la presente investigación, el modelo de Langmuir presentó el mejor ajuste, sugiriendo la formación de una monocapa y una distribución relativamente homogénea de los sitios adsorbentes.

Cinética de adsorción

Los estudios cinéticos permiten analizar la velocidad con la que ocurre el proceso de adsorción y determinar el tiempo necesario para alcanzar el equilibrio.

La cinética proporciona información sobre los mecanismos involucrados en la transferencia de masa y sobre la interacción entre el adsorbato y la superficie del adsorbente. Además, permite identificar las etapas que controlan el proceso, como la difusión externa, la difusión intraparticular o la adsorción superficial.

En sistemas de remoción de fluoruros, la evaluación cinética resulta fundamental para determinar la eficiencia operativa del adsorbente y establecer tiempos adecuados de tratamiento. Los resultados obtenidos en esta investigación mostraron una disminución importante de la concentración de fluoruro durante las primeras etapas del proceso, indicando una rápida ocupación de los sitios activos disponibles sobre la superficie de los xerogeles modificados.

PARTE EXPERIMENTAL

Síntesis de los xerogeles de sílice

Los xerogeles de sílice utilizados en esta investigación fueron obtenidos mediante la técnica Sol-Gel, método ampliamente empleado para la síntesis de materiales porosos debido a la posibilidad de controlar sus propiedades estructurales y superficiales. Este procedimiento permite obtener

materiales con elevada área superficial, alta porosidad y una distribución homogénea de sitios activos, características deseables para aplicaciones de adsorción.

Durante el proceso de síntesis se promovieron reacciones de hidrólisis y condensación que condujeron a la formación de una red tridimensional de sílice. Posteriormente, el material fue sometido a procesos de envejecimiento y secado controlado para obtener la estructura sólida característica de los xerogeles.

Una vez obtenido el material base, se realizó la modificación superficial mediante la incorporación de nanopartículas inorgánicas con la finalidad de incrementar la cantidad de sitios activos disponibles para la adsorción de aniones fluoruro. La funcionalización permitió alterar las propiedades químicas de la superficie y mejorar la interacción entre el adsorbente y el contaminante presente en solución.

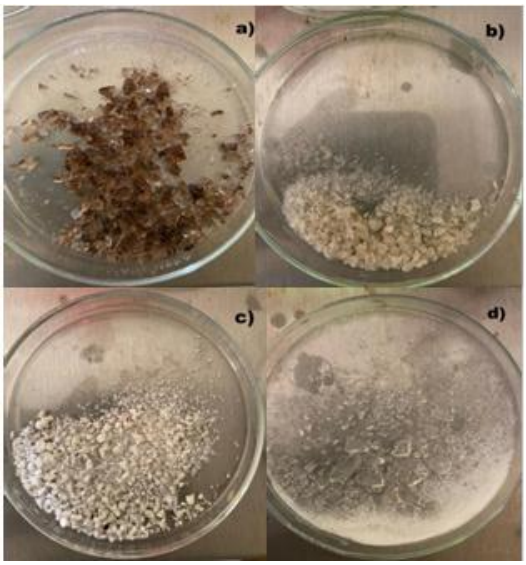


Figura 4. Síntesis y modificación de xerogeles a diferentes concentraciones del agente activante AlCl3 a) XG 0.1 M, b) XG 0.5 M, c) XG 1 M, d) XGB.

Caracterización de los materiales

La caracterización de los xerogeles se llevó a cabo con el propósito de evaluar las modificaciones generadas sobre la superficie del material después de la incorporación de las nanopartículas.

Entre las propiedades estudiadas se incluyeron la determinación de sitios funcionales ácidos y básicos, así como la evaluación del punto de carga cero (PCC), parámetros que permiten comprender el comportamiento del adsorbente durante los procesos de remoción de fluoruros.

La cuantificación de sitios superficiales se realizó mediante titulaciones ácido-base. Este procedimiento permitió estimar la cantidad de grupos funcionales presentes en la superficie del material capaces de participar en procesos de intercambio iónico o interacción electrostática con los aniones fluoruro.

Por otra parte, la determinación del punto de carga cero permitió establecer las condiciones de pH bajo las cuales la superficie del adsorbente presenta carga positiva o negativa predominante. Esta propiedad es especialmente importante debido a que los fluoruros se encuentran en solución como

especies aniónicas y, por lo tanto, su adsorción depende significativamente de la carga superficial del material.

Determinación de sitios funcionales superficiales

Los sitios funcionales superficiales representan los centros activos responsables de la interacción entre el adsorbente y el adsorbato. La presencia de estos grupos químicos influye directamente sobre la capacidad de adsorción y sobre la afinidad del material por diferentes especies presentes en solución.

La incorporación de nanopartículas produjo modificaciones importantes en la densidad de sitios superficiales. Como consecuencia, los materiales funcionalizados presentaron un incremento en la cantidad de grupos activos disponibles para participar en el proceso de adsorción.

La caracterización permitió identificar tanto sitios ácidos como básicos, los cuales desempeñan un papel fundamental en los fenómenos de interacción superficial y en la capacidad de remoción de los fluoruros presentes en el medio acuoso.

Determinación del punto de carga cero (PCC)

La determinación del punto de carga cero se realizó mediante experimentos de equilibrio de pH. Esta técnica consiste en evaluar las variaciones del pH inicial y final de una suspensión que contiene el adsorbente en contacto con soluciones de diferente acidez.

El PCC constituye uno de los parámetros más importantes en estudios de adsorción debido a que permite predecir el comportamiento electrostático de la superficie. Cuando el pH de operación es menor que el PCC, la superficie presenta una carga positiva predominante que favorece la atracción de aniones fluoruro. Por el contrario, valores de pH superiores al PCC generan superficies con carga negativa que pueden disminuir la eficiencia de adsorción debido a fenómenos de repulsión electrostática.

La evaluación de esta propiedad permitió analizar el efecto de la modificación superficial sobre el comportamiento de los xerogeles durante los experimentos de adsorción.

Estudios de adsorción por lotes

La capacidad de adsorción de los materiales fue evaluada mediante experimentos por lotes. Estos ensayos consistieron en poner en contacto una cantidad determinada de adsorbente con soluciones que contenían diferentes concentraciones de fluoruro bajo condiciones controladas de operación.

Durante los experimentos se analizaron variables que influyen directamente sobre el proceso de adsorción, tales como el pH de la solución, la concentración inicial del contaminante, la cantidad de adsorbente utilizada y el tiempo de contacto.

El objetivo principal de estos estudios fue determinar la capacidad de remoción de los materiales sintetizados y establecer las condiciones que favorecen una mayor adsorción de fluoruro.

Efecto del pH sobre la adsorción de fluoruros

El pH constituye uno de los factores más importantes en los procesos de adsorción debido a su influencia sobre la carga superficial del adsorbente y sobre la especiación química del adsorbato.

Para evaluar este efecto se realizaron experimentos en un intervalo amplio de pH con el fin de identificar las condiciones más favorables para la remoción de fluoruros. Los resultados obtenidos permitieron analizar la relación existente entre el comportamiento electrostático del material y su capacidad de adsorción.

La información obtenida a partir de estos estudios permitió establecer las condiciones óptimas de operación para maximizar la eficiencia del proceso.

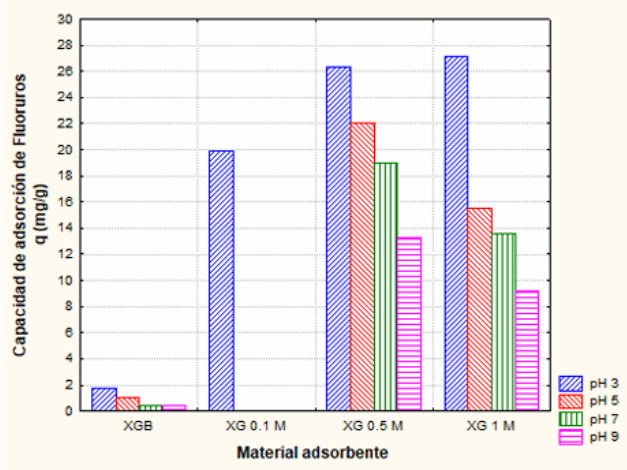


Figura 5. Efecto de pH en la capacidad de adsorción puntual de Flúor de XGB, XG 0.1M, XG 0.5M, XG 1M a una concentración inicial de 150 ppm y 25°C.

Estudios de equilibrio e isotermas de adsorción

Con la finalidad de describir el comportamiento del sistema en condiciones de equilibrio, se realizaron experimentos utilizando diferentes concentraciones iniciales de fluoruro.Los datos experimentales obtenidos fueron analizados mediante modelos matemáticos de adsorción ampliamente utilizados en estudios de equilibrio, entre ellos los modelos de Langmuir y Freundlich.

La aplicación de estos modelos permitió determinar parámetros relacionados con la capacidad máxima de adsorción y la naturaleza de las interacciones adsorbente-adsorbato. Asimismo, se evaluó la calidad del ajuste de cada modelo para identificar cuál describía de mejor manera el comportamiento experimental observado.

El análisis de isotermas constituye una herramienta fundamental para comprender los mecanismos de adsorción y estimar el potencial de aplicación de los materiales en procesos de tratamiento de agua.

Estudios de cinética de adsorción

Además de los experimentos de equilibrio, se realizaron estudios cinéticos con el propósito de evaluar la velocidad de remoción de fluoruro y determinar el tiempo requerido para alcanzar condiciones cercanas al equilibrio.

Los experimentos consistieron en monitorear la concentración de fluoruro en diferentes intervalos de tiempo mientras el adsorbente permanecía en contacto con la solución contaminada.

La información obtenida permitió analizar el comportamiento temporal del proceso y establecer la rapidez con la que los sitios activos del material son ocupados por los aniones fluoruro.

Los estudios cinéticos son fundamentales para el diseño de sistemas de tratamiento debido a que permiten estimar tiempos de operación y evaluar la viabilidad práctica de los materiales adsorbentes desarrollados.

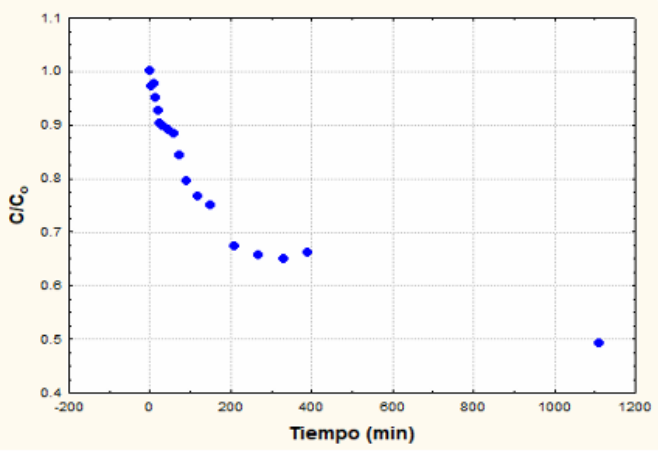


Figura 6. Decaimiento de la concentración con respecto; pH 3, agitación: 250 rpm y concentración inicial de 300 ppm.

RESULTADOS

Sitios funcionales superficiales

La presencia de sitios funcionales en la superficie de un adsorbente constituye uno de los factores más importantes que determinan su capacidad para interactuar con especies químicas presentes en solución. En materiales destinados a la remoción de fluoruros, estos sitios actúan como centros activos donde ocurren los fenómenos de adsorción responsables de la retención del contaminante.

La caracterización mediante titulaciones ácido-base permitió determinar las densidades de sitios ácidos totales (SAT) y sitios básicos totales (SBT) para los diferentes xerogeles sintetizados. Los resultados obtenidos se presentan en la Tabla 1.

Tabla 1. Densidad de sitios funcionales superficiales de los xerogeles sintetizados.

SITIOS ACTIVOS TOTALES		
	Muestra	**mmol/g**
Sitios Ácidos Totales	XGB	0.2288
	$XG_{0.1\ M}$	0.0896
	$XG_{0.5\ M}$	0.3891
	$XG_{1\ M}$	0.5152
Sitios Básicos Totales	XGB	0.7368
	$XG_{0.1\ M}$	2.4931
	$XG_{0.5\ M}$	0.912
	$XG_{1\ M}$	4.1654

Xerogel Blanco (B), Xerogel Impregnado 0.1 M de $AlCl_3$ (0.1 M), Xerogel Impregnado 0.5 M de $AlCl_3$ (0.5 M), Xerogel Impregnado 1 M de $AlCl_3$ (1 M).

Los resultados muestran que la incorporación de nanopartículas produjo modificaciones importantes en la superficie de los materiales. En particular, el xerogel XG1M presentó los valores más elevados tanto para sitios ácidos como básicos, alcanzando 0.5152 mmol/g y 4.1654 mmol/g, respectivamente.

El incremento observado en la densidad de sitios funcionales indica que la modificación superficial fue efectiva y permitió generar una mayor cantidad de centros activos capaces de interactuar con los aniones fluoruro. Esta característica resulta fundamental para explicar el mejor desempeño adsorbente observado posteriormente durante los experimentos de remoción.

Asimismo, el aumento en la cantidad de grupos superficiales favorece la formación de interacciones electrostáticas y químicas entre el adsorbente y el adsorbato, incrementando la eficiencia global del proceso de adsorción.

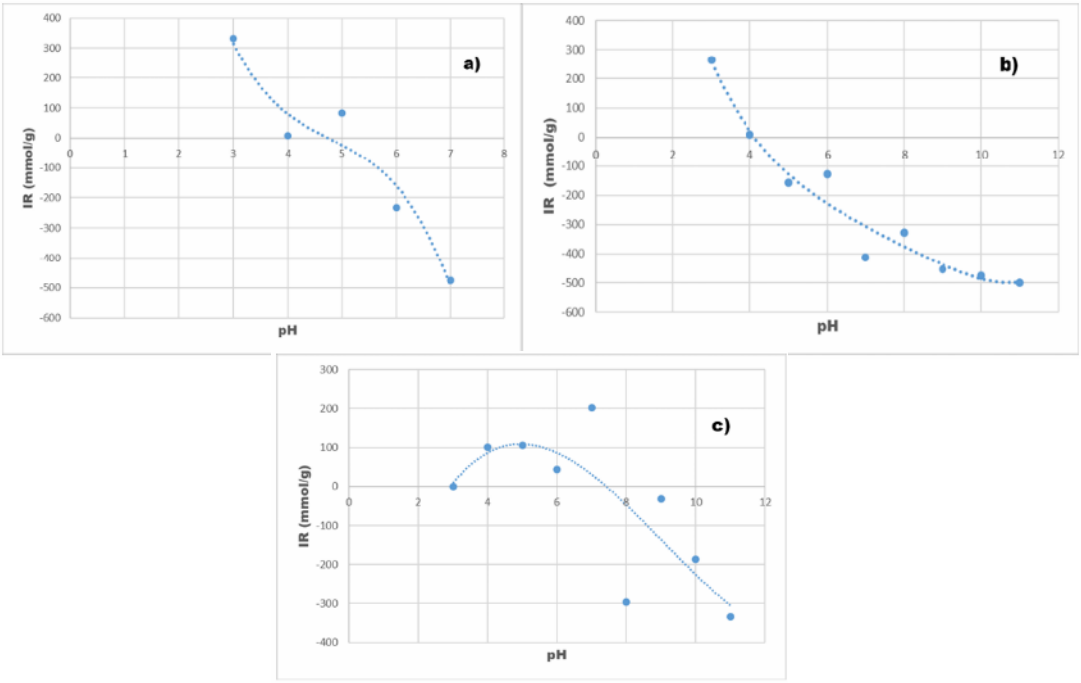


Figura 7. Distribución de carga de a) XG 0.5 M, b) XG 1M, c) XG 0.1 M.

Determinación del punto de carga cero (PCC)

El punto de carga cero representa una propiedad superficial de gran importancia debido a que permite predecir el comportamiento electrostático del material en diferentes condiciones de pH. La adsorción de aniones fluoruro depende directamente de la carga superficial del adsorbente, por lo que la determinación de este parámetro resulta esencial para comprender el mecanismo de remoción. Los valores obtenidos para cada material se muestran en la Tabla 2.

Tabla 2. Valores de punto de carga cero para los xerogeles sintetizados.

Muestra	pH
XGB	4.39
XG $_{0.1\ M}$	6.99
XG $_{0.5\ M}$	5.47
XG $_{1\ M}$	4.35

Los resultados indican que la incorporación de las nanopartículas modificó significativamente las propiedades superficiales de los xerogeles. El incremento del PCC observado en algunos materiales sugiere una alteración en la distribución de carga superficial y una mayor disponibilidad de sitios capaces de interactuar con especies aniónicas.

Cuando el pH de la solución es inferior al PCC, la superficie del adsorbente presenta carga positiva predominante, favoreciendo la atracción electrostática de los aniones fluoruro. Por esta razón, el conocimiento de este parámetro permite identificar las condiciones de operación más adecuadas para maximizar la remoción del contaminante.

Los resultados obtenidos muestran que los materiales sintetizados presentan características superficiales favorables para la adsorción de fluoruros en condiciones ácidas.

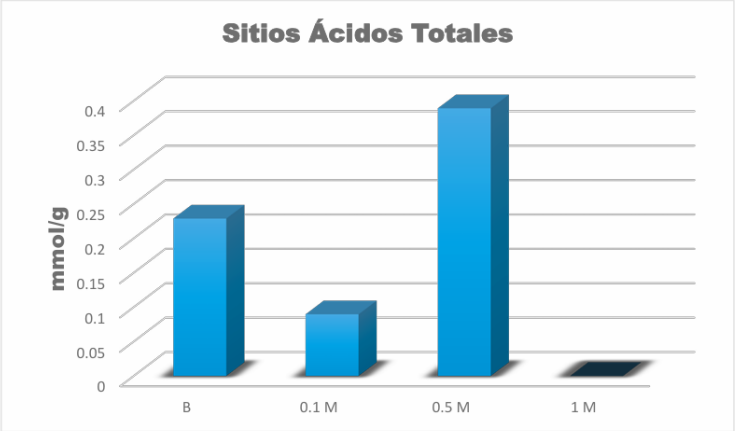


Figura 8. Sitios Ácidos Totales de los Xerogeles sin impregnar e impregnados con Dióxido de Titanio (TiO2).

Efecto del pH sobre la adsorción de fluoruros

El pH constituye uno de los parámetros más influyentes en los procesos de adsorción debido a que modifica simultáneamente la carga superficial del adsorbente y la especiación química del adsorbato.

Los experimentos realizados permitieron evaluar el comportamiento de los xerogeles bajo diferentes condiciones de pH. Los resultados demostraron que la capacidad de adsorción aumenta conforme disminuye el pH de la solución.

La mayor capacidad de adsorción obtenida fue de **27.1 mg/g**, alcanzada a una concentración de equilibrio de 150 ppm y una temperatura de 25 °C. Este comportamiento puede atribuirse a la

presencia de superficies cargadas positivamente bajo condiciones ácidas, lo que favorece la atracción de los aniones fluoruro mediante interacciones electrostáticas.

A medida que el pH aumenta, la concentración de grupos hidroxilo presentes en la solución también incrementa, generando competencia con los aniones fluoruro por los sitios activos del adsorbente. Como consecuencia, la eficiencia de remoción disminuye progresivamente.

Estos resultados confirman la importancia del control del pH como variable operativa en procesos de tratamiento de agua mediante adsorción.

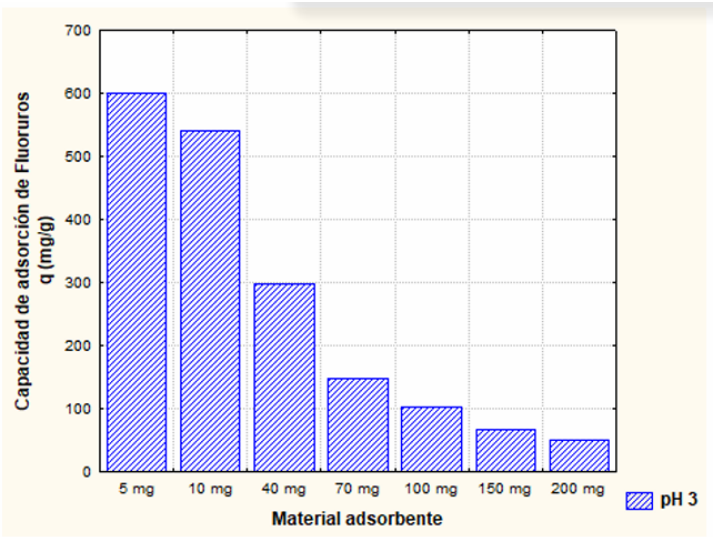


Figura 9. Capacidad de adsorción puntual del XG 1M con efecto de la masa a 25°C con una concentración inicial de 150 ppm a un pH 3.

Isotermas de adsorción

Los estudios de equilibrio permitieron evaluar la capacidad máxima de adsorción de los materiales sintetizados y determinar el modelo matemático que describe con mayor precisión el comportamiento experimental observado.

Los resultados mostraron que la disminución de la masa de adsorbente favorece significativamente la capacidad de adsorción expresada en mg de fluoruro adsorbido por gramo de material. La mayor capacidad registrada fue cercana a **600 mg/g**, obtenida utilizando una concentración inicial de fluoruro de 300 ppm, una masa adsorbente de 5 mg y un pH de 3 a 25 °C.

Para describir el comportamiento experimental se aplicaron los modelos de Langmuir y Freundlich. Los parámetros obtenidos indicaron que el modelo de Langmuir presentó el mejor ajuste de los datos experimentales.

El buen ajuste observado sugiere que la adsorción ocurre sobre una superficie relativamente homogénea y que los sitios activos presentan energías similares de adsorción. Asimismo, el modelo propone la formación de una monocapa de fluoruro sobre la superficie del material adsorbente.

Los parámetros calculados mostraron una capacidad máxima de adsorción cercana a **792.72 mg/g**, valor que confirma el elevado potencial adsorbente del material sintetizado.

Tabla 3. Parámetros obtenidos mediante el ajuste del modelo de Langmuir.

Modelo de isoterma			
Langmuir.		**Freundlich**	
Parámetro		Parámetro	
Q_m (mg/g)	17.4413	K_A (L/mg)	73.1776
B_A (L/mg)	0.02255	n	0.4119
R	0.98	R	0.95

El elevado coeficiente de correlación obtenido demuestra que el modelo describe adecuadamente el fenómeno de adsorción estudiado.

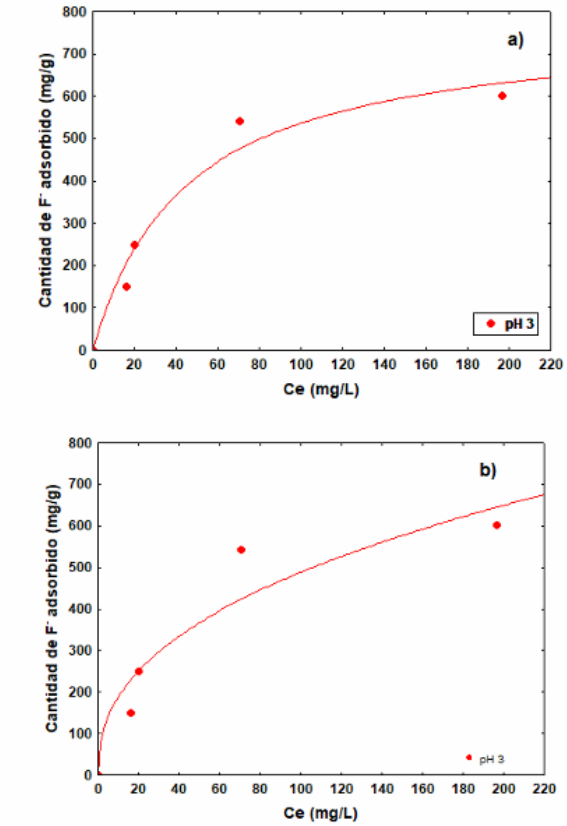


Figura 10. Isoterma de adsorción ajustadas al modelo de a) Langmuir y b) Freundlich mediante xerogeles impregnados con AlCl3 con una concentración de 1 M a pH 3.

Cinética de adsorción

La evaluación cinética permitió determinar la velocidad con la que ocurre la remoción de fluoruro y analizar el comportamiento temporal del proceso de adsorción. Los resultados mostraron una disminución significativa de la concentración de fluoruro durante las primeras etapas del experimento. Aproximadamente el **51 % de la remoción total ocurrió durante las primeras horas de contacto**, indicando una rápida ocupación de los sitios activos disponibles sobre la superficie del adsorbente.

Este comportamiento puede explicarse por la elevada disponibilidad inicial de sitios funcionales libres. Conforme avanza el proceso de adsorción, la cantidad de sitios vacantes disminuye gradualmente y la velocidad de remoción se reduce hasta alcanzar condiciones cercanas al equilibrio.La rápida disminución inicial de la concentración representa una ventaja importante para aplicaciones de tratamiento de agua, ya que permite alcanzar porcentajes elevados de remoción en tiempos relativamente cortos.Los resultados cinéticos obtenidos corroboran el potencial de los xerogeles funcionalizados para aplicaciones de descontaminación de aguas con presencia de fluoruros.

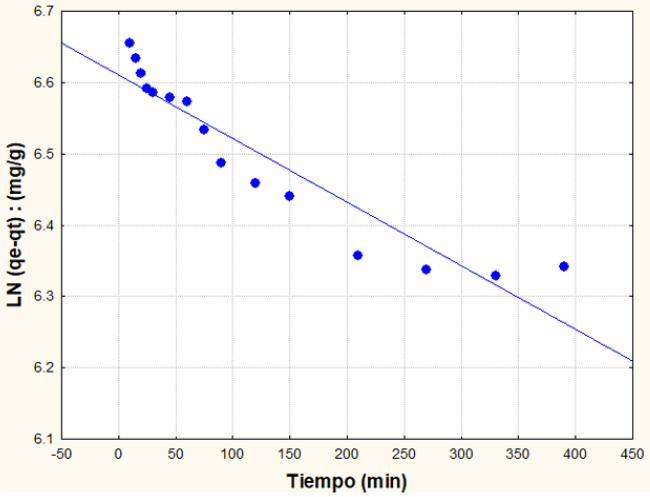


Figura 11. Cinética de adsorción del XG1M, ajustada al modelo de pseudo-primer orden: pH 3, agitación 250 rpm y concentración de 300 ppm.

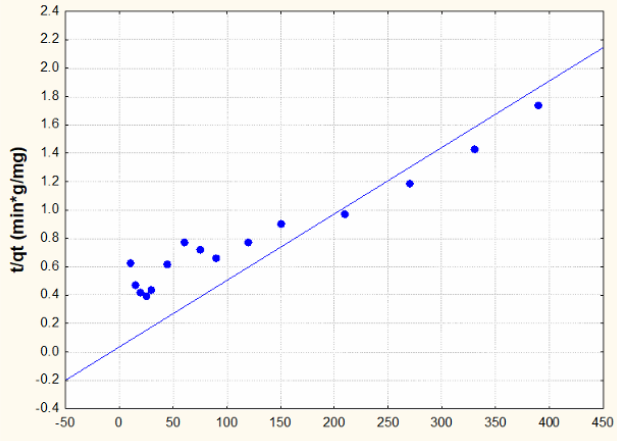


Figura 12. Cinética de adsorción del XG0.1M, ajustada al modelo de pseudo-segundo orden: pH 3, agitación 250 rpm y concentración 300 ppm.

Discusión general

Los resultados obtenidos demuestran que la modificación de los xerogeles mediante la incorporación de nanopartículas produjo cambios significativos en las propiedades superficiales del material. El incremento de sitios funcionales y las variaciones observadas en el punto de carga cero favorecieron la interacción entre el adsorbente y los aniones fluoruro presentes en solución.

La influencia del pH confirmó la importancia de las interacciones electrostáticas en el mecanismo de adsorción, observándose mayores capacidades de remoción bajo condiciones ácidas. Asimismo, el ajuste satisfactorio del modelo de Langmuir indicó que el proceso ocurre principalmente sobre sitios homogéneos con formación de una monocapa adsorbida.

Finalmente, los estudios cinéticos evidenciaron una rápida disminución de la concentración de fluoruro durante las primeras etapas del proceso, característica que resulta favorable para futuras aplicaciones en sistemas de tratamiento de agua.

CONCLUSIONES

La presente investigación permitió evaluar el potencial de los xerogeles de sílice modificados con nanopartículas inorgánicas como materiales adsorbentes para la remoción de fluoruros presentes en solución acuosa. Los resultados obtenidos demostraron que la funcionalización de los xerogeles produjo modificaciones significativas en las propiedades fisicoquímicas de la superficie, favoreciendo la generación de nuevos sitios activos y mejorando la interacción entre el adsorbente y los aniones fluoruro.

La caracterización superficial evidenció un incremento en las densidades de sitios funcionales ácidos y básicos, alcanzando valores comprendidos entre 0.22–0.51 mmol/g y 0.73–4.16 mmol/g, respectivamente. Asimismo, se observaron cambios en los valores del punto de carga cero, indicando que la incorporación de las nanopartículas modificó la distribución de carga superficial de los materiales y contribuyó a mejorar sus propiedades adsorbentes.

Los estudios de adsorción mostraron que el pH es uno de los parámetros más importantes en el proceso de remoción de fluoruros. Se observó que las condiciones ácidas favorecen significativamente la adsorción, obteniéndose una capacidad máxima de 27.1 mg/g a una concentración de equilibrio de 150 ppm y una temperatura de 25 °C. Este comportamiento confirma la influencia de las interacciones electrostáticas entre la superficie del adsorbente y los aniones fluoruro presentes en solución.

Los experimentos de equilibrio permitieron determinar que el modelo de Langmuir presentó el mejor ajuste de los datos experimentales, con un coeficiente de correlación cercano a 0.98. Este resultado indica que el fenómeno de adsorción ocurre principalmente sobre una superficie relativamente homogénea y mediante la formación de una monocapa de fluoruro sobre los sitios activos disponibles. Además, se obtuvo una capacidad máxima de adsorción de aproximadamente 792.72 mg/g, lo que evidencia el elevado potencial de los materiales sintetizados para aplicaciones en tratamiento de agua.

Por otra parte, los estudios cinéticos mostraron una rápida disminución de la concentración de fluoruro durante las primeras etapas del proceso, alcanzándose una remoción cercana al 51 % en los primeros periodos de contacto. Este comportamiento demuestra la alta disponibilidad inicial de sitios activos y confirma la eficiencia de los xerogeles modificados para la captura de aniones fluoruro.

En conjunto, los resultados obtenidos permiten concluir que los xerogeles de sílice funcionalizados constituyen una alternativa prometedora para la remoción de fluoruros en sistemas acuosos y representan una opción viable para el desarrollo de tecnologías orientadas al tratamiento y mejoramiento de la calidad del agua destinada al consumo humano.

BIBLIOGRAFÍA

1. Alagumuthu G., V. V. (2010). Adsorption Isotherms on Fluoride Removal: Batch Tecniques. Scholars Research Library, Archives of Applied Science Research, 2(4), 170-185.
2. Alarcón-Herrera, M. B.-G. (2012). Co-ocurrence of arsenic and fluoride in groundwater of semi-arid regions in Latin America: Genesis, mobility and remediation. Journal of Hazardous Materials, 262, 960-969.
3. Alfaro, R. M. (2002). Radon behavior in springs and wells around Cuitzeo Lake, Lerma river basin, Mexico. Geofísica Internacional, 41 (4), 439-445.
4. ATSDR. (2003). Fluoruros, Fluoruro de Hidrógeno y Flúor. Departamento de Salud y Servicios Humanos de los EE.UU. Revista Servicio de Salud Pública. Atlanta, Georgia, USA.
5. Ayoob, S. G. (2008). Investigations on the kinetics and mechanisms ofsorptive removal of fluoride from water using alumina cement granules. Elsevier: Chemical Engineering Journal, 140, 14.
6. Coetzee PP, P. R. (2002). Fluoride adsorption chemistry and the defluoridation of contaminated natural waters. Fluoride, volumen 35, No.4., 253-254.
7. Galicia L., e. a. (2011). Análisis de la concentración de fluoruro en agua potable de la delegación Tláhuac, Ciudad de México. Rev. Int. Contam. Ambie. 27(4) , 283-289.
8. Gomez, J. R. (2003). Aplicación de la técnica Sol-Gel. Mexico: Universidad de Colima.
9. Grijalva Haro. Isabel, B. L. (2001). Ingestión y excreción de Fluoruros en niños de Hermosillo, Sonora, México. Salud Pública de México 43, 2.
10. Imran Ali, Z. A. (2015). Green Synthesis of Iron Nano-Impregnated Adsorbent for Fast Removal of. Journal of Molecular Liquids, 457-465.
11. J.R. Rangel Méndez, E. V. (2015). Adsorbentes híbridos oxihidróxidos metálicos-carbón para remover contaminantes prioritarios del agua: fluoruro y arsénico. Bol. Grupo Español Carbón, 11-16.
12. Jochen Fricke, A. E. (1992). Aerogels. Journal of the American Ceramic Society, Volume 75, Issue 8, 2027-2035.
13. John C. Crittenden, e. a. (2012). MWH's Water Treatment. United States of America: John Wiley & Sons, Inc.
14. José C. Lazo, A. E.-K. (2008). Síntesis y caracterización de arcillas organofílicas y su aplicación como adsorbentes del fenol. Rev Soc Quím Perú., 3-19.
15. José Iván Morales-Arredondo, M. A. (2020). Estimación de la exposición a elevados contenidos de fluoruro en agua potable en distintas comunidades de Guanajuato, México. Tecnología y ciencias del agua vol.9 no.3.
16. Klein, L. C. (1985). SOL-GEL PROCESSING. Annual Review of Materials Science, 15:227-48. Larry L. Hench, W. V. (1998). GEL-SILICA SCIENCE. Annual Review of Materials Science, 20:269-98.
17. Lorenzo Valenzuela, J. R.-H. (2011). Alternativas para la Eliminación Doméstica de Fluor en el Agua de Consumo Humano. Información Tecnológica Vol. 22, 23-32.
18. Mohapatra M., A. S. (2009). Review of fluoride removal from drinking Water. Journal of Environmental Management 91, 67-77.
19. Rodolfo, G. D. (2007). Monitoreo de fluoruros en agua en la ciudad de Aguascalientes. Red de Revistas Científicas de América Latina y el Caribe, España y Portugal, Conciencia Tecnológica (39-40), 7-11.
20. Rodríguez, M. G. (2009). La hidrosfera. El ciclo del agua. La contaminación del agua. Métodos de análisis y depuración. El problema de la escasez del agua. ResearchGate, 26.
21. Sabine Guth, S. H.-H.-U. (2020). Toxicity of fluoride: critical evaluation of evidence for human developmental neurotoxicity in epidemiological studies, animal experiments and in vitro analyses. Archives of toxicology, 1375-1414.
22. Synthesis of Silica Gels and Organic–Inorganic Hybrids on Their Base. (2004). N.N.Khimich, Glass Physics and Chemistry, 430-442.
23. Tracy R. Bryans, V. L. (2000). Microstucture and Porosity of Silica Xerogel Monoliths Prepared by the Fast Sol-Gel Method. Journal of Sol-Gel Science and Technology 17, 211-217.

EFECTO DEL MEDIO DE REACCIÓN EN CARBONIZACIÓN HIDROTERMAL DE HYDROCHAR DE MUÉRDAGO PARA LA ADSORCIÓN DEL COLORANTE RO84

Luisa Fernanda Medina Ganem[1], Areli Jael Hernández Guzmán[1], Alejandro Vega Ríos[2], Alexis Yahir Zurita Suárez[3], Alejandra Natyeli Ortiz Tirado[1], Raúl Emilio Medina Ganem[4] y Oscar Manuel Rodríguez Narváez[1]

[1]Centro de Innovación Aplicada en Tecnologías Competitivas (CIATEC), [2]Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), [3]Instituto Politécnico Nacional - UPIIG, [4]Universidad Tecnológica de México campus León (UNITEC).

lganem.estudiantepicyt@ciatec.mx

RESUMEN

El muérdago (*Psittacanthus calyculatus*) es un hemiparásito que infecta a especies endémicas en el centro de México (Aguilar-Venegas et al., 2023), y debido a ello, diversas técnicas para su control se han desarrollado, entre las que la poda y quema de la planta infectada es la más utilizada. No obstante, esta técnica de control produce en promedio aproximadamente 8 toneladas de residuo anuales en el Bajío (Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturale, 2018). Tomando en cuenta ello, diversas investigaciones se han enfocado en la revalorización, donde una que ha resaltado es la carbonización hidrotermal (CHT), esto debido a que produce un material a base de carbón denominado hydrochar (HC), el cual es utilizado, entre otras aplicaciones, para el tratamiento de agua. A partir de ello, en el presente trabajo se utilizó el muérdago para generar HC en medios ácidos, alcalinos y neutros, esto con el objetivo de determinar el rendimiento, las propiedades físico-químicas y la capacidad de adsorción. Para ello, primero se sintetizó el material, para lo cual se colocó la biomasa en liners con diversas soluciones (i.e., NaOH, H_2SO_4 y agua destilada). Posteriormente, los liners se colocaron dentro de reactores de acero inoxidable y se les dio un tratamiento térmico a 200° C por 24 h. Una vez pasado el tiempo de síntesis, los reactores se dejaron enfriar. Una vez enfriado, el material obtenido fue filtrado y secado a temperatura ambiente. Finalmente, los materiales producidos se caracterizaron por FT-IR, BET y CHONS, y se realizaron pruebas de adsorción con una solución de RO84 a 0.1 g L^{-1} a diferentes concentraciones de HC (i.e. entre 1 a 10 g L^{-1}). De los diversos datos obtenidos se resalta que el análisis de FT-IR mostró que las muestras tratadas en medio ácido tuvieron una oxidación superficial y la adición de grupos –SO3H; mientras que el análisis BET indicó que el uso de diferentes medios reducía el diámetro de poro (i.e. 9.3 y 2.8 nm) en comparación con muestras de medio neutro (i.e. 12.2 nm). Para las pruebas de adsorción se determinó que los materiales producidos en medio ácido alcanzaron la mayor remoción de colorante, atribuida a la adición de grupos $–SO_3H$.

INTRODUCCIÓN

El término muérdago es utilizado para referirse a un diverso grupo de plantas parásitas y hemiparásitas que, a pesar de ser capaces de llevar a cabo la fotosíntesis, dependen de sus huéspedes para obtener agua y nutrientes. Esta interacción compromete gradualmente la salud del arbolado, reduciendo su crecimiento y finalmente provocando su muerte. Existen entre 1300 y 2000 especies de muérdago distribuidas en cinco continentes (Ávila-Hernández et al., 2025); sin embargo, el más prevalente en la región central de México es el muérdago *Psittacanthus calyculatus*. En la actualidad, esta especie infecta entre un 65% a un 86% del arbolado en el estado de Guanajuato, particularmente a los mezquites, que son una especie endémica de la región (Ávila-Hernández et al., 2025). La técnica de control consiste en la poda de las ramas infectadas, sin exceder el 50% de la copa total del árbol, y la masa recuperada se pica, entierra o quema con la finalidad de evitar la maduración de frutos y su consecuente propagación a otros árboles sin infectar (Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturale, 2018). No obstante, esto produce toneladas de residuos al año cuya quema contribuye a la contaminación atmosférica, por lo que se requiere un mejor proceso de gestión o revalorización de dicha biomasa.

Referente a dicha cuestión, se han desarrollado diferentes tecnologías para revalorizar residuos lignocelulósicos, convirtiéndolos en materiales a base de carbón. Entre estos procesos, la carbonización hidrotermal (CHT) ha surgido como un método eficiente y versátil para el manejo de este tipo de residuos (Hayoun et al., 2022; Rodriguez-Narvaez et al., 2023). El proceso de CHT regularmente se lleva a cabo a temperaturas entre 180 y 250° C con presiones autogeneradas para producir un material conocido como hydrochar (HC). Debido a sus propiedades fisicoquímicas el HC puede ser utilizado en una amplia gama de aplicaciones como nutrientes en suelos, biocombustibles o como adsorbente en el tratamiento de aguas residuales (Campos et al., 2025; Danso-Boateng et al., 2022; Ogunleye et al., 2024; Pierpaoli et al., 2025; Rodriguez-Narvaez et al., 2023). Sin embargo, estos materiales han mostrado un área de mejora importante en relación con su proceso de producción; esto se debe a que sus propiedades están estrechamente relacionadas con las condiciones de CHT bajo las cuales se produce el material. Por ello, el presente trabajo tuvo como objetivo evaluar el efecto del medio acuoso en los procesos de CHT, comparando HC producidos en medio ácido, neutro y alcalino. Además, se evaluaron las propiedades físico-químicas de los materiales y se compararon con el rendimiento en masa del proceso y su capacidad como absorbentes del colorante Reactive Orange 84 (RO84).

PARTE EXPERIMENTAL

Síntesis de Hydrochar

Previo al proceso de CHT, el muérdago fue secado, molido y tamizado para llegar a un tamaño de 2 mm. Posteriormente, el muérdago tratado fue colocado en liners de teflón (con capacidad de 20 mL) en una solución neutra, ácida o alcalina para obtener una concentración de 120 g L^{-1}. Las soluciones ácidas y nuestras fueron preparadas a una concentración de 0.2 M de ácido sulfúrico e hidróxido de sodio, respectivamente; mientras que la solución neutra fue con agua destilada. Una vez preparado el liner de teflón, este se cierra y se introduce en reactores de acero inoxidable. Se les da un tratamiento térmico en una mufla a 200° C por 24 h. Una vez pasado el tiempo de reacción, el reactor se enfría a temperatura ambiente para recuperar el contenido, el cual se filtra con papel Whatman n.º 1. El filtro con hydrochar se deja secar a temperatura ambiente por 24 h y se almacena en tubos de ensayo hasta su uso. Para la identificación de cada material se utilizó la nomenclatura HCX-M, donde, HC es Hydrochar, M es Muérdago y X es el medio (W=neutro, B=alcalino, A=ácido).

Caracterización de Hydrochar

La caracterización del material se realizó mediante diversas técnicas, con el propósito de obtener información detallada sobre su composición elemental, grupos funcionales, estructura superficial, morfología. Estas propiedades están directamente relacionadas con el comportamiento del hydrochar como adsorbente, ya que influyen en su capacidad para interactuar con especies contaminantes presentes en soluciones acuosas.

El análisis por difracción de rayos X (XRD) se llevó a cabo utilizando un difractómetro Philips X'Pert MPD (Malvern Panalytical, Great Malvern, Reino Unido) equipado con un monocromador de grafito curvo y radiación Cu Kα (λ = 1.54056 Å).

El área superficial específica y la distribución del tamaño de poro se determinaron mediante el método de Brunauer–Emmett–Teller (BET) con un analizador Quantachrome NOVA 4200e (SpectraLab Scientific Inc., Markham, ON, Canadá). Se utilizó nitrógeno como adsorbato, y las isotermas de adsorción-desorción se midieron a 77.35 K en un rango de presión relativa (P/P_0) de 0.05–0.10.

Se realizó una espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier con reflectancia total atenuada (FT-IR ATR) para identificar los grupos funcionales superficiales utilizando un espectrómetro Thermo Scientific Smart iTR (Nicolet iS10, Thermo Fisher Scientific, Waltham, MA, EE. UU.) equipado con un cristal ATR de diamante. Los espectros se registraron en el rango de 500–3500 cm^{-1}.

Pruebas de Adsorción

Para las pruebas de adsorción se prepararon soluciones de Reactive Orange 84 (RO84) a una concentración de 0.1 g L^{-1}. Se agregaron en vasos de precipitados de vidrio un volumen total de 10 mL del colorante y se mezclaron con diversas concentraciones de los materiales (2, 4, 6, 8 y 10 g L^{-1}). Las mezclas se agitaron en un agitador orbital a 160 rpm durante 24 h. Después del ensayo, las muestras se filtraron utilizando papel de filtro Whatman no. 1, y la concentración residual de colorante en el filtrado se determinó utilizando un espectrofotómetro UV-Vis Thermo Scientific Evolution 300 a una longitud de onda de 492 nm. Todos los experimentos se realizaron por triplicado.

RESULTADOS

Caracterización

Con el objetivo de evaluar el efecto del medio de reacción sobre el rendimiento de obtención del hydrochar, se llevaron a cabo ensayos de CHT empleando condiciones neutras (i.e. agua destilada), ácidas (i.e. solución de H_2SO_4) y alcalinas (i.e. solución de NaOH) comparando la masa inicial con la masa de HC obtenida. Los resultados de dichas evaluaciones se presentan en la Figura 1.

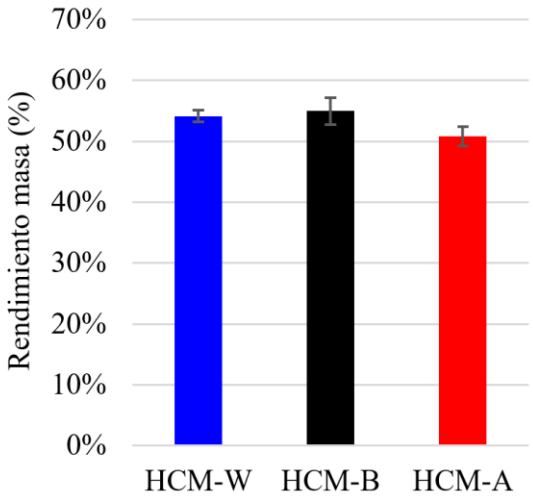


Figura 1. Rendimientos en masa de HC sintetizado en distintos medios.

Se observó que los medios alcalino y neutro mantuvieron rendimientos promedio similares entre sí (i.e. 55% y 54%, respectivamente) mientras que el medio ácido tuvo menor rendimiento de materia sólida (i.e. 51%). Esto se debe a que la incorporación de H_2SO_4 fomenta la hidrólisis durante el proceso de CHT, convirtiendo la materia sólida en productos líquidos o gaseosos. Resultados similares fueron observados por Naeem et al. (2026), quienes compararon el efecto de ácidos orgánicos e inorgánicos en el efecto de la carbonización hidrotermal de cáscara de papa y reportaron que los ácidos fuertes como el ácido sulfúrico o el ácido clorhídrico tendían a reducir el rendimiento de masa de la CHT, en comparación con ácidos orgánicos como el ácido acético o el ácido láctico.

La Figura 2 muestra los FT-IR de los HC producidos, donde se pueden observar múltiples señales asociadas con hemicelulosa, celulosa y lignina, indicando una degradación parcial de estos componentes, es decir, las muestras mostraron una banda ancha a 3284 cm^{-1} atribuida al estiramiento de O-H en polisacáridos o agua y señales a 2925 cm^{-1} y 2851 cm^{-1} del estiramiento de C-H de grupos alifáticos derivados de compuestos lignocelulósicos (Hayoun et al., 2022). Adicionalmente, se observan señales a 1700 cm^{-1} asociadas al estiramiento de C=O, señales a 1600 y 1513 cm^{-1} relacionadas con vibraciones de anillos aromáticos de lignina (Al-Labadi et al., 2023), y señales características asociadas a celulosa y hemicelulosa (i.e. 1447 y 1316 cm^{-1}) (Rasheed et al., 2024). No obstante, la muestra HCM-A presenta una señal más intensa a 1700 cm^{-1} en comparación

con las otras muestras, posiblemente atribuida a la oxidación superficial inducida por el tratamiento ácido (Medina-Ganem et al., 2026). Además, presenta una intensa a 1163 cm^{-1}, 1108 cm^{-1} y un hombro a 1038 cm^{-1} atribuidos a señales de -SO_3H, S=O y estiramiento asimétrico de O-S-O respectivamente (Ali et al., 2020; Valencia-Espinoza et al., 2025), sugiriendo una funcionalización *in situ* del material.

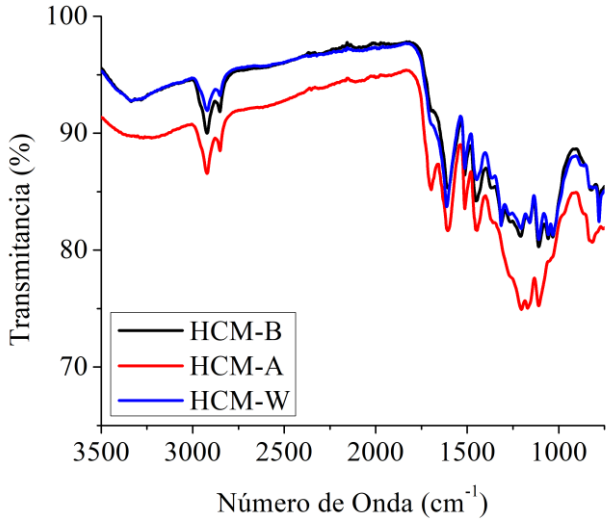


Figura 2. FT-IR de HC sintetizados con distintos medios.

En la Tabla 1 se presentan los resultados del área superficial y de la estructura del poro (diámetro y volumen). Las áreas superficiales muestran valores relativamente bajos, en comparación con otros materiales a base de carbón como biochar o carbones activados; sin embargo, estos se encuentran en el rango típico para el HC (Kozyatnyk & Yakupova, 2025). Por otra parte, el diámetro de poro en todos los casos se encuentra entre los 2.83 y 12.259 nm, lo cual permite clasificarlos como materiales mesoporosos, según la IUPAC. No obstante, se observaron diferencias importantes entre muestras, en especial la muestra HCM-A, que presenta valores de volumen y diámetro de poro entre 4 y 6 veces menores que los de las muestras sintetizadas en medio neutro y medio alcalino. Esto podría ser atribuido a obstrucciones generadas por el tratamiento ácido, resultando en estructuras porosas de menor tamaño (Nguyen et al., 2019).

Tabla 1. Análisis BET de muestras de HC sintetizadas en distintos medios.

Análisis BET			
Muestra	Área superficial ($m^2\ g^{-1}$)	Volumen de poro ($cm^3\ g^{-1}$)	Diametro de poro (nm)
HCM-W	2.575	0.008	12.259
HCM-B	3.588	0.008	9.319
HCM-A	2.523	0.002	2.830

En la Figura 3 se presenta el diagrama de Van Krevelen de las tres muestras de HC y la materia prima utilizada (i.e. muérdago), el cual representa gráficamente la relación atómica H/C frente a O/C. Esta representación permite identificar la trayectoria de transformación de los materiales precursores hacia estructuras más aromáticas, condensadas o funcionalizadas, así como distinguir el efecto de las condiciones del medio de reacción sobre la composición final del hydrochar. La Figura muestra que el muérdago posee los valores más altos en ambos ejes, lo cual refleja su alto contenido de grupos funcionales oxigenados e hidrogenados. Tomando en cuenta lo anterior, al compararlos con

las muestras después de la CHT, los 3 tipos de HC presentan un desplazamiento hacia el origen, lo cual nos determina que durante la carbonización hidrotermal, este tipo de biomasa experimenta reacciones de deshidratación y descarboxilación que conllevan la pérdida de hidrógeno y oxígeno en forma de H_2O, CO y CO_2. Estas transformaciones favorecen el enriquecimiento en carbono y la formación de estructuras más condensadas y aromáticas, resultando en una disminución progresiva de los radios atómicos.

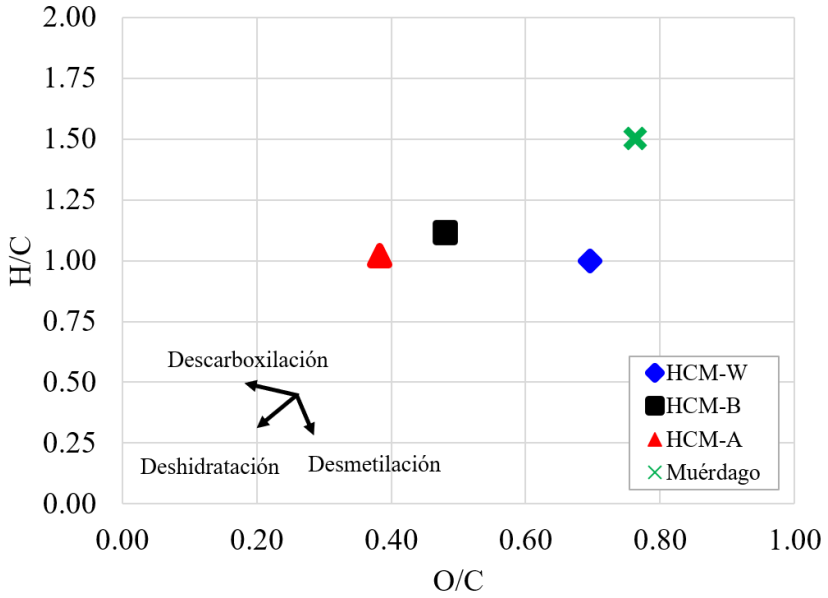


Figura 3. Diagrama de Van Krevelen para HC sintetizados en distintos medios y materia prima.

Las 3 muestras presentaron disminuciones similares en la relación H/C; sin embargo, existen diferencias entre las relaciones de O/C. La muestra de HCM-W presentó la menor disminución de la relación O/C, manteniéndose en valores similares a los de la materia prima, sugiriendo que dicho medio favorece principalmente la desmetilación o pérdida de grupos alifáticos en las fibras lignocelulósicas, pero no permite llevar a cabo una carbonización efectiva de la biomasa. Por el contrario, las condiciones de la muestra HCM-A favorecieron en mayor grado los procesos de descarboxilación y deshidratación, disminuyendo ambas relaciones (i.e. H/C y O/C) a la mitad. Este fenómeno también fue observado en el artículo de Zhang et al. (2019) que comparó distintos tiempos de reacción, temperaturas y concentraciones de ácido. Lo que se observó es que las mayores concentraciones de HCl usadas (i.e. 2%) resultaron en un aumento del porcentaje en masa del carbono, lo cual se atribuye a un mayor grado de aromatización en comparación con el resto de los ensayos.

Pruebas de adsorción

La Figura 3 muestra los resultados de remoción de colorante RO84 de los distintos HC a diferentes concentraciones (i.e. de 1 a 10 g L^{-1}). Los HC elaborados en medio alcalino alcanzaron una remoción máxima de 11.31% a una concentración de 10 g L^{-1}, mientras que los de medio neutro obtuvieron remociones de 15.17% a la misma concentración. La diferencia entre ambos puede asociarse con el tamaño de poro de los análisis BET, dado que un diámetro de poro mayor indica una estructura más accesible y adecuada para la adsorción de moléculas de tamaño intermedio como colorantes orgánicos (De Jesús Melchor, 2025). No obstante, la muestra HCM-A obtuvieron una remoción mayor al 15% desde la concentración más baja (i.e. 1 g L^{-1}) y una remoción máxima de 83.08% a 10 g L^{-1}. Los incrementos en los porcentajes de remoción del HC de medio ácido se pueden asociar a una interacción con los grupos sulfonados identificados en el FT-IR de la muestra, dado que se ha

reportado previamente que su incorporación incrementa la adsorción de colorantes catiónicos en la superficie de materiales a base de carbón como el biochar o el hydrochar (Çaglar et al., 2018).

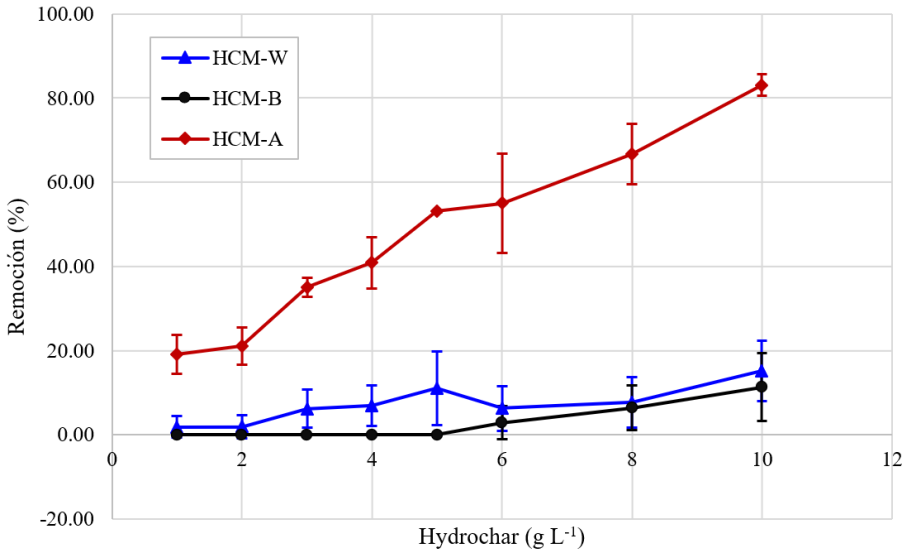


Figura 3. Resultados de la prueba de adsorción de colorante RO84 con distintos HC.

Finalmente, los datos de adsorción del colorante RO84 sobre hydrochar en medio ácido fueron ajustados a los modelos isotérmicos de Langmuir y Freundlich mediante sus formas linealizadas (Figura 4). El modelo de Freundlich presentó el mejor ajuste a los datos experimentales (i.e. R^2 = 0.849), mientras que el modelo de Langmuir mostró un ajuste menor (i.e. R^2 = 0.605). Estos resultados indican que el proceso de adsorción ocurre sobre una superficie heterogénea, con sitios activos de distinta energía. En comparación con los medios alcalinos y neutros, ambos modelos presentaron coeficientes de determinación bajos, demostrando que el tratamiento ácido mejoró el comportamiento de adsorción del hydrochar. Este efecto puede estar asociado a la funcionalización de la superficie, favoreciendo la formación o exposición de grupos funcionales, específicamente los grupos sulfonados previamente descritos, capaces de incrementar las interacciones entre el adsorbente y el colorante.

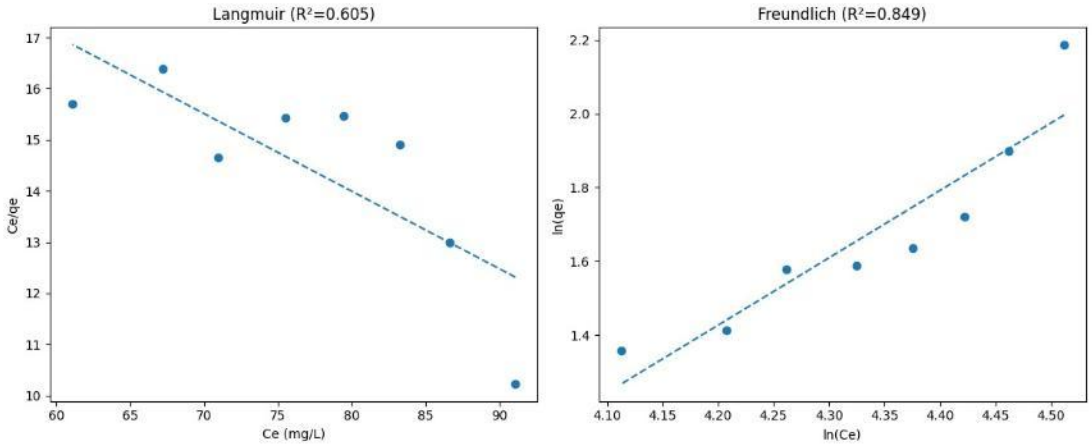


Figura 4. Isotermas de adsorción de Langmuir y Freundlich de la muestra HCM-A.

CONCLUSIONES

A partir de los análisis y pruebas realizados, se concluye lo siguiente:

- Las caracterizaciones realizadas confirmaron que los distintos medios en el proceso de CHT influyen en los resultados de rendimiento y características de los materiales. Los procesos que involucran medios alcalinos y neutros producen un mayor rendimiento de masa y tamaño de poro en el material, pero resultan en una carbonización menos efectiva, según lo mostrado por el diagrama de Van Krevelen. Por otra parte, el FT-IR mostró la incorporación de grupos sulfonados en los HC producidos en medio ácido, sugiriendo una funcionalización *in situ* del material.
- Los experimentos de adsorción e isotermas sugieren que los grupos sulfonados en la superficie del material HCM-A interactúan con el colorante, permitiendo una mayor adsorción de colorantes mediante interacciones iónicas, a pesar de las características superficiales mostradas en el análisis BET.

BIBLIOGRAFÍA

1. Aguilar-Venegas, M., Quintana-Rodríguez, E., Aguilar-Hernández, V., López-García, C. M., Conejo-Dávila, E., Brito-Argáez, L., Loyola-Vargas, V. M., Vega-Arreguín, J., & Orona-Tamayo, D. (2023). Protein Profiling of Psittacanthus calyculatus during Mesquite Infection. Plants, 12(3). https://doi.org/10.3390/plants12030464
2. Ali, R., Aslam, Z., Shawabkeh, R. A., Asghar, A., & Hussein, I. A. (2020). BET, FTIR, and RAMAN characterizations of activated carbon from waste oil fly ash. Turkish Journal of Chemistry, 44(2), 279–295. https://doi.org/10.3906/KIM-1909-20
3. Al-Labadi, I. G., Shemy, M. H., Ghidan, A. Y., Allam, A. A., Kálmán, H. M., Ajarem, J. S., Luo, J., Wang, C., & Abukhadra, M. R. (2023). Insight into the effects of H2SO4 and HNO3 acidification processes on the properties of coal as an enhanced adsorbent for ciprofloxacin residuals: Steric and energetic studies. Frontiers in Chemistry, 11. https://doi.org/10.3389/fchem.2023.1130682
4. Ávila-Hernández, C. A., Rojas-Raya, M. A., Quintana-Rodríguez, E., Ramírez-Chávez, E., Molina-Torres, J., Orona-Tamayo, D., & Lozoya-Gloria, E. (2025). Host defense responses of mesquite (Prosopis laevigata , Fabaceae) trees against the mistletoe (Psittacanthus calyculatus , Loranthaceae) during the early stage of infection . Plant and Cell Physiology. https://doi.org/10.1093/pcp/pcaf142
5. çaglar, E., Donar, Y. O., Sinag, A., Biro Gul, I., Bilge, S., Aydincak, K., & Pliekhov, O. (2018). Adsorption of anionic and cationic dyes on biochars, produced by hydrothermal carbonization of waste biomass: Effect of surface functionalization and ionic strength. Turkish Journal of Chemistry, 42(1), 86–99. https://doi.org/10.3906/kim-1704-12
6. Campos, J. L. B., Pinheiro, P. H. L., da Silva, R. M., Carvalho, C. T., Trindade, M. A. G., & Rodrigues, R. (2025). Disclosing surface functionality evolution in H2SO4-assisted hydrothermally carbonized lignocellulosic precursors: Deciphering the roles of lignin and cellulose. Fuel, 382. https://doi.org/10.1016/j.fuel.2024.133610
7. Danso-Boateng, E., Ross, A. B., Mariner, T., Hammerton, J., & Fitzsimmons, M. (2022). Hydrochars produced by hydrothermal carbonisation of seaweed, coconut shell and oak: effect of processing temperature on physicochemical adsorbent characteristics. SN Applied Sciences, 4(8). https://doi.org/10.1007/s42452-022-05085-x
8. De Jesús Melchor, J. I. (2025). Obtención y caracterización de hydrochar a partir de PET y muérdago. CIATEC A.C.
9. Hayoun, B., Escudero-Curiel, S., Bourouina, M., Bourouina-Bacha, S., Angeles Sanromán, M., & Pazos, M. (2022). Preparation and characterization of high performance hydrochar for efficient adsorption of drugs mixture. Journal of Molecular Liquids, 353, 118797. https://doi.org/10.1016/j.molliq.2022.118797
10. Kozyatnyk, I., & Yakupova, I. (2025). Impact of Chemical and Physical Treatments on the Structural and Surface Properties of Activated Carbon and Hydrochar. ACS Sustainable Chemistry and Engineering, 13(6), 2500–2507. https://doi.org/10.1021/acssuschemeng.4c09189
11. Medina-Ganem, L. F., Valencia-Espinoza, N., Bautista-Peñuelas, E., Medina-Ganem, R. E., Vega-Rios, A., Peña-Cruz, M. I., Bandala, E. R., Quevedo-Castro, A., Pacheco-Álvarez, M., &

Rodriguez-Narvaez, O. M. (2026). Comparative Life Cycle Assessment of Acid-Activated Hydrochar Under Different Feedstocks. Processes, 14(8), 1200. https://doi.org/10.3390/pr14081200

12. Naeem, M. M., Kousar, S., Jiang, Y., Fan, M., Stelgen, I., Zhang, S., & Hu, X. (2026). Influence of externally added organic or inorganic acids on evolution of property of hydrochar from hydrothermal carbonization of potato peel. Biomass and Bioenergy, 204. https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2025.108393
13. Nguyen, D. H., Tran, H. N., Chao, H. P., & Lin, C. C. (2019). Effect of nitric acid oxidation on the surface of hydrochars to sorb methylene blue: An adsorption mechanism comparison. Adsorption Science and Technology, 37(7–8), 607–622. https://doi.org/10.1177/0263617419867519
14. Ogunleye, A., Flora, J., & Berge, N. (2024). Life Cycle Assessment of Hydrothermal Carbonization: A Review of Product Valorization Pathways. https://doi.org/10.3390/agronomy
15. Pierpaoli, V., Grilc, M., Tofani, G., Likozar, B., Jasiukaitytė-Grojzdek, E., Segoloni, E., Barbanera, M., & Romagnoli, M. (2025). Lignin Derivatives in Chestnut Wood Hydrochar: Mild Solvolysis and Characterization. ChemPlusChem, 90(5). https://doi.org/10.1002/cplu.202400697
16. Rasheed, H. A., Adeleke, A. A., Nzerem, P., Olosho, A. I., Ogedengbe, T. S., & Jesuloluwa, S. (2024). Isolation, characterization and response surface method optimization of cellulose from hybridized agricultural wastes. Scientific Reports, 14(1). https://doi.org/10.1038/s41598-024-65229-4
17. Rodriguez-Narvaez, O. M., Nadarajah, K., Suarez-Toriello, V. A., Bandala, E. R., & Goonetilleke, A. (2023). Engineered hydrochar production methodologies, key factors influencing agriculture wastewater treatment, and life cycle analysis: A critical review. Journal of Water Process Engineering, 56, 104483. https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2023.104483
18. Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturale. (2018, December 29). Cuidado con el muérdago, puede terminar con tus árboles.
19. Valencia-Espinoza, N., Abreu-Naranjo, R., Medina-Ganem, L. F., Medina-Ganem, R. E., Méndez-Landin, F. G., Vega-Rios, A., Quevedo-Castro, A., Picos-Benítez, A. R., Bandala, E., & Rodríguez-Narvaez, O. M. (2025). Functionalized Agave Bagasse Hydrochar for Reactive Orange 84 Removal: Synthesis, Characterization, and ANN–GA Optimization. Processes, 14(1), 10. https://doi.org/10.3390/pr14010010
20. Zhang, Y., Jiang, Q., Xie, W., Wang, Y., & Kang, J. (2019). Effects of temperature, time and acidity of hydrothermal carbonization on the hydrochar properties and nitrogen recovery from corn stover. Biomass and Bioenergy, 122, 175–182. https://doi.org/10.1016/j.biombioe.2019.01.035

EFECTO DEL TIEMPO DE MOLIENDA SOBRE EL DOPAJE DE ZnO CON Er

Fabian Mendoza Hernández[1], Erasto Vergara Hernández[2], Ana Karen Acero Gutiérrez[3], Carlos Felipe Hernández Fuentes[3], María Luz Carrera Jota[4], Raúl Ángeles Santana[2] y Fátima Esther González Hernández[2].

[1]Instituto Poliécnico Nacional, [2]Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingeniería Campus Hidalgo IPN, [3]ESIME Zacatenco IPN, [4]Escuela Nacional de Ciencias Biológicas IPN.
fabianmendozah@gmail.com

RESUMEN

El óxido de zinc (ZnO) ha sido estudiado como un potencial candidato para ser usado en dispositivos de última generación, como lo son sensores, celdas solares, diodos emisores de luz y fotodetectores. En la búsqueda de potenciar las aplicaciones del ZnO, diversas líneas de investigación se han centrado en doparlo con distintos cationes, como las tierras raras. En este trabajo se sintetizaron nanopartículas de ZnO dopadas con Er a 4 diferentes tiempos (1, 30, 90 y 360 m) por el método de estado sólido. Los productos de reacción se analizaron por difracción de rayos X (DRX) para determinar la estructura de estas y por microscopía electrónica de barrido (SEM) para determinar el tamaño y distribución de las partículas de los materiales. Los resultados de DRX indican que los átomos de Er han sido agregados a la matriz del ZnO y que el tiempo óptimo de molienda es de 90 minutos. Por su parte, los análisis por SEM muestran la naturaleza policristalina de los materiales.

INTRODUCCIÓN

Actualmente, uno de los materiales más estudiados por su versatilidad debido a las propiedades fisicoquímicas excepcionales que presenta es el óxido de zinc (ZnO). Tanto el ZnO como sus derivados son considerados materiales seguros y amigables con el medio ambiente, presentan características distintivas, como lo son una alta estabilidad química y térmica, fotoestabilidad, amplia capacidad de adsorción, rápida movilidad electrónica, amplia brecha de banda y alta eficiencia de acoplamiento electroquímico [1], [2], [3]. Estas características hacen que el ZnO sea un material atractivo para diversas aplicaciones en medicina, administración dirigida de fármacos, almacenamiento y conversión de energía, catálisis, agricultura (como nanofertilizantes) y conservación y envasado de alimentos. Cabe destacar que uno de los usos más prometedores del ZnO y sus nanoestructuras es en la remediación ambiental, donde funcionan como fotocatalizadores eficientes capaces de transformar contaminantes orgánicos altamente tóxicos en productos más simples y menos tóxicos [4].

Por su parte, elementos de tierras raras es el término colectivo para el erbio, el itrio y los 15 metales lantánidos en la tabla periódica. A pesar del nombre, en realidad no son raros en la corteza terrestre. Debido a sus propiedades fotoeléctricas y magnéticas únicas, se han convertido en "vitaminas industriales" indispensables en las industrias modernas de alta tecnología y se utilizan ampliamente en campos clave como imanes permanentes, láseres, nuevas energías y tecnologías de defensa de vanguardia. Sin embargo, su extracción y utilización a gran escala han provocado un aumento significativo de las concentraciones de estos elementos en el medio ambiente, especialmente en y alrededor de las zonas mineras de tierras raras [5]. El erbio (Er), un elemento de tierras raras de la serie de los lantánidos se encuentra en el sexto periodo de la tabla periódica de elementos químicos y es el undécimo elemento del grupo de los lantánidos (IIIB). En la tecnología moderna, se utiliza principalmente en cerámica, tintes de vidrio, fibras ópticas, láseres y la industria nuclear [6].

Conocidas las características y aplicaciones tanto del óxido de zinc como del erbio, diversas líneas de investigación se han centrado en unir ambos compuestos para potenciar sus aplicaciones. Las combinaciones de ZnO con Er se enfocan en estudiar el efecto del dopaje con Er sobre las propiedades estructurales, morfológicas, ópticas, electrónicas, etc., del óxido de zinc. Se han

empleado diversos métodos de síntesis para poder llevar a cabo la unión del Er en la red cristalina del óxido de zinc, basándose principalmente en ocupar las vacancias que el ZnO tiene en su red [7].

El método de síntesis desempeña un papel decisivo en la determinación de las propiedades fisicoquímicas y el rendimiento de adsorción de las nanopartículas de ZnO. Convencionalmente, la preparación de las nanopartículas de ZnO se ha realizado mediante varios métodos como la combustión, el sol-gel y los métodos hidrotermales. Estos métodos suelen implicar productos químicos peligrosos, alto consumo energético y generar residuos ambientalmente persistentes, lo que genera preocupaciones sobre sostenibilidad y seguridad [3]. Pero, recientemente, las estrategias empleadas para la fabricación de materiales de ZnO son la co-precipitación y la síntesis verde [2]. Los enfoques de síntesis verde utilizan recursos amigables con el medio ambiente, incluso sin el uso de disolventes, tal es el caso de la molienda mecánica o mecanosíntesis.

Dentro de los métodos de síntesis verde, la molienda mecánica permite la mezcla entre componentes en polvo, se da cuando la mezcla queda atrapada en las colisiones entre las bolas y las paredes del recipiente en el que se encuentran los componentes. Así, se rompen los enlaces y se crean nuevos para llevar a cabo el dopaje del óxido. Normalmente se utilizan bolas de acero endurecido, templado o inoxidable, aunque también pueden ser de distinto material, inerte y de resistencia a los impactos.

Uno de los aspectos que más interés genera a la hora de llevar a cabo la síntesis de materiales de ZnO es poder modular sus dimensiones. Los factores que influyen en el tamaño, la morfología, la superficie y el crecimiento de las nanopartículas de ZnO son los compuestos químicos precursores, el medio disolvente, las condiciones físicas, la duración de la reacción y la relación de mezcla [2].

PARTE EXPERIMENTAL

En la síntesis de los nanomateriales, se empleó óxido de zinc (ZnO), con tamaño de partícula de 60 nm (marca XFNANO, 99% de pureza) y óxido de erbio (Er_2O_3) con tamaño de partícula de 25 nm (marca CHANGSHA EASCHEM, 99% de pureza). El procedimiento de la mecanosíntesis de la mezcla de ZnO con el 3% peso de Er^{3+} se llevó a cabo en un molino de bolas con un cilindro de zirconia (Lab Roll Mill QM-5), las bolas empleadas fueron de 3 tamaños: 25 milímetros, 15 milímetros y 10 milímetros, del mismo material que el cilindro.

En un procedimiento típico, 9.7 g de ZnO se mezclaron con 0.3 g de Er_2O_3; posteriormente se vaciaron dentro de un cilindro de zirconia; una vez dentro los reactivos se introdujeron al cilindro las bolas de los diferentes tamaños, el cilindro se hizo girar a 400 rpm durante 1m, 30 m, 90 m y 360 m. En todos los casos, se obtuvieron polvos finos de color blanco [8].

Las muestras se analizaron por difracción de rayos X (DRX), empleando un difractómetro Bruker D-8 Advance (λ = 1.5406 Å, Cu-Kα), para determinar el dopaje del ZnO con Er. La morfología de las muestras se estudió utilizando un microscopio electrónico de barrido (SEM, por sus siglas en inglés) Quanta 3D FEG-FEI.

RESULTADOS

Los patrones de difracción de rayos X de las muestras de ZnO dopado con Er al 3% en peso para los cuatro diferentes tiempos de molienda se presentan en la Figura 1. Los planos 100, 002 y 101 revelan la presencia de una estructura cristalina tipo wurtzita en el ZnO dopado con Er. Dichos planos coinciden con los del compuesto original reportado de óxido de zinc (datos JCPDS de ZnO, tarjeta n.° 89-1397). Cerca de los 30° en el ángulo de Bragg, se observa un pico en los patrones de difracción que podría estar asociado con el Er [8]. En primera instancia, no parece haber relación entre el tiempo de molienda y la cantidad de Er^{3+} dopada al ZnO, es decir, la cantidad de Er unida a la red cristalina del ZnO no varía a lo largo del tiempo de síntesis. Por otro lado, se han reportado cambios significativos en la red cristalina del ZnO por acción del Er3+ cuando la cantidad de éste último supera el 4% en peso [9]. En este trabajo se determinó el tamaño de cristalita empleando la ecuación de Debye-Scherrer:

$$D = \frac{k\lambda}{\beta \cos\theta}$$

Donde:
D = tamaño de cristalita, en nm
k = constante igual a 0.9
λ = longitud de onda de los rayos X incidentes (0.1540 nm)
θ = ángulo de Bragg
β = ancho medio integral

Los tamaños promedios de cristalita calculados fueron de 26.91 nm para 1 minuto, 26.97 nm para 30 minutos, 26.90 nm para 90 minutos y de 28.01 nm para 360 minutos de molienda.

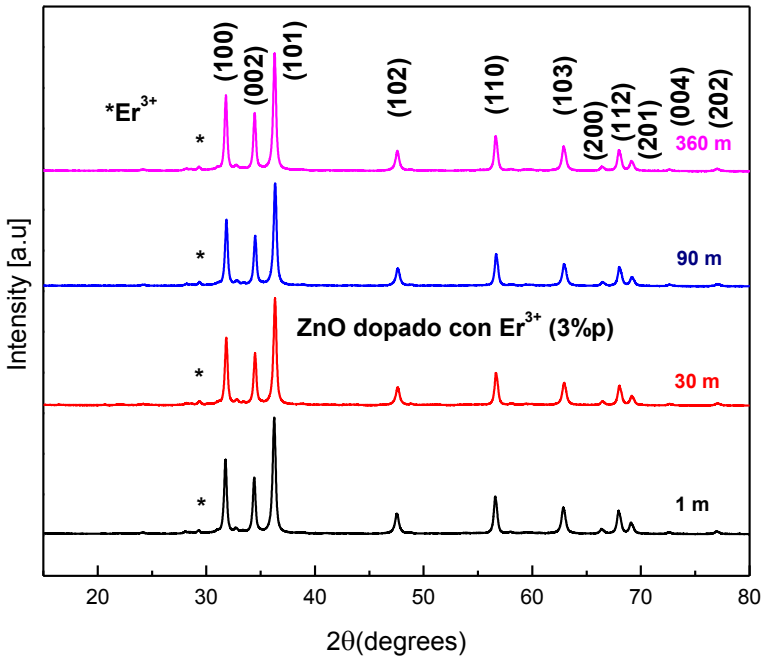


Fig. 1 Patrones de difracción de Rayos-X de ZnO dopado con 3% Er a diferentes tiempos de molienda.

La figura 2 muestra las imágenes de los análisis por SEM. Si bien a través de las imágenes del microscopio electrónico de barrido no permiten distinguir los átomos de Er3+ de la matriz del ZnO, nos permiten ver en cambio la morfología de las muestras sintetizadas. La morfología de las cuatro muestras obtenidas es granular. De igual manera, es posible observar aglomeraciones irregulares en cada una de las muestras. Las partículas que se observan tiene tamaños que oscilan entre los 40 – 50 nm, con algunas excepciones de nanopartíçulas que llegan a tener hasta 100 nm de tamaño. Los tamaños más uniformes de las partículas se pueden apreciar en los tiempos más altos de molienda (90 y 360 minutos).

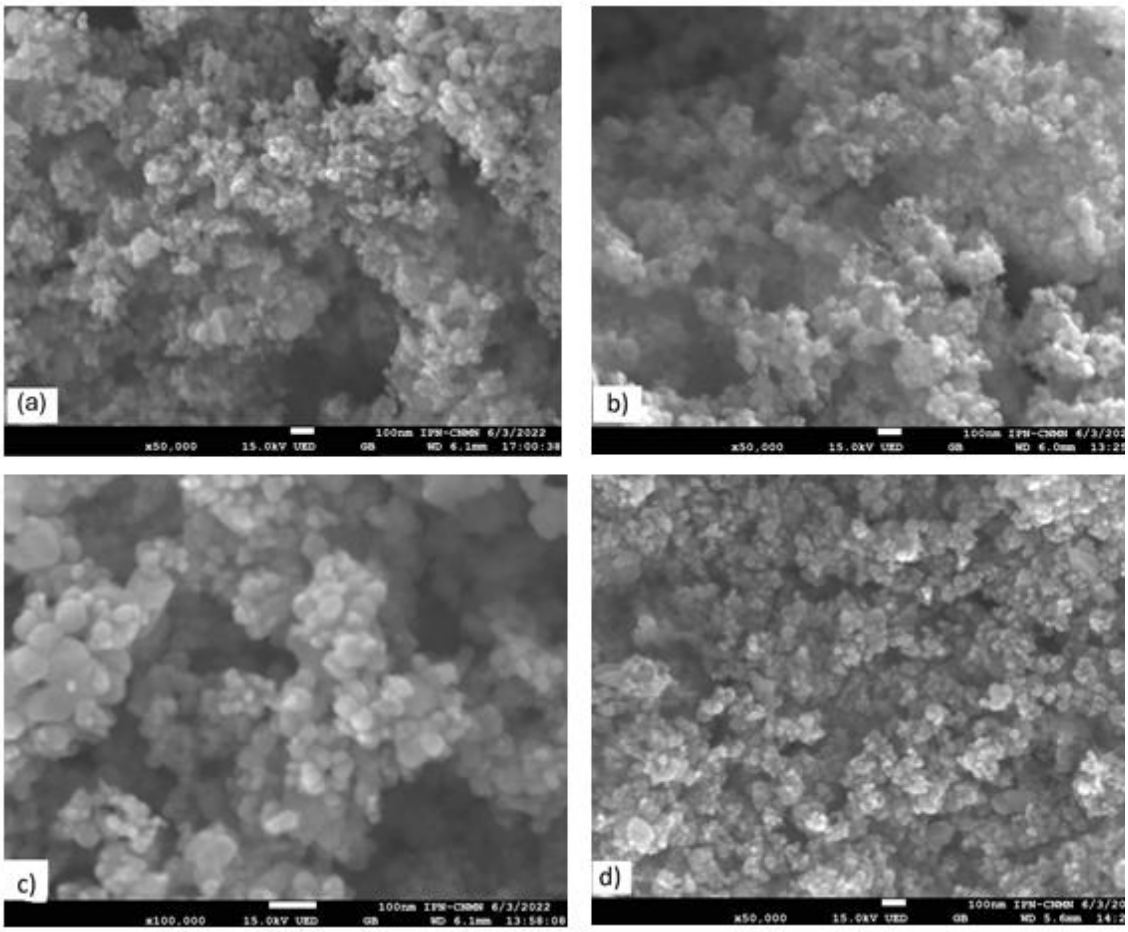


Fig 2. Imágenes SEM de ZnO +3% en peso de Er_2O_3 obtenido después de MP con tiempos de a) 1 minuto, b) 30 minutos, c) 90 minutos y d) 360 minutos**.**

Por otro lado, en la Figura 3 se muestra la distribución de los distintos tamaños de partícula visualizados y medidos para cada muestra a través del microscopio electrónico de barrido. Las gráficas muestran tamaños uniformes de partícula en cada muestra, con tamaños ligeramente mayores en la muestra de 360 minutos.

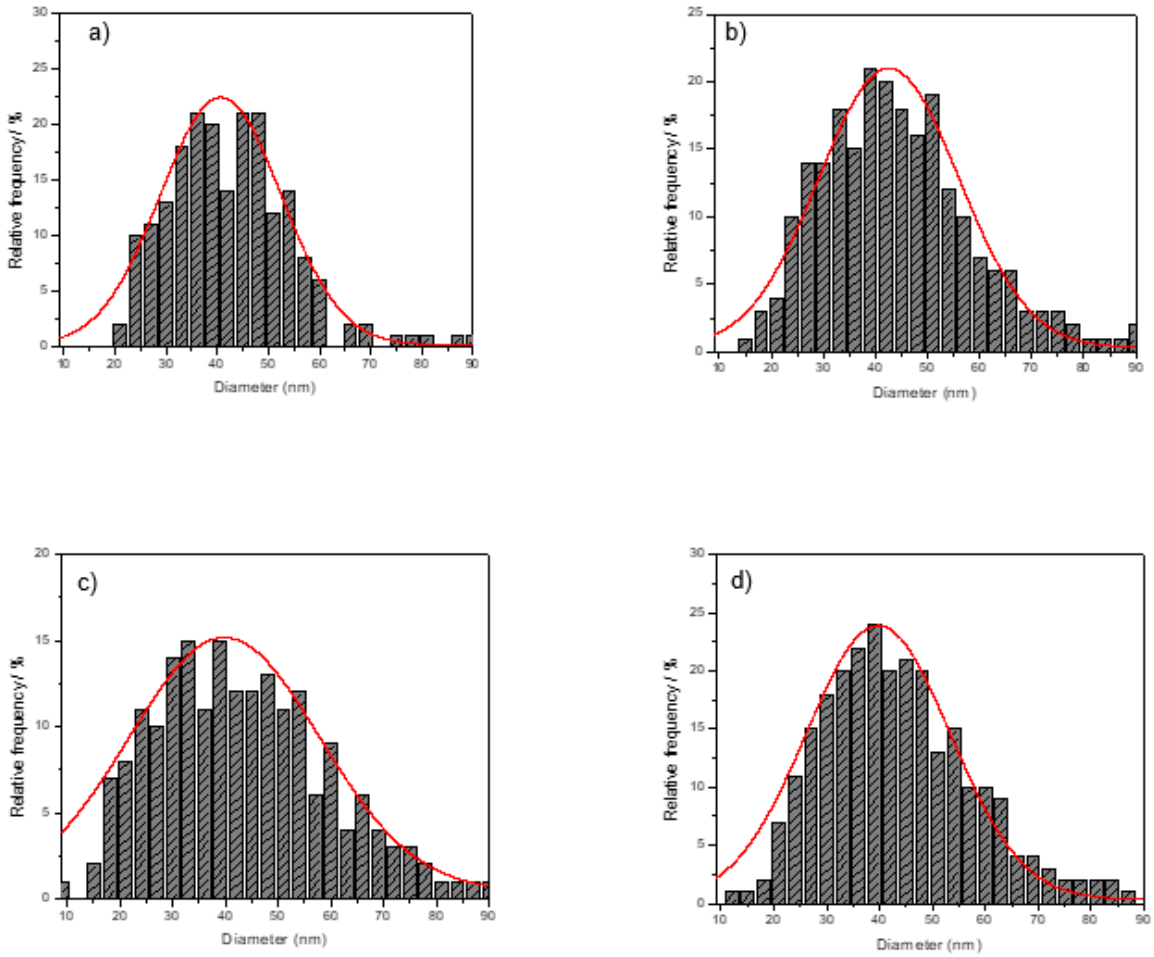


Fig. 3 Distribución de diámetros de ZnO + 3% en peso de Er_2O_3 obtenido después de molienda con tiempos de a) 1 minuto, b) 30 minutos, c) 90 minutos y d) 360 minutos.

CONCLUSIONES

En este trabajó se realizó la síntesis por molienda mecánica de nanopartículas de ZnO dopadas con Er^{3+}al 3% en peso Los tiempos de molienda fueron de 1 minuto, 30 minutos, 90 minutos y 360 minutos. Los polvos obtenidos fueron analizados por DRX y por SEM. Los análisis por DRX indican que el tiempo de molienda no afecta a la incorporación del Er a la red cristalina del ZnO, es decir, se detectaron iones de Er3+ en la red cristalina del ZnO pero no hubo un incremento de éste a medida que el tiempo de molienda aumentó. Por su parte, las imágenes del microscopio electrónico de barrido indican que existe un tamaño de partícula uniforme en las muestras sintetizadas, con aglomeraciones irregulares en cada una de ellas, lo que puede influir directamente en las aplicaciones de las muestras al tener un arreglo no uniforme de los sitios de contacto.

BIBLIOGRAFÍA

[1] S.R. Alhamdany, Q.F. Alsalhy, A.K. Hassan, S. Al-Saadi, H. Meskher, R.A. Al- Juboori, et al., "Eco-friendly synthesis of metal oxide nanoparticles (ZnO, MgO and CuO) for efficient water purification: a review", Desalination, 51, 2026, pp 1-31.

[2] A. Yadav, R. Langyan, R. Dhankhar, "A review on the fabrication and applicability of ZnO nanoparticles for adsorption of heavy metals from wastewater: a prospect towards sustainability", Next Sustain. 7, 2026, pp 1-14.

[3] N. Charoenpak, J. T-Thienprasert, N. Pattarapipatkul, P. Keawkerd, S. Sirikantaramas, N. Panjaworayan T-Thienprasert, et al., "Dual antibacterial and selective anticancer activities of biogenic ZnO nanoparticles from durian flower waste: impact of surface phytochemicals", Results Chem. 26, 2026, pp 1-11.

[4] O. Makota, D. Jáger, A. Zubrik, M. Lisnichuk, O. Bondarchuk, D. M. Behunová, E. Dutková, I. Saldan, I. Melnyk, "Tuning ZnO morphology for enhanced UV photodegradation of ofloxacin", Results in Chemistry, Vol. 27, 2026, pp 1-18.

[5] X. Ye, M. Li, H. Wang, S. Liu, S. Xiao, W. Yuan, Y. Zhao, K. Zhong, "Rare earth element erbium induces hepatotoxicity in zebrafish", Comparative Biochemistry and Physiology Part C: Toxicology & Pharmacology, Vol. 303, 2026, pp 1-10.

[6] J.P. Temga, E. Sababa, L.E. Mamdem, M.L. Ngo-Bijeck, P.T. Azinwi, N. Tehna, P.Z. Zame, V.L. Onana, J.P. Nguetnkam, L.D. Bitom, P.D. Ndjigui, "Rare earth elements in tropical soils, Cameroon soils (Central Africa)", Geoderma Regional, V. 25, 2021, pp 1-23.

[7] J. Cajzl, P. Nekvindová, K. Jeníčková, A. Jagerová, P. Malinský, Z. Remeš, N. Neykova, Y.Y. Chang, J. Oswald, U. Kentsch, A. Macková, "Erbium-ion implantation of single- and nano-crystalline ZnO", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, Vol. 464, 2020, pp 65-73.

[8] F. Mendoza-Hernández, E. Vergara-Hernández. G. Herrera-Cortez, J.A. Andraca-Adame, I. Mendoza-Paz, "Luminescent and structural properties in the mixture of ZnO and europium nanostructures", MRS Advances, 2026.

[9] R. John and R. Rajakumari, "Synthesis and characterization of rare earth ion doped nano ZnO", Nanomicro Lett., Vol. 4, 2, 2012.

BIOSILICIFICACIÓN ARTIFICIAL DE ORGANISMOS: CONSERVACIÓN Y REPLICACIÓN DE ESTRUCTURAS BIOLÓGICAS DESDE LO MICRO A LO MACRO

María Fatima Lopez Núñez[1], Ricardo Navarro Mendoza[2], Liliana Hernández Perales[2], Birzabith Mendoza Novelo [3], Gerardo González García [1]

[1,2]Departamento de Química, División de Ciencias Naturales y Exactas, Universidad de Guanajuato., [3]Departamento de Ingeniería Química, Electrónica y Biomédica, División de Ciencias e Ingenierías, Campus Guanajuato Universidad de Guanajuato.
mf.lopeznunez@ugto.mx

RESUMEN

Los fósiles son registros esenciales para comprender la evolución de la vida en la Tierra, pues conservan estructuras y rastros de organismos[1]. Entre los procesos de fosilización, uno es la silicificación, en la cual la sílice (SiO_2) reemplaza componentes orgánicos al impregnarse y formar una réplica detallada de la estructura original. Este proceso ocurre en aguas con altas concentraciones de sílice, generalmente en forma de ácido silícico (Si $(OH)_4$), que al interactuar con los restos permite su depósito en estructuras celulares y óseas. Actualmente se ha reproducido artificialmente mediante biosilicificación[3], utilizando la técnica sol-gel para obtener geles de sílice a partir de precursores, controlando así la estructura y propiedades del material. Este método posibilita la preservación de muestras biológicas como tejidos, microorganismos e incluso ADN en condiciones controladas.

Para realizar el proceso, se obtiene una solución madre de Si $(OH)_4$ mediante una resina de intercambio catiónico. De esta se prepara una disolución de trabajo con etanol y dimetil sulfóxido. Las muestras, macrométricas o micrométricas, se colocan en contacto con esta disolución durante tiempos determinados según el tipo de muestra. Tras la exposición, se dejan a temperatura ambiente para permitir el secado y condensación de la sílice. Finalmente, se realizan los análisis para caracterizar las muestras.

La silicificación artificial aplicada a diversas muestras biológicas permitió una preservación efectiva de la morfología y composición original. En polen, tejidos vegetales y células se mantuvieron estructuras tridimensionales y detalles finos, con recubrimientos homogéneos confirmados por EDS. Las muestras silicificadas mostraron mayor estabilidad y contraste en SEM respecto a los controles. Asimismo, estructuras delicadas y organismos completos conservaron su forma sin deformación, evidenciando que la eficiencia depende del tipo de muestra y demostrando su capacidad para preservar macro y microestructuras. Los resultados muestran que la silicificación artificial es un método eficaz y versátil para conservar materiales biológicos de distinta naturaleza, manteniendo morfología y composición incluso en estructuras delicadas.

INTRODUCCIÓN

El silicio es el segundo elemento más abundante en la corteza terrestre, representando aproximadamente el 27.7 % de su composición. Aunque se encuentra mayoritariamente en formas cristalinas, solo una fracción es biodisponible en especies reactivas como la sílice amorfa (SiO_2) y los silicatos, las cuales participan en el ciclo biogeoquímico del silicio a través de procesos como la erosión hídrica que genera ácido silícico disuelto ($Si(OH)_4$) (Ellerbrock et al., 2022; Ríos et al., 2020; Singh, 2024)

Este ácido silícico es aprovechado por diversos organismos, desde microorganismos hasta macroorganismos, para formar sílice biogénica amorfa integrada en sus estructuras con gran precisión (Tréguer et al., 2021) Esta capacidad se sustenta en la química del enlace Si–O, donde el

silicio forma tetraedros SiO_4 con geometría sp^3 y una notable flexibilidad en los ángulos Si–O–Si, lo que favorece la formación de redes amorfas estables (Weinhold & West, 2011)

A diferencia de las formas cristalinas de sílice, que requieren condiciones extremas de presión y temperatura (Dapiaggi et al., 2015) la sílice amorfa predomina en sistemas naturales debido a su mayor reactividad y adaptabilidad (Sumper & Kröger, 2004) Esta predominancia está directamente relacionada con el comportamiento del ácido silícico en solución, cuya estabilidad y tendencia a polimerizar dependen fuertemente del pH del medio (Liesegang & Tomaschek, 2020; Lynne & Campbell, 2004)

En ambientes acuáticos, la mayor parte del silicio se encuentra como ácido silícico disuelto, el cual es incorporado por organismos como las diatomeas. Estas algas unicelulares utilizan el silicio para formar frústulas altamente estructuradas, demostrando un control biológico preciso sobre la polimerización del silicio (Annenkov et al., 2013; Marchenkov et al., 2018)).

La eficiencia de estos procesos naturales inspiró el desarrollo de estrategias sintéticas como el método sol–gel, basado en la hidrólisis y condensación de precursores de silicio para formar redes de Si–O–Si (Brinker & Scherer, 1990). Sin embargo, las limitaciones de este método, como la toxicidad de los reactivos y el daño celular, impulsaron la búsqueda de enfoques más suaves y bioinspirados.

En este contexto, las estrategias actuales buscan imitar los principios de la biosilicificación natural mediante el uso de moléculas orgánicas o estructuras biológicas como plantillas, con el objetivo de generar materiales complejos bajo condiciones controladas. De esta manera, se establece un vínculo entre la química tradicional y la biomimética moderna, ampliando las posibilidades en el diseño de materiales funcionales (Dickmeis et al., 2018).

PARTE EXPERIMENTAL

Primera etapa. Síntesis de ácido silícico precursor

El ácido silícico se obtuvo mediante un proceso de intercambio iónico a partir de una solución precursora de silicato de sodio comercial. Brevemente, el silicato de sodio se diluyó en agua destilada en una relación volumétrica adecuada y se hizo pasar a través de una columna de intercambio catiónico de carácter ácido fuerte. El efluente se monitoreó continuamente mediante potenciometría, recolectando la fracción activa de ácido silícico dentro de un rango de pH estrictamente controlado entre 3.0 y 4.0 para asegurar su estabilidad temporal antes de su uso.

Segunda etapa. Silicificación biomimética de matrices orgánicas

Para el proceso de mineralización e infiltración de las muestras biológicas, se evaluó el efecto de la composición del medio y el tiempo de residencia mediante dos enfoques metodológicos:

- Variables de disolución: Se prepararon sistemas ternarios combinando el ácido silícico sintetizado con agentes de penetración celular y codisolventes orgánicos (dimetilsulfóxido y etanol) en dos proporciones distintas, optimizando la afinidad química con la matriz orgánica.

- Protocolos de imbibición: La incorporación de la sílice en los tejidos se llevó a cabo por inmersión completa de las muestras a temperatura y presión ambiente bajo dos regímenes de exposición: un tratamiento a corto plazo (24 h) mediante un único ciclo de exposición estática (Protocolo A), y un tratamiento extendido a largo plazo con renovación periódica del medio precursor para favorecer una silicificación profunda (Protocolo B).

Al finalizar los periodos de incubación, los materiales híbridos resultantes se recuperaron y se sometieron a un proceso de secado en condiciones ambientales controladas para su posterior caracterización estructural.

RESULTADOS

Silicificación comparativa en estructuras biológicas macrométricas

El análisis mediante microscopía electrónica de barrido acoplada a espectroscopía de energía dispersiva de rayos X (SEM-EDS) reveló diferencias significativas en los mecanismos de deposición e infiltración de sílice entre las matrices de estudio.

Para las matrices matrices entomológicas (insectos), se demostró que, si bien la sílice logra depositarse en la superficie del exoesqueleto mediante los tratamientos modulados con DMSO, su incorporación hacia las regiones internas es altamente limitada (Figura 1). Este comportamiento se atribuye a las propiedades fisicoquímicas de la quitina, el biopolímero estructural predominante en dicha matriz. La naturaleza rígida y altamente cristalina de la quitina, estabilizada por una densa red intra e intermolecular de enlaces de hidrógeno, restringe significativamente la permeabilidad macromolecular. Asimismo, el carácter hidrofóbico intrínseco del complejo quitina-proteína-lípido genera una barrera difusiva que dificulta el tránsito de especies polares y oligoméricas del ácido silícico. Aunque este biopolímero posee grupos hidroxilo y amina con afinidad teórica para interactuar con el precursor hidrolizado, la mayoría de estos sitios funcionales se encuentran comprometidos en la arquitectura estructural interna, limitando los centros activos disponibles para la nucleación heterogénea. En consecuencia, la sílice experimenta una polimerización preferencial en la periferia, generando una distribución no uniforme que permanece restringida aun ante incrementos en el tiempo de residencia o en la concentración del agente de penetración (DMSO).

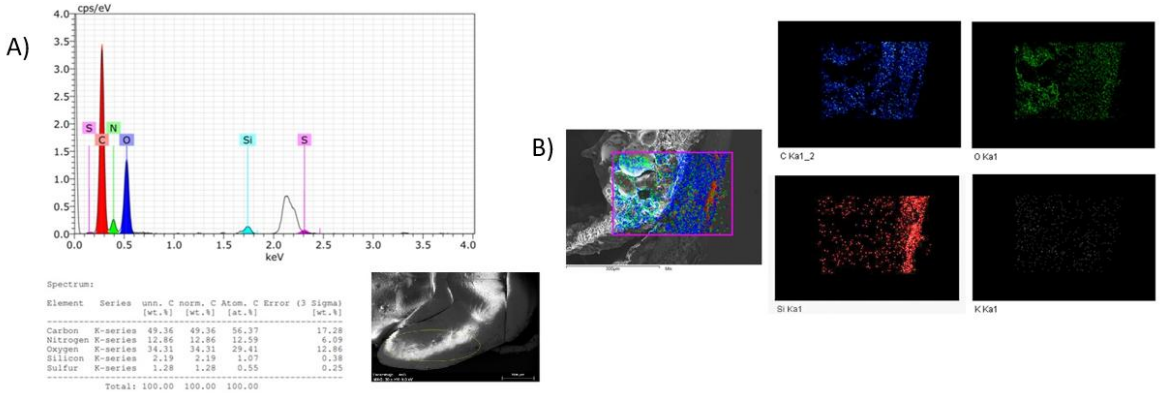


Figura 1. Caracterización química superficial e interna de matrices quitinosas de insectos mediante SEM-EDS. (A) Espectro representativo de EDS en la región externa del exoesqueleto de un Coleoptera. (B) Mapeo elemental representativo que muestra la distribución espacial de silicio (rojo), carbono (azul) y oxígeno (verde) del espécimen *Thasus gigas*.

En contraparte, el análisis SEM-EDS de las matrices vegetales evidenció un proceso de silicificación heterogéneo, pero con mayor grado de difusión Endo tisular (Figura 2). En la periferia celular se cuantificó un incremento notable de silicio, el cual consolida una película continua y morfológicamente homogénea sobre la pared celular externa. Hacia el interior del tejido, aunque el contenido elemental decrece, se constató una penetración parcial y progresiva de la sílice. Este fenómeno se fundamenta en la porosidad intrínseca y el carácter hidrofílico de la pared celular vegetal (constituida por celulosa, hemicelulosas, pectinas y lignina), la cual exhibe una elevada densidad de grupos hidroxilo libres y accesibles en superficie. Estos sitios favorecen el anclaje químico, adsorción y posterior condensación del ácido silícico. Si bien la porosidad tisular facilita el

transporte convectivo y difusivo hacia el lumen, la cinética de condensación y la concentración del precursor limitan la saturación en regiones ultra profundas. Así, la mineralización en el sistema vegetal se define por una cubierta externa robusta acompañada de una gradiente de incorporación interna regulada por la afinidad funcional de la matriz**.**

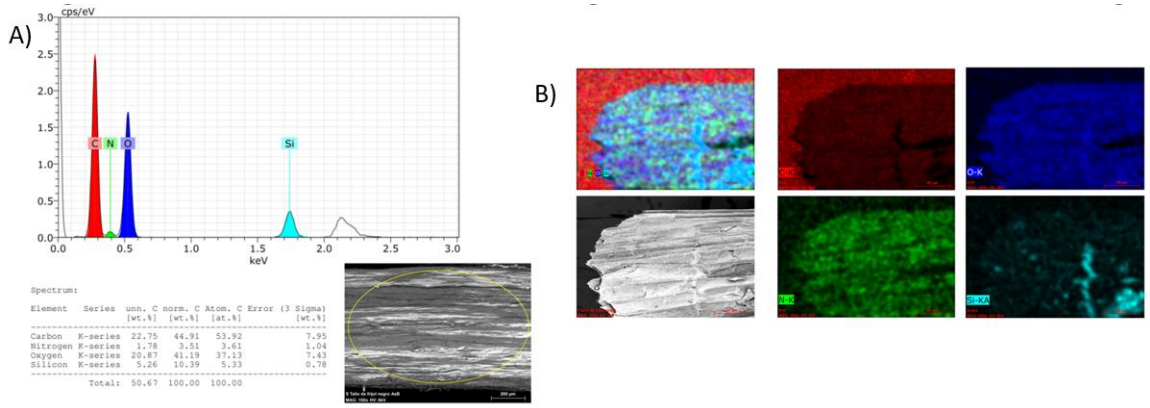


Figura 2. Caracterización química e infiltración en matrices vegetales (tallo de *Phaseolus vulgaris)* mediante SEM-EDS. (A) Espectro representativo de EDS de la superficie externa celular. (B) Mapeo elemental en sección transversal mostrando la distribución tisular interna de carbono (rojo), oxígeno (azul), nitrógeno (verde) y silicio (cian)

Análisis cinético comparativo en los tiempos de silicificación

Los análisis microestructurales y elementales mediante SEM-EDS demostraron que el tiempo de residencia en el medio precursor de ácido silícico ejerce una influencia directa sobre la evolución morfológica superficial y la densidad de distribución del silicio:

Régimen de exposición corta (3 h, Figura 3): Bajo estas condiciones temporales, la topografía de la matriz conserva sustancialmente su arquitectura original, exhibiendo únicamente un sutil incremento en la rugosidad superficial sin evidenciar la consolidación de una película continua. La distribución elemental del silicio se restringe a dominios discretos y puntos aislados, lo cual es característico de las etapas incipientes de adsorción física y nucleación heterogénea. En esta fase cinéticamente temprana, las especies monoméricas u oligoméricas del ácido silícico interactúan de manera localizada con los grupos hidroxilo accesibles de la pared celular, estabilizándose en sitios activos específicos de alta energía, pero sin alcanzar el umbral de percolación necesario para un recubrimiento cohesivo.

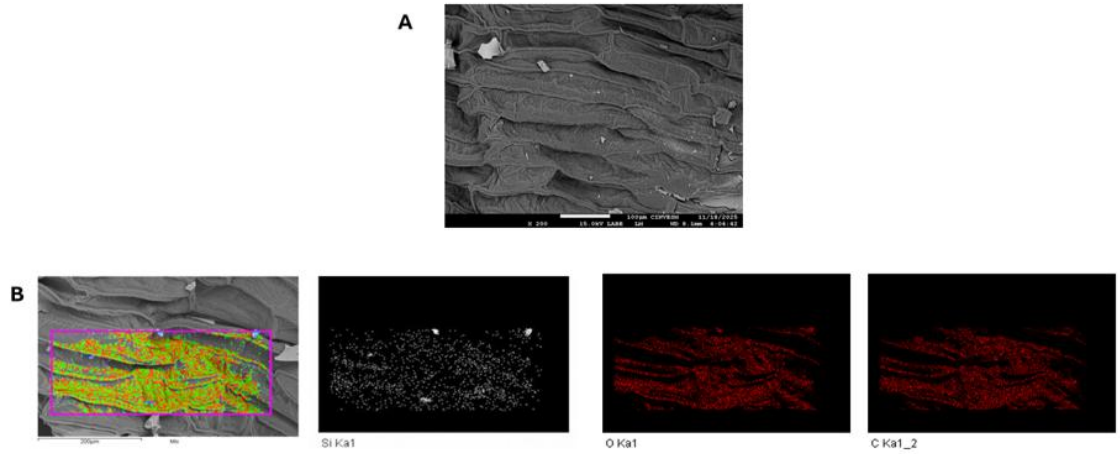


Figura 3. Análisis microestructural y elemental de la matriz vegetal de cebolla (*Allium cepa*) tras un periodo de incubación corto (3 h). (A) Micrografía electrónica de barrido (SEM) que muestra las etapas iniciales de nucleación heterogénea. (B) Mapeo elemental mediante EDS correspondiente a la distribución espacial de carbono (rojo), oxígeno (azul) y silicio (blanco).

Régimen de exposición prolongada (24 h, Figura 4): En contraste, el tratamiento extendido induce una transición hacia una morfología superficial notablemente homogénea, completamente revestida por una película inorgánica continua. El mapeo elemental nanométrico corroboró una dispersión uniforme y de alta densidad del silicio, con intensidades de señal comparables a los elementos estructurales de la matriz. Este comportamiento describe una etapa avanzada de crecimiento y polimerización, donde los núcleos preexistentes experimentan un crecimiento bidimensional y tridimensional mediante reacciones de condensación, estructurando una red de enlaces siloxano (Si-O-Si) que consolida la fase inorgánica sobre el sustrato biológico.

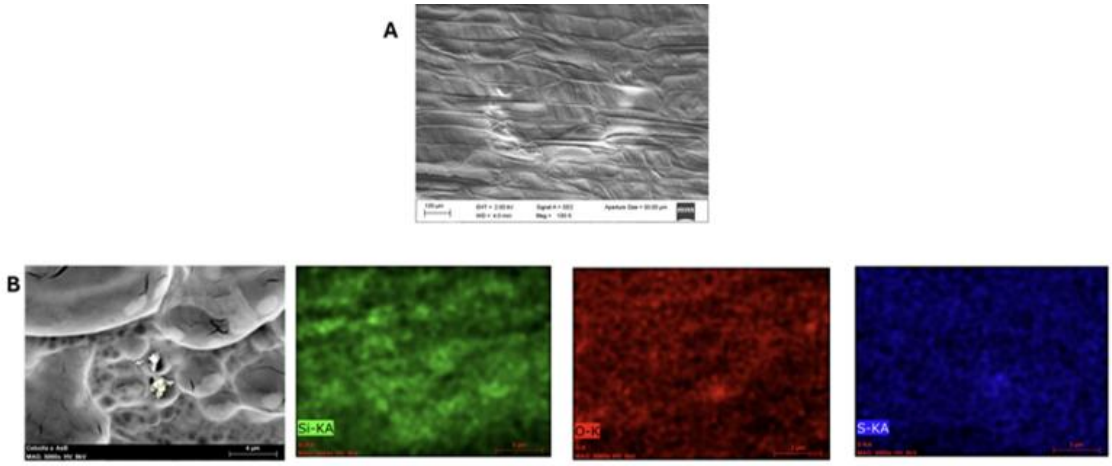


Figura 4. Análisis microestructural y elemental de la matriz vegetal de cebolla (*Allium cepa*) tras un periodo de incubación prolongado (24 h). (A) Micrografía electrónica de barrido (SEM) que muestra la consolidación de la película inorgánica. (B) Mapeo elemental mediante EDS correspondiente a la distribución espacial de azufre (azul), oxígeno (rojo) y silicio (verde)

CONCLUSIONES

El presente estudio demostró la viabilidad de modulares procesos de silicificación biomimética sobre diversos organismos biológicos que abarcan distintas escalas y características estructurales, incluyendo sistemas microscópicos y macroscópicos. En términos generales, los resultados evidenciaron que el empleo de sistemas precursores de ácido silícico funcionalizados con organosolventes permite la incorporación efectiva de sílice en estas matrices sin provocar alteraciones significativas en su morfología externa, consolidando su potencial para la preservación y protección de arquitecturas biológicas complejas.

A partir del análisis comparativo, se determinó que la eficiencia de la mineralización e infiltración endotisular está estrictamente gobernada por las propiedades fisicoquímicas intrínsecas del material biológico, tales como su porosidad, contenido de agua y la disponibilidad de grupos funcionales reactivos. En este sentido, las matrices entomológicas (ricas en quitina) exhiben restricciones difusivas debido a su alta cristalinidad y rigidez estructural, lo que limita la deposición del mineral predominantemente a la periferia del exoesqueleto. En contraparte, las matrices vegetales que ofrecen una plataforma altamente afín para la difusión e interacción química interna, gracias a la porosidad y la elevada densidad de grupos hidroxilo accesibles en su pared celular.

Asimismo, se identificó que el control riguroso de las condiciones experimentales, particularmente la concentración del ácido silícico, la temperatura del sistema y el tiempo de exposición es fundamental para optimizar el grado de preservación alcanzado. Estos hallazgos sientan las bases metodológicas para el diseño controlado de nuevos materiales híbridos bio-inorgánicos.

BIBLIOGRAFÍA

1. Annenkov, V. V., Basharina, T. N., Danilovtseva, E. N., & Grachev, M. A. (2013). Putative silicon transport vesicles in the cytoplasm of the diatom Synedra acus during surge uptake of silicon. Protoplasma, 250(5), 1147–1155. https://doi.org/10.1007/s00709-013-0495-x
2. Brinker, C. J., & Scherer, G. W. (1990). Introduction. In Sol-Gel Science (pp. xvi–18). Elsevier. https://doi.org/10.1016/b978-0-08-057103-4.50006-4
3. Dapiaggi, M., Pagliari, L., Pavese, A., Sciascia, L., Merli, M., & Francescon, F. (2015). The formation of silica high temperature polymorphs from quartz: Influence of grain size and mineralising agents. Journal of the European Ceramic Society, 35(16), 4547–4555. https://doi.org/10.1016/j.jeurceramsoc.2015.08.015
4. Dickmeis, C., Altintoprak, K., van Rijn, P., Wege, C., & Commandeur, U. (2018). Bioinspired silica mineralization on viral templates. In Methods in Molecular Biology (Vol. 1776, pp. 337–362). Humana Press Inc. https://doi.org/10.1007/978-1-4939-7808-3_23
5. Ellerbrock, R., Stein, M., & Schaller, J. (2022). Comparing amorphous silica, short-range-ordered silicates and silicic acid species by FTIR. Scientific Reports, 12(1). https://doi.org/10.1038/s41598-022-15882-4
6. Liesegang, M., & Tomaschek, F. (2020). Tracing the continental diagenetic loop of the opal-A to opal-CT transformation with X-ray diffraction. Sedimentary Geology, 398. https://doi.org/10.1016/j.sedgeo.2020.105603
7. Lynne, B. Y., & Campbell, K. A. (2004). Morphologic And Mineralogic Transitions From Opal-A To Opal-Ct In Low-Temperature Siliceous Sinter Diagenesis, Taupo Volcanic Zone, New Zealand. In Journal Of Sedimentary Research (Vol. 74, Number 4). SEPM (Society for Sedimentary Geology.
8. Marchenkov, A. M., Petrova, D. P., Morozov, A. A., Zakharova, Y. R., Grachev, M. A., & Bondar, A. A. (2018). A family of silicon transporter structural genes in a pennate diatom Synedra ulna subsp. Danica (Kütz.) Skabitsch. PLoS ONE, 13(8). https://doi.org/10.1371/journal.pone.0203161
9. Ríos, E. A., Vega-Baudrit, J. R., Villegas, J. G., & Sánchez, J. A. (2020). Silicon nanostructures in biomedicine and biotechnology. Momento, 60, 18–40. https://doi.org/10.15446/mo.n60.78272
10. Singh, V. (2024). Biogeochemical Cycles. In Textbook of Environment and Ecology (pp. 75–94). Springer Nature Singapore. https://doi.org/10.1007/978-981-99-8846-4_5
11. Sumper, M., & Kröger, N. (2004). Silica formation in diatoms: The function of long-chain polyamines and silaffins. In Journal of Materials Chemistry (Vol. 14, Number 14, pp. 2059–2065). https://doi.org/10.1039/b401028k
12. Tréguer, P. J., Sutton, J. N., Brzezinski, M., Charette, M. A., Devries, T., Dutkiewicz, S., Ehlert, C., Hawkings, J., Leynaert, A., Liu, S. M., Llopis Monferrer, N., López-Acosta, M., Maldonado, M., Rahman, S., Ran, L., & Rouxel, O. (2021). Reviews and syntheses: The biogeochemical cycle of silicon in the modern ocean. Biogeosciences, 18(4), 1269–1289. https://doi.org/10.5194/bg-18-1269-2021
13. Weinhold, F., & West, R. (2011). The nature of the silicon-oxygen bond. Organometallics, 30(21), 5815–5824. https://doi.org/10.1021/om200675d

MAPEO DE DENSIDAD ELECTRÓNICA DEL 1,4-DIÓXIDO DE 6,9-DIHIDROPIRIDO[2,3-G]QUINOXALINA

Kevin Alexis Perez Arechiga, Hiram Hernández López Hiram y Gerardo Martínez Guajardo

Doctorado en Ciencia De la Ingeniería, Universidad Autónoma de Zacatecas,
kevinarechiga@uaz.edu.mx

RESUMEN

Los compuestos 1,4-di-N-óxido de quinoxalina (QdNO) han sido estudiados desde 1943, inicialmente como antibacterianos y aditivos, aunque su toxicidad limitó su uso. Actualmente, se investigan por su potencial antibacteriano, antifúngico, antiinflamatorio y antitumoral, con selectividad hacia células hipóxicas. Sin embargo, su mecanismo de acción sigue siendo incierto, requiriendo estudios más detallados. El presente estudio se centra en el análisis del mapeo de densidad electrónica del compuesto 1,4-dióxido de 6,9-dihidropirido[2,3-g]quinoxalina (QBQO2)(Figura 1), mediante cálculos in silico realizados con el software Gaussian. A partir de la geometría optimizada se generaron archivos de puntos de control (.FChk) y cubos de densidad electrónica utilizando el método Mulliken (pop=MK). El uso de 8 procesadores permitió reducir significativamente el tiempo de cálculo, optimizando la obtención de superficies y contornos de densidad electrónica. Los resultados muestran que la mayor concentración de densidad electrónica se localiza en el grupo difluoroborilo, representado en rojo intenso en los mapas de contorno. Esta región destaca como un sitio de alta reactividad, corroborado por los análisis vibracionales y los desplazamientos químicos de RMN. Asimismo, se observa acumulación de densidad en el carbonilo del éster y en los átomos de flúor, lo que sugiere que estas zonas podrían participar activamente en interacciones intermoleculares. Desde una perspectiva biológica, esta distribución electrónica favorece la interacción con la ADN topoisomerasa, mecanismo clave de acción de las fluoroquinolonas, lo que podría incrementar la capacidad del compuesto para inhibir la replicación bacteriana, como también en su uso como anticancerígeno. La comparación cualitativa con moléculas de referencia permitió situar el comportamiento electrónico de QBQO2 frente a norfloxacino (NOR) y FQB9. NOR mostró regiones negativas cercanas a oxígenos y positivas en hidrógenos del anillo quinolínico, con un valor de densidad electrónica de -7.025e–2 en las zonas más electronegativas. FQB9 presentó acumulación en oxígenos y flúor del éster de boro, con un valor de –7.335e–2, indicando mayor concentración de electrones en comparación con NOR. En QBQO2, las regiones negativas alcanzaron un valor de -6.223e–2, localizadas principalmente en el éster de boro, flúor y radicales del dióxido de quinoxalina, mientras que las regiones positivas fueron más intensas que en NOR y FQB9. Este patrón indica que QBQO2 posee un perfil electrónico diferenciado, con mayor capacidad para interactuar tanto con especies nucleofílicas como electrofílicas. En conclusión, el anillo de dióxido unido a la quinolina influye de manera significativa en la distribución de la densidad electrónica, generando sitios de alta reactividad que podrían potenciar la interacción intermolecular. Estos hallazgos posicionan a QBQO2 como un candidato prometedor en aplicaciones antibacterianas y anticancerígenas, destacando la utilidad del mapeo de densidad electrónica como herramienta predictiva en el diseño de nuevos derivados de quinoxalina.

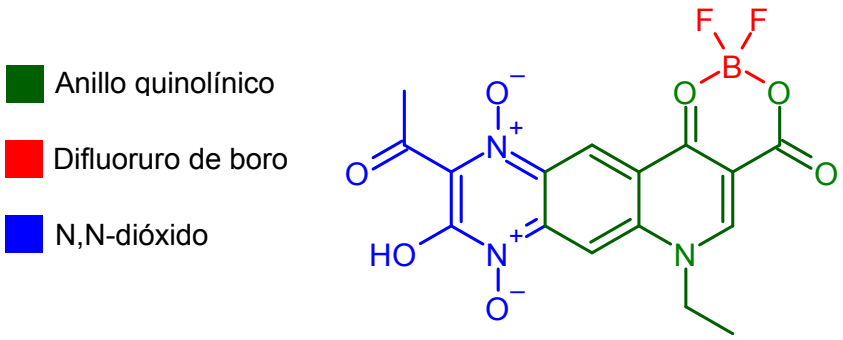


Figura 7. Estructura de molécula propuesta QBQO2

INTRODUCCIÓN

Uno de los mayores problemas de la salud humana es la creciente amenaza de cánceres resistentes a los medicamentos, lo cual hace que cada vez sean menos efectivos. Por tanto, el desarrollo de fármacos nuevos y más eficaces es de gran importancia[1].

Los heterociclos que contienen nitrógeno son estructuras de gran importancia en la Química Medicinal debido a que cuentan con propiedades biológicas importantes, las moléculas capaces de donar electrones mejoran la interacción con proteínas, enzimas y receptores, formando interacciones como puentes de hidrógeno, dipolo-dipolo, interacciones hidrofóbicas, fuerzas de Van der Waals e interacciones de apilamiento, los derivados de N-óxidos se han convertido en estructuras altamente estudiadas en la síntesis orgánica debido a que se conocen como profármacos que interaccionan con enzimas oxidorreductasas que se encuentran en bacterias y tumores.

Los derivados de 1,4-di-N-óxido de quinoxalina (QdNO) (Figura 2) han sido objeto de interés mundial en la Química Medicinal durante varios años debido a su amplia gama de propiedades biológicas. El primer derivado de 1,4-dióxido de quinoxalina en la cual se encontraron propiedades interesantes como posible antibacteriano fue en el año 1943, publicado por MCllwain. El prinicpal uso de la QdNO se enfocó al crecimiento de ganado y antibiótico, pero debido a la investigación continua en la QdNO, se le encontraron efectos interesantes como en antibacteriano en humanos; sin embargo, este tipo de compuestos empezaban a generar un grave efecto hepatotóxico y nefrotóxico, lo cual hizo que se dejara de usar como posible fármaco[2].

La quinoxalina es un compuesto heterocíclico que contiene un anillo de benceno y otro de pirazina. La oxidación de ambos nitrógenos del anillo de pirazina permite la obtención de QdNO, el grupo funcional N-óxido se caracteriza por un enlace covalente coordinado entre nitrógeno y oxígeno.

Las investigaciones actuales de quinoxalina han encontrado que algunos derivados de esta molécula cuentan con propiedades importantes, generando nuevos compuestos capaces de combatir diferentes enfermedades, como antibacteriano, antifúngico, antiinflamatorio, antihistamínico, antioxidante, aditivo nutricional, y anticancerígeno[3].

El uso de QdNO se encuentra muy limitado debido a varios factores, entre ellos la toxicidad y resistencia que se han generado en éstos, otro factor es debido a la falta de información sobre el mecanismo de acción, el cual no se encuentra claro, por lo que dificulta su aplicación, la mayor parte de las investigaciones actuales están basadas en descubrir el blanco biológico, dentro de los estudios que resaltarían su utilidad es generar un detallado SAR y sitio de acción, el cual mejorarían el uso de estos fármacos[4-5].

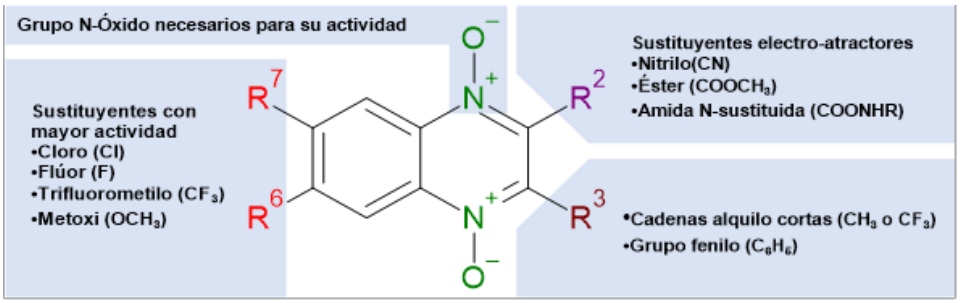


Figura 8. Estudio SAR de la quinoxalina como anticancerígeno[4-5]

TEORÍA

La Química Teórica constituye una rama de la química que se apoya en principios físicos y matemáticos para describir y predecir el comportamiento de los sistemas moleculares. A diferencia de la química experimental, que se centra en la observación y la medición directa, la química teórica utiliza modelos y cálculos computacionales para explicar fenómenos, estimar propiedades y diseñar nuevos experimentos. En este campo, los programas de química computacional como Gaussian son herramientas fundamentales, ya que permiten optimizar geometrías moleculares, calcular energías de reacción, barreras de activación y parámetros termodinámicos, además de predecir espectros vibracionales e información de resonancia magnética nuclear. Estos cálculos ofrecen una visión detallada de los procesos químicos y resultan esenciales para comprender la estabilidad estructural y la reactividad de los compuestos[6].

Dentro de las técnicas de análisis electrónico, el mapeo de densidad electrónica de contorno ocupa un lugar central. Este método parte de geometrías previamente optimizadas y genera representaciones gráficas que muestran cómo se distribuyen los electrones en el espacio molecular. A través de matrices de auto-consistencia (SCF) y métodos de partición de cargas, como el de Mulliken, se asignan densidades parciales a los átomos y se construyen superficies o planos de contorno que reflejan la densidad total de electrones. Dichas representaciones suelen emplear escalas de colores o líneas de contorno para diferenciar regiones de alta y baja concentración electrónica, lo que permite identificar sitios de reactividad y posibles interacciones intermoleculares.

El mapeo de densidad electrónica de contorno es especialmente útil porque proporciona una visión visual y cuantitativa de la distribución electrónica, permitiendo anticipar cómo una molécula puede comportarse frente a otras especies químicas o biológicas. Al mostrar las zonas de mayor acumulación de electrones y las regiones más deficitarias, este análisis ayuda a predecir la capacidad de la molécula para formar enlaces, estabilizar complejos o interactuar con receptores específicos[7-8].

PARTE EXPERIMENTAL

La metodología seguida integra varias etapas de química computacional que permiten caracterizar tanto la geometría como la distribución electrónica de la molécula en estudio. En primer lugar, se construyó la estructura en dos dimensiones mediante ChemSketch, obteniendo su descriptor SMILES, el cual se transformó en un modelo tridimensional con Avogadro y se sometió a pre-optimización con campos de fuerza universales para generar coordenadas cartesianas iniciales. Posteriormente, se realizaron cálculos cuánticos-computacionales en un clúster de alto rendimiento, empleando un nivel de teoría híbrido (PBE0), una base gaussiana extendida (def2-TZVP), correcciones de dispersión empíricas y parámetros de optimización geométrica y frecuencias vibracionales, bajo condiciones estándar de temperatura y presión en vacío.

Con la geometría optimizada se procedió al mapeo de densidad electrónica (MEP) utilizando Gaussian, aplicando el método Mulliken para calcular las cargas parciales y visualizar la distribución de electrones en superficies y contornos. Este análisis permite identificar regiones de alta y baja densidad electrónica, útiles para predecir sitios de reactividad y posibles interacciones moleculares. Finalmente, se realizó una comparación con moléculas de referencia: el norfloxacino, una fluoroquinolona de segunda generación ampliamente utilizada como antibiótico, y el compuesto FQB9, un derivado con boro de interés anticancerígeno. La comparación de los mapas de potencial electrostático molecular entre estas moléculas y la estudiada permite situar su comportamiento electrónico frente a fármacos conocidos, aportando información valiosa sobre su posible mecanismo de acción y capacidad de interacción biológica.

En conjunto, esta metodología combina modelado molecular, optimización cuántica, análisis de densidad electrónica y comparación con compuestos de referencia, ofreciendo una base teórica sólida para comprender la estabilidad estructural y el potencial de interacción de la molécula.

RESULTADOS

Durante el proceso de optimización conformacional de la molécula se registraron variaciones significativas en la energía potencial a lo largo de los distintos pasos de cálculo. En las primeras etapas se observaron máximos energéticos que reflejan una marcada inestabilidad estructural; sin embargo, conforme se ajustaron parámetros geométricos como ángulos de enlace, distancias atómicas y rotaciones de sustituyentes, la energía comenzó a descender progresivamente hasta alcanzar valores mínimos cercanos a cero. Este comportamiento indica que la molécula logró estabilizarse en una conformación de equilibrio, confirmando la validez del procedimiento de optimización, obteniendo las siguientes representaciones estructurales 2D y 3D (Figura 3).

A) B)

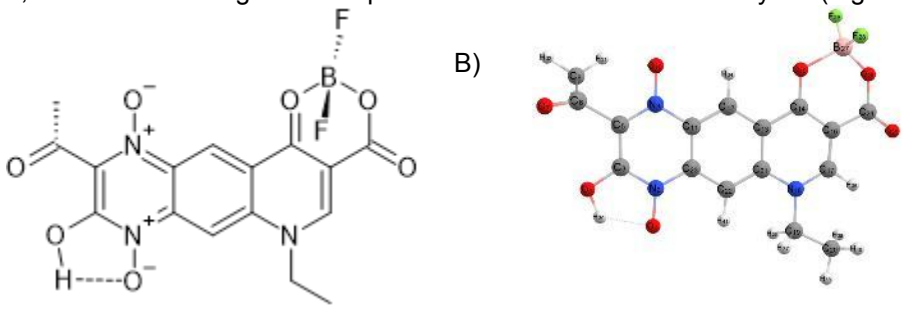


Figura 9. A) Estructura 2D con mayor estabilidad de QBQO2. B) Estructura 3D con mayor estabilidad de QBQO2.

El análisis reveló la formación de puentes de hidrógeno intramoleculares altamente estables, los cuales contribuyen a la rigidez conformacional y a la estabilidad interna de la molécula. Este fenómeno, aunque favorece la estabilidad estructural, podría comprometer la solubilidad en medios acuosos o polares, ya que la capacidad de formar enlaces de hidrógeno con el disolvente se ve reducida. Además, se identificó la formación de un nuevo enlace entre el átomo de boro y oxígeno, con una longitud de 1.569 Å y una geometría tetraédrica cercana a 109.5°. Este enlace mantiene la coplanaridad de la estructura y asegura la estabilidad espacial de los sustituyentes, sin alterar los ángulos tetraédricos característicos de la molécula.

El mapeo de densidad electrónica de contorno (Figura 4), mostró una acumulación notable de electrones en el grupo difluoroborilo y en el carbonilo del éster, regiones que se destacan como áreas de alta reactividad. Las representaciones gráficas evidenciaron estas zonas mediante apilamientos de contornos más intensos, mientras que las regiones menos cargadas se visualizaron con menor apilamiento demostrando menor densidad electrónica.

Finalmente, la comparación con moléculas de referencia permitió contextualizar el comportamiento electrónico de la molécula estudiada. El norfloxacino (NOR), fluoroquinolona de segunda generación

ampliamente utilizada como antibiótico, mostró acumulación electrónica en los oxígenos del anillo quinolínico y regiones positivas en los hidrógenos del mismo anillo, lo que favorece interacciones con especies cargadas negativamente (valor máximo de potencial electrostático: $–7.025 \times 10^{-2}$). El compuesto FQB9, derivado con boro de interés anticancerígeno, presentó una distribución similar, aunque con mayor concentración de electrones en los átomos de oxígeno y flúor del éster de boro ($–7.335 \times 10^{-2}$). En el caso de QBQO2, la densidad electrónica se concentró principalmente en el grupo éster de boro, los átomos de flúor y los radicales del dióxido de quinoxalina, mostrando además una mejor distribución en toda la molécula a comparación de NOR y FQB9 ($–6.223 \times 10^{-2}$). Esta distribución sugiere un potencial de interacción distinto, capaz de favorecer tanto enlaces con especies positivas como con aceptores electrónicos.

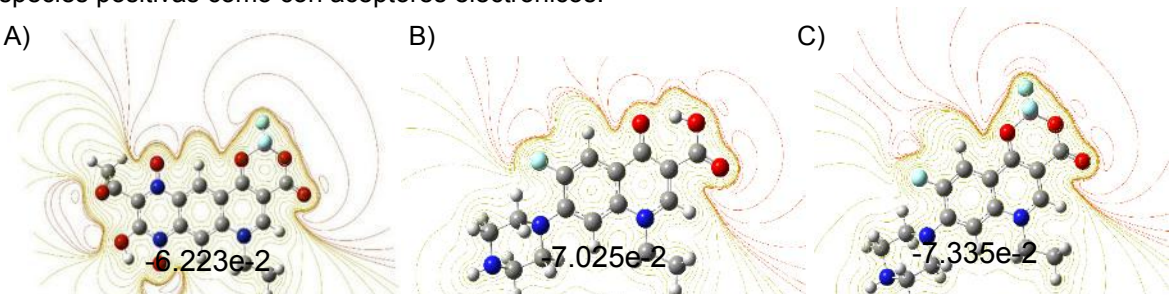


Figura 10. Mapeo de densidad electrónica de contorno con valores máximos de potencial electrostático de sitios nucleofílicos de A) QBQO2, B) Norfloxacino, C) FQB9.

CONCLUSIONES

El análisis de densidad electrónica realizado sobre el compuesto QBQO2 permitió identificar regiones críticas de acumulación y déficit electrónico que determinan su reactividad potencial. La concentración de electrones en el grupo difluoroborilo, el carbonilo del éster y los átomos de flúor señala sitios de alta actividad química, capaces de favorecer interacciones intermoleculares relevantes. Estos hallazgos, junto con la formación de enlaces intramoleculares estables y la geometría optimizada, confirman que la densidad electrónica es un parámetro clave para comprender la estabilidad estructural y el comportamiento del compuesto.

La comparación con moléculas de referencia como norfloxacino y FQB9 evidenció que QBQO2 presenta un perfil electrónico diferenciado, teniendo una mejor distribución electrónica a través de gran parte de su estructura química con regiones negativas y positivas, lo que amplía su capacidad de interacción tanto con especies nucleofílicas como electrofílicas. Este patrón sugiere un potencial superior para generar una mayor numero de interacciones con su blanco biológico, posicionando a QBQO2 como un candidato prometedor en el diseño de nuevos derivados de quinoxalina.

BIBLIOGRAFÍA

1. Gao, F., Zhang, X., Wang, T. & Xiao, J. Quinolone hybrids and their anti-cancer activities: An overview. Eur. J. Med. Chem. Vol. 165, 2019, pp. 59–79.
2. Leyva-Ramos, S. & Pedraza-Alvarez, A. Quinoxaline 1,4-di-N-oxides: a review of the importance of their structure in the development of drugs against infectious diseases and cancer. Med. Chem. Res. Vol. 30, 2021, pp. 1175–1184.
3. Amin, K. M., Ismail, M. M. F., Noaman, E., Soliman, D. H. & Ammar, Y. A. New quinoxaline 1,4-di-N-oxides. Part 1: Hypoxia-selective cytotoxins and anticancer agents derived from quinoxaline 1,4-di-N-oxides. Bioorganic Med. Chem. Vol. 14, 2006, pp.6917–6923.
4. Rivera, G. Quinoxaline 1,4-di-N-Oxide Derivatives: Are They Unselective or Selective Inhibitors? Mini-Reviews Med. Chem. Vol. 22, 2021, pp. 15–25.
5. Cheng, G. et al. Quinoxaline 1,4-di-N-oxides: Biological activities and mechanisms of actions. Front. Pharmacol. Vol. 7, 2016. Pp. 1–21.

6. Korir, B. K., Kibet, J. K. & Ngari, S. M. A review on the current status of dye-sensitized solar cells: Toward sustainable energy. Energy Sci. Eng. Vol. 12, 2024, pp. 3188–3226.
7. Rabah Ali Khalil. A simple approach to quantum chemistry. Nov. Sci. Publ. Inc. Vol. 5, 2020, pp. 119–120.
8. Kargeti, A., Dhar, R. S. & Siddiqui. Design and Exploration by Quantum Chemical Analysis of Photosensitizers Having [D−π-π-A]- and [D-D-triad-A]-Type Molecular Structure Models for DSSC. ACS Omega Vol. 9, 2024, pp. 11471–1147.

EVALUACIÓN ANTIFÚNGICA DE COMPLEJOS TERNARIOS DE Zn(II) BASADOS EN FÁRMACOS AZÓLICOS Y EL LIGANDO IMIDA HBPCA EN *Candida Spp.*

Ing. Carlos Enrique Garibay Martínez, Dr. José Antonio Pérez Tavares, Mtra. María de los Ángeles Sotelo Olague, Mtra. Brenda Mata Ortega y Dra. Rita Judit Patakfalvi.

Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de los Lagos.
carlos.garibay9120@alumnos.udg.mx

RESUMEN

Las infecciones causadas por *Candida spp*. representan una problemática de salud importante debido a su asociación directa con infecciones fúngicas oportunistas por su resistencia a los tratamientos con azoles y complicaciones en pacientes inmunocomprometidos. En este trabajo se evaluó de manera preliminar la actividad antifúngica de complejos ternarios de Zn(II) basados en fármacos azólicos y el ligando imida HBPCA mediante la metodología de difusión de disco. La síntesis de los complejos de coordinación de ketoconazol y clotrimazol se realizó previamente en el Laboratorio de Ciencias Químicas del Centro Universitario de los Lagos de la Universidad de Guadalajara con el propósito de realizar esta evaluación antimicrobiana. Los compuestos fueron probados frente a *Candida albicans*, *Candida parapsilosis* y *Candida krusei*, utilizando como criterio de comparación el diámetro de los halos de inhibición. Los resultados mostraron diferencias entre los fármacos libres y los complejos de coordinación, así como una respuesta variable y dependiente de cada especie evaluada. En general, el complejo de Zn(II) con ketoconazol incrementó el diámetro de inhibición en *C. albicans* y *C. krusei*, mientras que el complejo de Zn(II) con clotrimazol destacó frente a *C. parapsilosis* y *C. krusei*. Estos resultados apoyan el interés de continuar la evaluación de los complejos de coordinación como antifúngicos mediante metodologías antimicrobianas complementarias.

INTRODUCCIÓN

Las infecciones producidas por *Candida spp*. son relevantes en el contexto clínico por su capacidad de ocasionar infecciones superficiales y cuadros sistémicos, particularmente en pacientes inmunocomprometidos o sometidos a procedimientos invasivos (World Health Organization [WHO], 2022). La Organización Mundial de la Salud incluyó a diversos hongos patógenos dentro de una lista prioritaria para orientar investigación, desarrollo y acciones de salud pública; en este contexto, *Candida albicans* se ubica entre los patógenos fúngicos de prioridad crítica, mientras que *Candida parapsilosis* y *Candida krusei* se consideran especies de importancia clínica dentro de los grupos de prioridad establecidos (World Health Organization [WHO], 2022). Fisher et al. (2018) señalan que la emergencia mundial de resistencia a antifúngicos amenaza tanto la salud humana como la seguridad alimentaria. *C. parapsilosis* posee factores de virulencia y mecanismos de resistencia que contribuyen a su relevancia como patógeno oportunista y nosocomial (Branco et al., 2023). Los fármacos azólicos, ejercen su acción principalmente al interferir con la biosíntesis de ergosterol, componente esencial de la membrana celular fúngica. No obstante, el uso prolongado de antifúngicos y la respuesta variable entre especies han impulsado la búsqueda de nuevas estrategias químicas para mejorar la actividad de moléculas con potencial terapéutico (Branco et al., 2023). La coordinación de azoles antifúngicos con metales de transición se ha propuesto como una alternativa de reposicionamiento químico y farmacológico, ya que puede generar derivados con propiedades antimicrobianas modificadas respecto al fármaco libre (Cortat & Zobi, 2023).

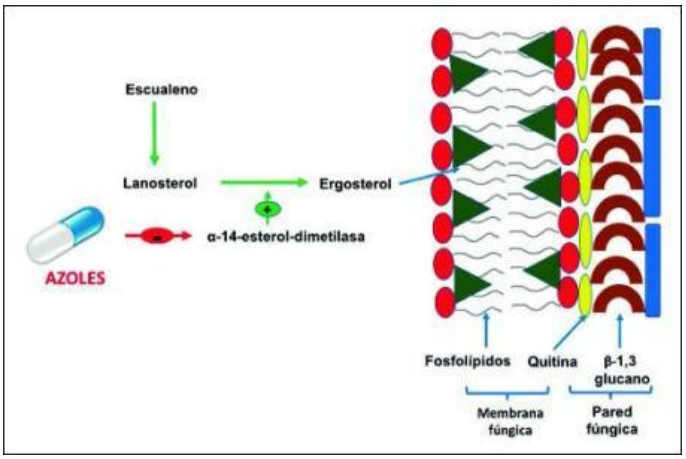


Figura 1. Mecanismo de acción de los azoles: inhibición de la 14α-esterol-demetilasa y alteración de la síntesis de ergosterol. Tomado de Nocua-Báez et al. (2020).

TEORÍA

Con base en la metodología (Clinical and Laboratory Standards Institute [CLSI], 2018), con modificaciones del M44 este se define como una prueba de difusión de disco utilizado como método de susceptibilidad antimicrobiana para observar la capacidad inhibitoria de un compuesto frente a un microorganismo, esta técnica, utiliza una suspensión estandarizada del microorganismo que se distribuye sobre la superficie del agar y posteriormente se colocan los discos impregnados con el compuesto de interés y al encontrarse en incubación , el compuesto difunde desde el disco hacia el medio de cultivo; cuando existe actividad inhibitoria se forma una zona sin crecimiento alrededor del disco el cual es llamado halo de inhibición (Clinical and Laboratory Standards Institute [CLSI], 2018).

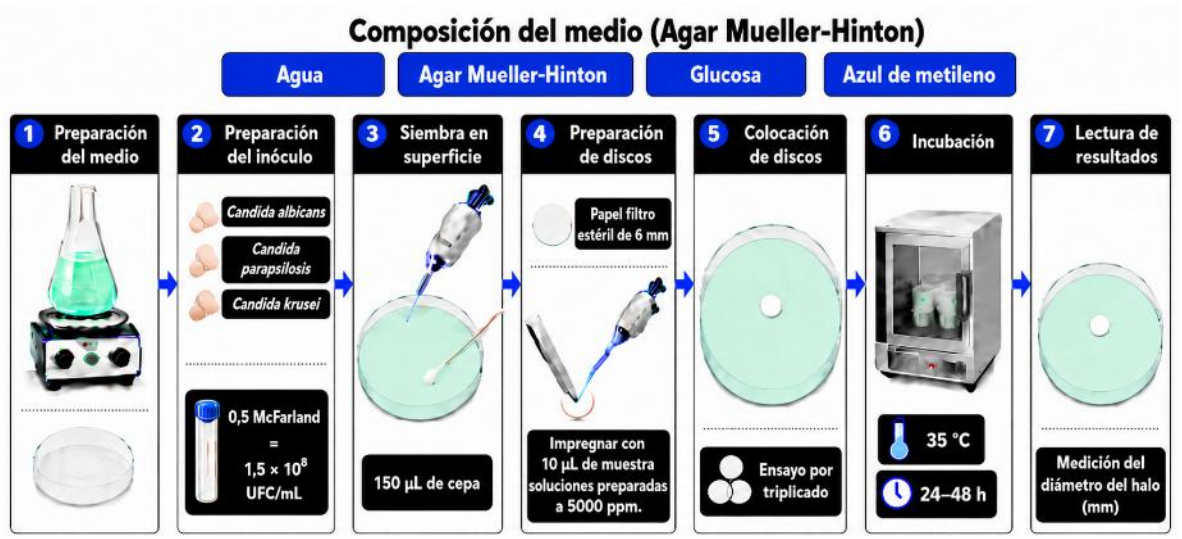


Figura 2. Esquema general del ensayo de difusión en disco para Candida spp., basado en la metodología CLSI M44 para pruebas de susceptibilidad antifúngica en levaduras. El procedimiento fue adaptado para este trabajo mediante la preparación manual de discos de papel filtro estéril de 6 mm impregnados con 10 µL de soluciones preparadas a 5000 ppm, así como la inoculación de 150 µL de suspensión fúngica ajustada a 0.5 McFarland sobre agar Mueller-Hinton suplementado con glucosa y azul de metileno. La lectura se realizó mediante la medición del diámetro del halo de inhibición en milímetros.

PARTE EXPERIMENTAL

Los complejos ternarios de Zn(II) basados en ketoconazol, clotrimazol y el ligando imida HBPCA fueron obtenidos previamente en el Laboratorio de Ciencias Químicas del Centro Universitario de los Lagos, Universidad de Guadalajara. Se trabajó con cepas de *Candida albicans*, *Candida parapsilosis* y *Candida krusei*. Estas cepas fueron reactivadas y sembradas para obtener crecimiento con viabilidad. Posteriormente, se preparó una suspensión celular ajustada por turbidez y se inoculó uniformemente la superficie del medio de cultivo. Una vez sembradas las placas, se colocaron discos impregnados con los compuestos de interés a una concentración de 5000 ppm. Los compuestos de interés ketoconazol (KTZ), clotrimazol (CTZ) y sus respectivos complejos de coordinación de $[Zn(BPCA)(KTZ)]BF_4^-$ y $[Zn(BPCA)(CTZ)]PF_6^-$. Las placas se incubaron bajo condiciones adecuadas para el crecimiento de *Candida spp*. al finalizar el periodo de incubación, se midieron los diámetros de los halos de inhibición en milímetros, los resultados se compararon entre el fármaco libre y su complejo de coordinación correspondiente.

RESULTADOS

La prueba de difusión de disco evidenció actividad inhibitoria de los compuestos evaluados frente a las tres especies de Candida. Los halos de inhibición permitieron observar diferencias entre los fármacos azólicos libres y sus complejos de Zn(II). En general, la respuesta fue dependiente tanto del compuesto como de la especie evaluada. En los datos de la Figura 1 se observa que para el ketoconazol el halo de inhibición fue de 12.00 mm en *C. albicans*, 15.66 mm en *C. parapsilosis* y 10.5 mm en *C. krusei*, al evaluar el complejo $[Zn(BPCA)(KTZ)]BF_4^-$, este presentó halos de 16.83 mm, 15.66 mm y 12.50 mm, respectivamente. Esto indica un aumento del diámetro de inhibición frente a *C. albicans* y *C. krusei*, mientras que en *C. parapsilosis* el valor se mantuvo similar al fármaco libre, por otro lado, en el clotrimazol y su complejo de coordinación $[Zn(BPCA)(CTZ)]PF_6^-$ también el efecto de inhibición fue variable ya que el complejo con clotrimazol mostró el mayor halo frente a *C. parapsilosis*, con un valor de 20 mm y también un incremento en *C. krusei*.

Compuesto	*C. albicans*	*C. parapsilosis*	*C. krusei*	Interpretación
Ketoconazol	12.00 ± 0.00	15.66 ± 0.28	10.5 ± 0.00	Control de Ketoconazol
$[Zn(BPCA)(KTZ)]BF_4^-$	16.83 ± 0.00	15.66 ± 0.28	12.5 ± 0.00	Mayor halo en *C. albicans* y *C. krusei*
Clotrimazol	15.00 ± 0.00	16.0 ± 0.00	11.5 ± 0.00	Control de Clotrimazol
$[Zn(BPCA)(CTZ)]PF_6^-$	14.33 ± 0.00	20.0 ± 0.00	15.0 ± 0.00	Mayor halo en *C. parapsilosis* y *C. krusei*

Tabla 1. Diámetro de inhibición de Candida spp. frente a fármacos azólicos y complejos de Zn(II) mediante difusión de disco.

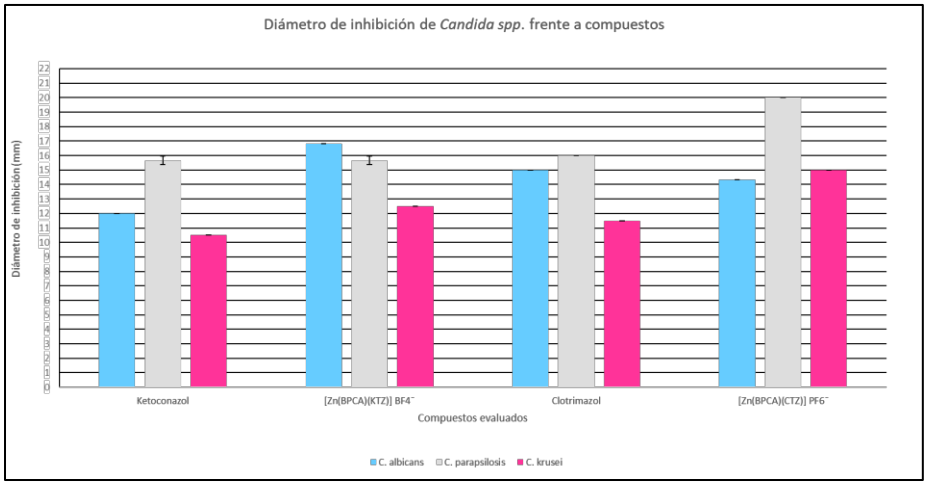


Figura 3. Comparación del diámetro de inhibición de *Candida spp*. frente a ketoconazol, clotrimazol y los complejos de coordinación basados en Zn(II).

Compuesto	*Candida albicans*	*Candida parapsilosis*	*Candida krusei*
Ketoconazol (KTZ)	12.00 mm	15.66 mm	10.50 mm
$[Zn(BPCA)(KTZ)]BF_4^-$	16.83 mm	15.66 mm	12.50 mm
Clotrimazol (CTZ)	15.00 mm	16.00 mm	11.50 mm
$[Zn(BPCA)(CTZ)]PF_6^-$	14.33 mm	20.00 mm	15.00 mm

Figura 4. Halos de inhibición obtenidos por difusión en disco de ketoconazol (KTZ), clotrimazol (CTZ) y sus complejos de coordinación de Zn(II), [Zn(BPCA)(KTZ)]BF_4^- y [Zn(BPCA)(CTZ)]PF_6^-, frente a *Candida albicans*, *Candida parapsilosis* y *Candida krusei*. La línea blanca fue añadida digitalmente para delimitar el halo de inhibición observado en cada placa donde los valores son expresados en milímetros, además de la formación del halo, en varias placas se aprecia crecimiento residual dentro de la zona de inhibición, compatible con el fenómeno de *trailing growth* un comportamiento típico frente a compuestos azólicos, donde puede observarse una inhibición parcial con crecimiento reducido y persistente dentro del área de inhibición. Por ello, este crecimiento residual no se interpretó como ausencia de actividad antifúngica, sino como una respuesta compatible con el comportamiento de los azoles frente a levaduras del género *Candida.*

CONCLUSIONES

La metodología de difusión de disco permitió evaluar la actividad antifúngica de complejos ternarios de Zn(II) basados en ketoconazol, clotrimazol y el ligando imida HBPCA frente a *Candida albicans, Candida parapsilosis* y *Candida krusei*. Los resultados mostraron que la coordinación del complejo puede modificar los resultados inhibitorios, pero cabe mencionar que el efecto depende de la especie evaluada, el complejo [Zn(BPCA)(KTZ)]BF_4^- presentó mayor tamaño en el halo en *C. albicans* y *C. krusei* en comparación con ketoconazol libre, mientras que [Zn(BPCA)(CTZ)]PF_6^- destacó frente a *C. parapsilosis* y *C. krusei*.

BIBLIOGRAFÍA

1. Branco, J., Miranda, I. M., & Rodrigues, A. G. (2023). Candida parapsilosis virulence and antifungal resistance mechanisms: A comprehensive review of key determinants. Journal of Fungi, 9(1), Article 80. https://doi.org/10.3390/jof9010080
2. Clinical and Laboratory Standards Institute. (2018). Method for antifungal disk diffusion susceptibility testing of yeasts (3rd ed., CLSI guideline M44). Clinical and Laboratory Standards Institute.
3. Cortat, Y., & Zobi, F. (2023). Resurgence and repurposing of antifungal azoles by transition metal coordination for drug discovery. Pharmaceutics, 15(10), Article 2398. https://doi.org/10.3390/pharmaceutics15102398
4. Fisher, M. C., Hawkins, N. J., Sanglard, D., & Gurr, S. J. (2018). Worldwide emergence of resistance to antifungal drugs challenges human health and food security. Science, 360(6390), 739-742. https://doi.org/10.1126/science.aap7999
5. Nocua-Báez, L. C., Uribe-Jerez, P., Tarazona-Guaranga, L., Robles, R., & Cortés, J. A. (2020). Azoles de antes y ahora: una revisión. Revista Chilena de Infectología, 37(3), 219–230. https://doi.org/10.4067/S0716-10182020000300219
6. World Health Organization. (2022). WHO fungal priority pathogens list to guide research, development and public health action. World Health Organization. https://www.who.int/publications/i/item/9789240060241

NANOPARTÍCULAS DE SiO_2:Eu^{3+} FUNCIONALIZADAS CON BENZOCAÍNA: CARACTERIZACIÓN Y ESTUDIO DE VIABILIDAD CELULAR

Carlos Felipe Hernández Fuentes[3], Teresita del Refugio Jiminez Romero, Maria Luz Carrera Jota[12*], Ángel de Jesús Morales Ramírez[1], Esli Abigail López Vargas[1], María José Soto Miranda[1]

[1]ESIQIE-IPN, Unidad Profesional Adolfo López Mateo, ENCB[2]. Unidad Profesional Adolfo López Mateos, CINVESTAV-IPN[3].
mcarreraj@ipn.mx

RESUMEN

Uno de los principales desafíos en la atención médica moderna es la baja eficiencia de los sistemas actuales de administración de fármacos. Esto ha generado un creciente interés en portadores alternativos, en particular materiales a base de sílice, debido a su biocompatibilidad, estabilidad química y capacidad de funcionalización superficial. En este estudio, se sintetizaron nanopartículas de sílice dopadas con un 5 % de iones de europio (SiO_2:Eu^{3+}) mediante el método de Stöber, utilizando TEOS como precursor. Se seleccionó el europio por su larga vida útil de fotoluminiscencia, lo que lo hace ideal para aplicaciones de bioimagen.

Las nanopartículas se funcionalizaron con concentraciones variables de benzocaína (25,50,100, 150 y 200 mg), un anestésico tópico de uso común. La espectroscopia IR-FT confirmó la presencia de grupos funcionales característicos, lo que indica una modificación superficial exitosa. El análisis de DRX detectó picos correspondientes tanto a sílice como a benzocaína, lo que respalda aún más la funcionalización. Las imágenes de MEB revelaron aglomerados con forma de escamas, consistentes con la formación de nanopartículas. Las mediciones de fotoluminiscencia mostraron una emisión mejorada a 612 nm, típica de las transiciones de Eu^{3+}. La citotoxicidad in vitro, evaluada mediante el ensayo MTT y Alamar blue , demostró una viabilidad celular superior al 80 %. Estos hallazgos sugieren que las nanopartículas de SiO_2:Eu^{3+} funcionalizadas con benzocaína poseen características prometedoras para su doble funcionalidad como vehículos de administración de fármacos y sondas luminiscentes de bioimagen, lo que representa un avance en el desarrollo de nanomateriales multifuncionales para aplicaciones biomédicas.

INTRODUCCIÓN

En las últimas décadas, el desarrollo de sistemas de administración de fármacos ha revolucionado el tratamiento de diversas patologías [1]. Sin embargo, la efectividad de las terapias convencionales —administradas por vías oral, nasal, tópica o transmucosal— se ve seriamente limitada por una baja biodisponibilidad del compuesto activo, distribución inespecífica, toxicidad en tejidos sanos y respuestas terapéuticas lentas [2]. Para superar estos desafíos, la ingeniería biomédica y farmacéutica ha intensificado el diseño de sistemas de liberación controlada basados en matrices biocompatibles y poliméricas que optimizan la dosificación de manera localizada y sostenida, minimizando los efectos secundarios sistémicos [3].

En este escenario, la nanotecnología juega un papel crucial. Los nanomateriales (1-100 nm) exhiben propiedades ópticas, magnéticas y electrónicas únicas debido a los efectos cuánticos y de superficie que dominan a la nanoescala [4]. Estas características permiten su integración en matrices de sílice, las cuales destacan por su morfología sintonizable y una alta densidad de grupos hidroxilo superficiales ideales para la encapsulación de biomoléculas [5]. Particularmente, los óxidos de tierras raras (lantánidos) como el europio (Eu^{3+}) han emergido como candidatos idóneos para el área de la teranóstica; gracias al blindaje de sus orbitales 4f por las capas $5s^2$ y $5p^6$, presentan líneas de emisión nítidas, estables y de color rojo brillante al ser excitados con luz ultravioleta (UV), lo que los hace excepcionales para el diseño de sondas de bioimagen [6].

A pesar de sus ventajas, el uso de estos sistemas exige una evaluación rigurosa de su biocompatibilidad, citotoxicidad y estabilidad en medios biológicos [7]. En este sentido, la funcionalización química de la superficie es una estrategia clave para mejorar la dispersión de las nanopartículas y optimizar su comportamiento farmacocinético [8]. Entre las rutas de síntesis disponibles, el método Stöber destaca por ser una vía sencilla y eficiente para la obtención de nanoesferas de sílice monodispersas con grupos silanol altamente reactivos y aptos para la modificación superficial [9].

Con base en lo anterior, el objetivo de este trabajo fue sintetizar mediante el método Stober cinco sistemas nanoestructurados de SiO^2:Eu^{3+} funcionalizados con diferentes concentraciones de benzocaína. Los materiales resultantes se caracterizaron y se evaluaron en términos de citotoxicidad en la línea celular de cáncer de mama MDA-MB-231 [10], buscando determinar el impacto de la concentración del modificador en la viabilidad celular y explorar su potencial aplicación como sondas luminiscentes para el diagnóstico por imágenes.

PARTE EXPERIMENTAL

Todos los reactivos empleados en este estudio fueron de grado analítico. Como precursor de silicio para la preparación del sol de sílice se utilizó tetraeilortosilicato (TEOS, 98%). El ácido *p*-aminobenzoico (PABA, 99%) se empleó como materia prima para la síntesis de la benzocaína, mientras que el nitrato de europio pentahidratado ($(Eu(NO_3)_3.5H2O)$, 99.9%) se utilizó como la fuente de dopaje para la matriz de SiO_2. Debido a su excelente miscibilidad tanto con precursores orgánicos como inorgánicos, se eligió etanol absoluto (99%) como disolvente universal en todas las etapas de la síntesis.

Durante la obtención de la benzocaína, el ácido sulfúrico concentrado (H_2SO_4, 98%) actuó como catalizador para promover la reacción de esterificación entre el PABA y el etanol. Por otro lado, el hidróxido de amonio (NH_4OH, 28–30%) se utilizó como catalizador básico en la etapa de hidrólisis-condensación del proceso Stöber para generar el sol de SiO_2. Finalmente, la neutralización de la mezcla de reacción y la estabilización del pH en un rango de 7–8 se lograron mediante el uso de carbonato de sodio anhidro (Na_2CO_3, 99.5%).

Síntesis y Funcionalización de la Benzocaína
La preparación del modificador superficial (benzocaína) se llevó a cabo mediante una reacción de esterificación de Fischer. Una cantidad predeterminada de ácido *p*-aminobenzoico (PABA) se disolvió en etanol absoluto bajo agitación magnética constante. Posteriormente, se adicionó gota a gota ácido sulfúrico concentrado (H_2SO_4) como catalizador. La mezcla se mantuvo bajo reflujo a temperatura controlada para asegurar el desplazamiento del equilibrio hacia la formación del éster.
Una vez completada la reacción, el sistema se enfrió a temperatura ambiente y se neutralizó cuidadosamente mediante la adición controlada de una solución saturada de carbonato de sodio (Na_2CO_3) hasta alcanzar un pH de estabilidad biológica entre 7 y 8. El producto precipitado se lavó repetidamente con agua destilada y se recristalizó para obtener la benzocaína purificada que se emplearía en la posterior funcionalización.

Síntesis de los Sistemas Nanoestructurados de SiO_2:Eu^{3+} (Método Stöber)
Los cinco sistemas nanoestructurados se sintetizaron mediante una modificación del método Stöber, variando sistemáticamente la concentración de benzocaína añadida. En un contenedor sellado, se mezclaron volúmenes controlados de etanol absoluto, agua desionizada e hidróxido de amonio (NH_4OH), este último para fijar las condiciones alcalinas que favorecen la cinética de reacción. Bajo agitación vigorosa, se incorporó la fuente de dopaje ($Eu(NO_3)_3.5H2O$) para asegurar la distribución homogénea de los centros luminiscentes de Eu^{3+} dentro de la futura red vítrea.

A continuación, se añadió el precursor de silicio (TEOS) de forma constante para iniciar los procesos simultáneos de hidrólisis y condensación, dando lugar a la nucleación de las nanoesferas de sílice.

Para la funcionalización *in situ*, se introdujeron las cinco concentraciones distintas de benzocaína previamente sintetizada, permitiendo que el fármaco interactuara químicamente con los grupos silanol (-Si-OH) en crecimiento de la superficie de las nanopartículas. Los soles resultantes se agitaron durante 24 horas, se separaron por centrifugación, se lavaron exhaustivamente con etanol y agua para eliminar remanentes y finalmente se secaron a vacío.

Ensayos de Citotoxicidad *in vitro* (Línea Celular MDA-MB-231)
Para determinar la biocompatibilidad y el potencial de los sistemas como sondas de diagnóstico, se evaluó su citotoxicidad en la línea celular de adenocarcinoma de mama humano MDA-MB-231. Las células se cultivaron en medio suplementado en condiciones estándar de incubación (37°C y 5% CO_2).
Las monocapas celulares se expusieron a diferentes concentraciones de los cinco sistemas nanoestructurados de SiO_2:Eu^{3+}-benzocaína durante un periodo de incubación de 24 horas. La viabilidad celular se cuantificó mediante ensayos colorimétricos estándar (como MTT), midiendo la absorbancia en un lector de microplacas para determinar el porcentaje de supervivencia celular en comparación con los controles negativos (células sin tratamiento), estableciendo así el perfil de seguridad biológica de los compuestos.

RESULTADOS

Análisis de Espectroscopía Infrarroja por transformadas de Fourier
La Figura 1 muestra los espectros de FT-IR de los sistemas SiO_2:Eu_{3+}/Bz_n funcionalizados con diferentes concentraciones de benzocaína (25 -200 mg). La banda cercana a 3560 cm^{-1} se asigna al estiramiento N–H del grupo amino de la benzocaína. Asimismo, la señal a 1400cm^{-1} corresponde al estiramiento del enlace C–N del anillo aromático [5]; su intensidad se incrementa proporcionalmente con la concentración del fármaco, excepto en la muestra SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{150}, la cual exhibe un perfil anómalo entre 1600 y 1200cm^{-1} debido a humedad residual [6].Por otro lado, la banda a 1624cm-1 se atribuye al estiramiento C=O del grupo carbonilo, mientras que las absorciones intensas y asimétricas a 1050 y 570 cm^{-1} confirman la formación de la red vítrea mediante los enlaces siloxano Si–O–Si. El sutil estiramiento a 850 cm-1 se asocia a vibraciones Si–O de la matriz [7].Finalmente, la banda a 3300 cm^{-1} pertenece a los grupos silanol superficiales Si–OH [8]. En el sistema SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{100} se observa una disminución notoria en la intensidad de esta señal, lo que evidencia una funcionalización eficiente de la benzocaína mediante el anclaje químico en estos sitios activos, consistencia que respaldan los análisis morfológicos y de fotoluminiscencia. En contraste, el espectro de SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{200} de la muestra revela una saturación de la superficie molecular, indicando que se ha alcanzado el límite de carga del soporte nanométrico.

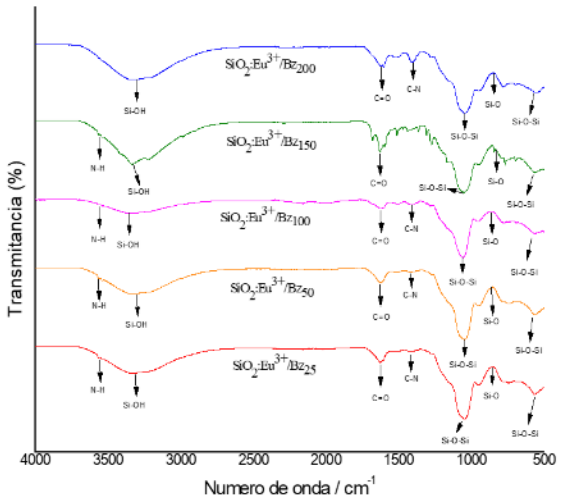


Figura 1. Espectro infrarrojo para los sistemas SiO_2:Eu^{3+}/Bzn

Análisis de difracción de rayos X de los sistemas SiO_2:Eu^{3+}/Bz_n
En la figura 2 se observa los patrones de difracción para las diferentes muestras de SiO_2:Eu^{3+}-Bz_n, donde es notable un pico desde los 10 ° hasta los 20° típica de la sílice en todas las relaciones molares [8], por otro lado se observa que los picos ubicados en 22, 25, 28, 31 y 37° van adquiriendo una mayor intensidad a medida que aumenta la concentración de la benzocaína[16] lo cual es más notorio en las muestras con 150 y 200 mg de benzocaína indicando una mayor funcionalización como se corrobora con los resultados de infrarrojo. Los tamaños de cristalito (Tc) de dichos picos fueron calculados mediante la ecuación de Debye-Scherrer, esta fórmula solo aplica para tamaños de cristalito entre 1-100 nm. Para los sistemas SiO_2:Eu^{3+}/Bz_n se obtuvieron los tamaños de cristalito entre 30-65 nm.

Con esto se reafirma la influencia de la benzocaína sobre la superficie de las nanopartículas. Así mismo, la zona entre 15° y 30° presenta una distorsión indicando así una sobrepósicion de la benzocaína sobre la superficie de la nanopartícula, con esto se confirma la funcionalización del fármaco sobre la superficie de la sílice [5].

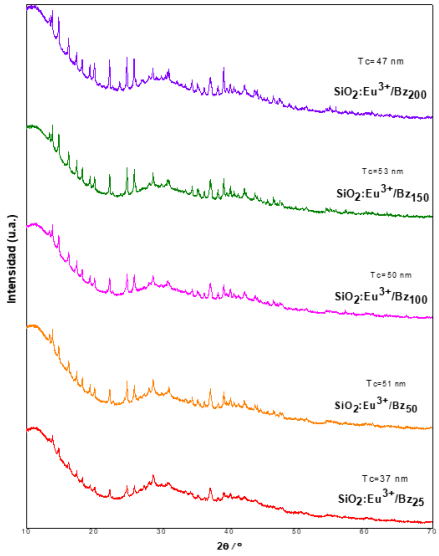


Figura 2. Difractogramas de los sistemas SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{25}, SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{50}, SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{100}, SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{150} y SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{200}

Análisis mediante microscopia electrónica de barrido de los sistemas SiO_2:Eu^{3+}/Bz_n

En la figura 3a se revelan partículas de morfología de tamaños irregulares del sistema SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{25}, con tendencia a formar aglomerados esferoidales. La superficie de las partículas se observa rugosa, lo cual sugiere una estructura porosa. El análisis estadístico del tamaño de la partícula (Figura 3b) muestra una distribución amplia con un valor promedio de 1.33 ± 0.98 µm, predominando partículas del rango de 0.5-1.5 µm, así mismo las partículas que predominan en el rango de los 4 µm sugiere la formación de aglomerados

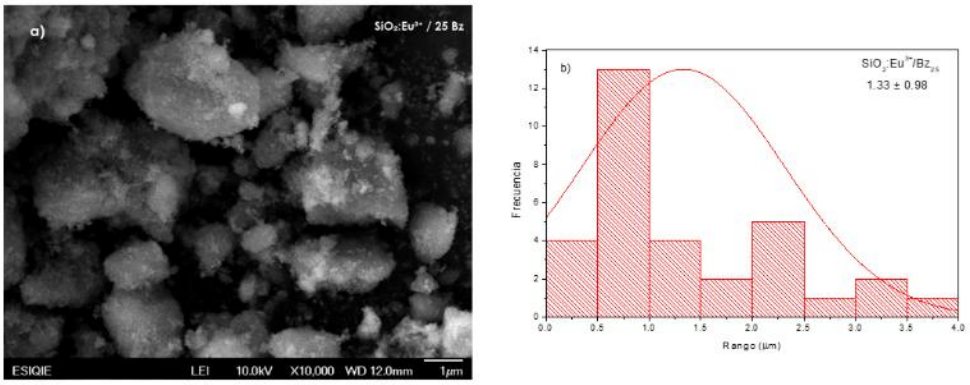


Figura 3. a) Morfología del sistema SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{25}, b) distribución del tamaño de partícula del sistema SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{25}.

Este comportamiento multifásico en la distribución de tamaños es crucial para contextualizar los resultados posteriores de citotoxicidad y captación celular en la línea de cáncer de mama MDA-MB-231, dado que el tamaño de partícula y su estado de agregación modifican de forma directa los mecanismos de endocitosis celular.

Análisis de fotoluminiscencia de los sistemas SiO_2:Eu^{3+}/Bz_n

Las propiedades ópticas de los compósitos sintetizados se evaluaron mediante espectroscopía de fotoluminiscencia. En la Figura 4 se ilustran los espectros de emisión para las diferentes concentraciones de los sistemas nanoestructurados basados en SiO_2:Eu^{3+}/Bz_n. Tras ser excitadas, las muestras exhiben las transiciones radiativas características del ion lantánido Eu^{3+}, correspondientes a los decaimientos desde el estado excitado $^5D_0$ hacia los niveles fundamentales $^7F_1$ y $^7F_2$, localizadas a 593 nm y 612 nm, respectivamente [11-12].

La transición dipolo-eléctrica $^5D_0 \rightarrow {}^7F_2$ (emisión roja a 612 nm) resultó ser la de mayor intensidad en todos los sistemas, lo cual es un comportamiento típico de los complejos y compuestos organometálicos de europio(III) cuando el ion se encuentra en un sitio de simetría sin centro de inversión [11-13]. Es notable que el sistema SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{200} presenta una disminución drástica en la intensidad de sus bandas de emisión. Este fenómeno de atenuación luminiscente (*quenching*) se atribuye a la alta densidad de carga del fármaco en la superficie; la benzocaína actúa como una barrera de apantallamiento óptico que absorbe o dispersa la radiación ultravioleta incidente, impidiendo que los centros activos de Eu^{3+} reciban la energía de excitación necesaria [14-15].

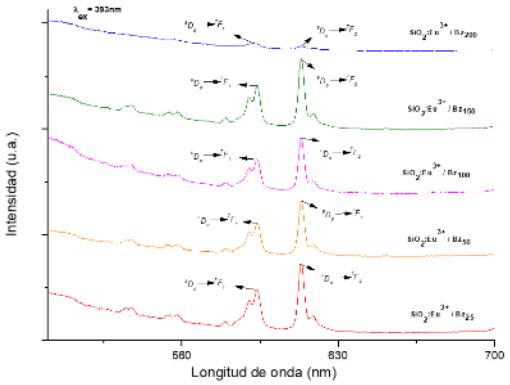


Figura 4. Espectro de emisión de los sistemas SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{25}, SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{50}, SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{100}, SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{150} y SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{200}.

Ensayos de viabilidad celular

En la Figura 5 , se muestras los resultados de viabilidad celular (%) en células MDA-MB-231 expuestas a las matrices de SiO_2 pura y a los sistemas funcionalizados SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{50} y SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{100} a concentraciones de 100 y 200 mg/mL.

Se observa que la matriz de SiO_2 sin funcionalizar induce un incremento estadísticamente significativo (***) en la señal de viabilidad por encima de la línea de control (100%), fenómeno que suele asociarse a una respuesta proliferativa temprana o a interferencias metabólicas en el ensayo colorimétrico inducidas por la sílice pura.

Por el contrario, la incorporación del dopante y el fármaco modifica drásticamente este comportamiento. El sistema SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{50} disminuye ligeramente la viabilidad celular, mostrando una reducción más marcada y estadísticamente significativa a la concentración de 200 mg/mL.

De manera notable, el sistema SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{100} mantiene niveles de viabilidad celular estables y cercanos al 100% en ambas concentraciones evaluadas, sin mostrar diferencias significativas respecto al control. Este resultado es de suma relevancia para el trabajo, ya que corrobora que la formulación con 100 mg de benzocaína no solo es la óptima en términos de propiedades ópticas y estructurales (según los análisis de FT-IR y fotoluminiscencia), sino que además garantiza una excelente biocompatibilidad, consolidándose como una nanosonda segura para aplicaciones de bioimagen.

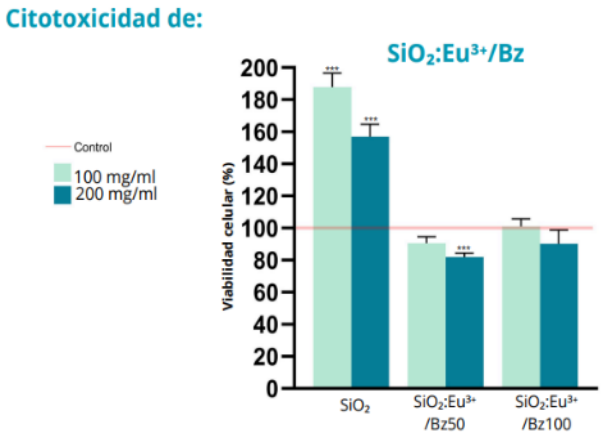


Figura 5. Los gráficos muestran la media ± del error estándar. Los experimentos se realizaron por quintuplicado y se confirmaron mediante experimentos independientes. *** $p < 0.001$.

CONCLUSIONES

En este trabajo se sintetizaron con éxito sistemas nanoestructurados de SiO_2:Eu^{3+} funcionalizados con benzocaína mediante el método Stöber, consolidando una plataforma con alto potencial teranóstico. Los análisis de FT-IR confirmaron el anclaje químico eficiente del fármaco sobre los grupos silanol (-Si-OH) superficiales de la matriz. El estudio morfológico reveló partículas porosas con diámetros promedio en la escala micrométrica temprana ($1.33 \pm 0.98\ \mu m$) y una tendencia a formar aglomerados esferoidales.Las evaluaciones espectroscópicas demostraron que los compósitos conservan las propiedades ópticas intrínsecas del ion Eu^{3+}, exhibiendo una intensa emisión roja centrada a 612 nm ($^5D_0 \rightarrow {}^7F_2$). Mientras que la concentración de 200 mg provocó saturación superficial y atenuación luminiscente (quenching), las dosis intermedias mantuvieron perfiles ópticos altamente definidos.Finalmente, los ensayos *in vitro* en células MDA-MB-231 evidenciaron que el sistema SiO_2:Eu^{3+}/Bz_{100} posee una excelente biocompatibilidad, sosteniendo la

viabilidad celular cercana al 100% bajo concentraciones de exposición elevadas. La convergencia de un acoplamiento molecular efectivo, una respuesta luminiscente sobresaliente y un perfil de seguridad biológica óptimo consolida a la formulación de 100 mg como una nanosonda bifuncional idónea para aplicaciones de vanguardia en bioimagen.

BIBLIOGRAFÍA

[1] Langer, R. (1998). Drug delivery and targeting. *Nature*, 392(6679), 5-10.
[2] Tiwari, G., et al. (2012). Drug delivery systems: An updated review. *International Journal of Pharmaceutical Investigation*, 2(1), 2.
[3] Uhlenheuer, C. H., et al. (2021). Controlled release systems in modern pharmaceutical engineering. *Advanced Drug Delivery Reviews*, 176, 113843.
[4] Roduner, E. (2006). Size matters: why nanomaterials are different. *Chemical Society Reviews*, 35(7), 583-592.
[5] Liberman, A., et al. (2014). Synthesis and surface functionalization of silica nanoparticles for nanomedicine. *Surface Science Reports*, 69(2-3), 132-158.
[6] Bünzli, J. C. G. (2010). Lanthanide luminescence for biomedical applications and bioimaging. *Chemical Reviews*, 110(5), 2729-2755.
[7] Naahidi, S., et al. (2013). Biocompatibility of engineered nanoparticles for drug delivery. *Journal of Controlled Release*, 166(2), 182-194.
[8] Erdem, S. S., et al. (2020). Surface functionalization of silica nanospheres to enhance drug loading and pharmacokinetics. *Journal of Nanomaterials*, 2020, 1-12.
[9] Stöber, W., Fink, A., & Bohn, E. (1968). Controlled growth of monodisperse silica spheres in the micron size range. *Journal of Colloid and Interface Science*, 26(1), 62-69.
[10] Cailleau, R., et al. (1974). Breast tumor cell lines: Isolation and characterization of MDA-MB-231. *Journal of the National Cancer Institute*, 53(3), 661-674.
[11] Bünzli, J. C. G., & Piguet, C. (2005). Taking advantage of lanthanide luminescence. Chemical Society Reviews, 34(12), 1048-1077. (Referencia clásica para transiciones del Europio y su intensidad).
[12] Carlos, L. D., Ferreira, R. A., & Bermudez, V. D. Z. (2009). Lanthanide-containing light-emitting organic–inorganic hybrids: a bet on the future. Advanced Materials, 21(5), 509-534. (Ideal para matrices de sílice dopadas con Eu^{3+}).
[13] Blasse, G., & Grabmaier, B. C. (1994). Luminescent materials. Springer Science & Business Media. (Explica el porqué la transición 5D0 - 7F2 es la más intensa en entornos asimétricos).
[14] Li, Y., et al. (2017). Effects of organic surface functionalization on the photoluminescence quenching of rare-earth doped silica nanoparticles. Journal of Materials Chemistry C, 5(22), 5432-5441. (Sustento para explicar el bloqueo de luz por exceso de fármaco/benzocaína).
[15] Carnall, W. T., Fields, P. R., & Rajnak, K. (1968). Electronic energy levels in the trivalent lanthanides. The Journal of Chemical Physics, 49(10), 4424-4442. (La biblia de las asignaciones de bandas 5L6, 5D4, etc.).

SÍNTESIS MULTIETAPA Y CARACTERIZACIÓN DE DERIVADOS BODIPY FUNCIONALIZADOS CON CADENAS ALQUÍLICAS DE DIFERENTE LONGITUD

Eugenia Aldeco-Pérez[1], Gustavo Adolfo Clavel[1,2], Rodrigo Morales Cueto[2], Jorge Morales-Hernández[1]

[1] Centro de Investigación y Desarrollo Tecnológico en Electroquímica (CIDETEQ),[2] Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
ealdeco@cideteq.mx

RESUMEN

Los fluoróforos tipo BODIPY (borodipirrometeno) constituyen una familia de compuestos orgánicos ampliamente utilizados en aplicaciones electroquímicas y de detección óptica debido a su elevada estabilidad fotoquímica, alto rendimiento cuántico de fluorescencia y facilidad de modificación estructural. En el presente trabajo se desarrolló y estandarizó una ruta sintética multietapa para la obtención de derivados BODIPY funcionalizados con cadenas alquílicas de diferente longitud (C5 y C10), orientados a su potencial aplicación en estudios de interfase metal/solución y sistemas electroquímicos avanzados.

La metodología incluyó la implementación de cinco etapas sintéticas consecutivas, empleando precursores bromados y bajo condiciones controladas de reflujo, extracción líquido-líquido, secado con agentes desecantes y concentración mediante rotavapor. El monitoreo de las reacciones se realizó por cromatografía en capa fina (TLC), mientras que la purificación de los productos finales se llevó a cabo mediante cromatografía en columna en fase normal, seleccionando fracciones fluorescentes bajo irradiación UV.

La caracterización estructural de los compuestos sintetizados se efectuó mediante espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR), resonancia magnética nuclear de protón (^{1}H RMN) y determinación de punto de fusión. Los espectros FTIR evidenciaron bandas características del núcleo BODIPY, incluyendo vibraciones asociadas a enlaces B–F (~1347 cm^{-1}), C=N (~1500 cm^{-1}) y C=C aromático (~1600 cm^{-1}), así como señales correspondientes a las cadenas alifáticas (CH_2 ~2924 y 2854 cm^{-1}). Los espectros de ^{1}H RMN mostraron señales coherentes con la estructura esperada, confirmando la incorporación de los sustituyentes alquílicos. Adicionalmente, se realizaron evaluaciones preliminares de fluorescencia bajo luz UV, observándose emisión característica del núcleo BODIPY.

Los resultados obtenidos demuestran la viabilidad y reproducibilidad de la ruta sintética desarrollada, permitiendo la obtención exitosa de los derivados BODIPYC5SH y BODIPYC10SH. Si bien no se realizaron mediciones fotofísicas avanzadas (rendimiento cuántico o tiempos de vida fluorescente) ni análisis complementarios de espectrometría de masas, la evidencia espectroscópica obtenida respalda la correcta formación estructural de los compuestos.

En conclusión, se estableció un procedimiento sintético documentado y reproducible para la obtención de derivados fluorescentes BODIPY funcionalizados, proporcionando una base metodológica sólida para futuras investigaciones en sensores ópticos, materiales fotoactivos y aplicaciones electroquímicas. Este trabajo contribuye a fortalecer la línea de investigación en materiales funcionales fluorescentes y amplía el potencial de aplicación de estos sistemas en estudios interfaciales y dispositivos electroquímicos.

Palabras clave: BODIPY, fluoróforos, cadenas alquílicas, monocapas autoensambladas, síntesis orgánica, sensores ópticos.

INTRODUCCIÓN

Los fluoróforos de tipo BODIPY (4,4-difluoro-4-bora-3a,4a-diaza-s-indaceno) constituyen una familia de compuestos orgánicos de alta relevancia en química analítica, materiales funcionales y bioanalítica. Desde su primera síntesis reportada por Treibs y Kreuzer en 1968 [1], estos compuestos han experimentado un desarrollo vertiginoso gracias a su notable combinación de propiedades fotofísicas: elevado coeficiente de absorción molar, bandas de absorción y emisión estrechas, alto rendimiento cuántico de fluorescencia, excelente estabilidad fotoquímica y facilidad de modificación estructural en diversas posiciones del núcleo [2,3].

La versatilidad del andamio BODIPY radica en la posibilidad de introducir sustituyentes en las posiciones α, β y meso del núcleo dipirrometeno, lo cual permite ajustar de manera precisa las propiedades ópticas, electroquímicas y de solubilidad de los derivados obtenidos [3]. En particular, la incorporación de cadenas alquílicas de diferente longitud modifica la solubilidad en disolventes orgánicos, la movilidad molecular y la afinidad interfacial de estos compuestos, aspectos fundamentales para su aplicación en sistemas electroquímicos y de sensado [4].

Un campo de interés creciente es la funcionalización de superficies metálicas mediante monocapas autoensambladas (SAMs, del inglés self-assembled monolayers) de compuestos tiolados sobre electrodos de oro. El enlace Au–S formado entre el grupo tiol y la superficie metálica es altamente estable y permite el anclaje molecular con orientación controlada [5,6]. En este contexto, los derivados BODIPY tiolados resultan de especial interés porque combinan la capacidad de formación de SAMs con las propiedades de fluorescencia característica del núcleo BODIPY, lo que posibilita el monitoreo óptico in situ de procesos interfaciales [5].

Investigaciones recientes han demostrado que los derivados BODIPY funcionalizados constituyen plataformas versátiles para el desarrollo de sensores selectivos de iones y moléculas, materiales para celdas solares sensibilizadas con colorantes (DSSC), agentes fotosensibilizadores para terapia fotodinámica y componentes de dispositivos optoelectrónicos [2,4]. La diversidad de aplicaciones tecnológicas reportadas justifica el esfuerzo en el desarrollo de rutas sintéticas reproducibles y en la caracterización exhaustiva de nuevos derivados.

En el presente trabajo se describe la síntesis y caracterización de tres derivados BODIPY con cadenas alquílicas de longitud variable (C5, C10 y C15), los cuales fueron obtenidos a partir de ácidos bromados mediante una ruta sintética de cinco etapas escalonadas. El objetivo central fue establecer un procedimiento documentado y reproducible que permita obtener estos compuestos fluorescentes funcionalizados, evaluando su pureza y propiedades estructurales mediante técnicas cromatográficas, espectroscópicas y fisicoquímicas, con miras a su aplicación en sensores ópticos, materiales funcionales y estudios de interfase metal/solución.

SECCIÓN EXPERIMENTAL

Reactivos y disolventes

Todos los reactivos y disolventes empleados fueron de grado analítico o sintético. Se utilizaron ácidos bromados de diferentes longitudes de cadena como materias primas: ácido 6-bromohexanoico (C5), ácido 11-bromoundecanóico (C10) y ácido 16-bromohexadecanóico (C15). El 2,4-dimetilpirrol, cloruro de tionilo, trifluoruro de boro-dietiléter ($BF_3 \cdot OEt_2$), tioacetato de potasio y carbonato de potasio (K_2CO_3) fueron empleados como reactivos de síntesis. Los disolventes

utilizados incluyeron diclorometano (DCM), tolueno y acetona, todos de grado reactivo. Los agentes desecantes empleados fueron sulfato de sodio y sulfato de magnesio anhidros.

Ruta sintética multietapa

La síntesis de los derivados BODIPY se llevó a cabo mediante una ruta de cinco etapas consecutivas, adaptada de metodologías reportadas en la literatura [5,6]:

- Etapa 1 – Activación del ácido bromado: El ácido bromado de cadena seleccionada se trató con cloruro de tionilo en DCM/DMF, bajo condiciones de reflujo y atmósfera controlada, para obtener el cloruro de acilo correspondiente.
- Etapa 2 – Acoplamiento con 2,4-dimetilpirrol: El cloruro de acilo se hizo reaccionar con 2,4-dimetilpirrol en DCM para obtener el intermedio dipirrometano bromado.
- Etapa 3 – Complejación con $BF_3 \cdot OEt_2$: El dipirrometano bromado fue tratado con $BF_3 \cdot OEt_2$ en tolueno bajo condiciones anhidras, formando el núcleo fluorescente BODIPY mediante la coordinación del boro con los nitrógenos pirrólicos.
- Etapa 4 – Sustitución nucleofílica con tioacetato de potasio: El derivado BODIPY bromado fue sometido a sustitución nucleofílica con tioacetato de potasio en acetona para generar el tioéster intermedio.
- Etapa 5 – Desprotección del tioéster: El tioéster fue hidrolizado con K_2CO_3 en condiciones básicas suaves para obtener el grupo tiol libre en los derivados C5SH y C10SH.

El monitoreo del avance de cada reacción se realizó mediante cromatografía en capa fina (TLC) en placas de sílice, bajo irradiación UV (λ = 254 y 365 nm). Los productos brutos fueron procesados mediante extracción líquido-líquido, secado con agentes desecantes anhidros y concentración en rotavapor. La purificación final se realizó mediante cromatografía en columna en fase normal (sílice 60, 230–400 mesh), utilizando sistemas de eluyentes de polaridad creciente y seleccionando las fracciones fluorescentes visualizadas bajo irradiación UV.

Técnicas de caracterización

La caracterización estructural de los compuestos purificados se llevó a cabo mediante las siguientes técnicas:

- Espectroscopía FTIR-ATR: Los espectros de infrarrojo se registraron en un espectrómetro con accesorio de reflectancia total atenuada (ATR) en el rango de 4000 a 500 cm^{-1}. La asignación de bandas se realizó con base en tablas de correlación estándar [7].
- Resonancia magnética nuclear de protón (1H RMN): Los espectros se registraron a 400 MHz en $CDCl_3$ como disolvente deuterado, utilizando TMS como referencia interna.
- Punto de fusión: Determinado en un equipo de capilar abierto, reportando el intervalo observado.
- Propiedades ópticas preliminares: Se evaluó la fluorescencia cualitativa bajo irradiación UV (365 nm) y se registró el espectro de absorción UV-Vis en solución de DCM.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Obtención y rendimiento de los productos

La aplicación de la ruta sintética multietapa descrita permitió obtener exitosamente tres de los derivados fluorescentes propuestos: BODIPY-C5SH, BODIPY-C10SH y BODIPY-C15Br. En todos los casos, las reacciones fueron monitoreadas satisfactoriamente por TLC, observándose la desaparición de los materiales de partida y la formación de nuevos productos con fluorescencia característica bajo luz UV. La purificación cromatográfica resultó eficiente para la separación de los productos de reacción y subproductos, permitiendo el aislamiento de fracciones puras con coloración naranja-rojiza y fluorescencia intensa.

La longitud de la cadena alquílica mostró una influencia notable en las propiedades físicas de los derivados obtenidos. Los compuestos de cadena más corta (BODIPY-C5SH) presentaron mayor solubilidad en solventes polares como DCM y acetona, mientras que los derivados de cadena más larga (BODIPY-C10SH y BODIPY-C15Br) mostraron tendencia a la cristalización y mayor punto de fusión, consistente con el incremento en las interacciones intermoleculares de van der Waals entre las cadenas alifáticas. Estos resultados son coherentes con lo reportado para series homólogas de compuestos fluorescentes tiolados [5].

Caracterización por espectroscopía FTIR

Los espectros FTIR-ATR de los compuestos purificados presentaron las bandas características del núcleo BODIPY en todos los casos. En la región de 2900–3000 cm^{-1} se observaron las vibraciones de estiramiento C–H asimétrico y simétrico correspondientes a los grupos metileno (CH_2) de la cadena alquílica (~2924 y ~2854 cm^{-1}, respectivamente), cuya intensidad relativa aumentó con la longitud de la cadena, confirmando la incorporación diferencial de los sustituyentes alifáticos.

Las bandas en 1603 y 1508 cm^{-1} fueron asignadas a las vibraciones de estiramiento C=C y C=N del sistema aromático conjugado del núcleo BODIPY, en concordancia con lo reportado en la literatura para esta familia de fluoróforos [2,7]. La señal intensa y característica en 1347 cm^{-1} fue atribuida al enlace B–F, considerada una de las bandas más diagnósticas de los fluoróforos tipo BODIPY [5,6]. Adicionalmente, en la región de 1250–1200 cm^{-1} se detectaron señales asociadas a vibraciones C–N, y en la región de 1100–1000 cm^{-1} se registraron bandas atribuibles al estiramiento C–S, lo que confirmó la presencia del grupo funcional tiol en los derivados BODIPY-C5SH y BODIPY-C10SH.

En conjunto, el análisis FTIR proporcionó evidencia espectroscópica sólida de la formación de los productos esperados, confirmando tanto la integridad del núcleo fluorescente como la funcionalización con cadenas alquílicas de diferente longitud. La ausencia de bandas residuales de los materiales de partida o intermediarios bromados refuerza la conclusión sobre la pureza de los compuestos obtenidos [7].

Caracterización por ^{1}H RMN

Los espectros de ^{1}H RMN obtenidos a 400 MHz en $CDCl_3$ mostraron señales coherentes con las estructuras propuestas para cada derivado BODIPY. En todos los espectros se identificaron señales características del sistema aromático del fluoróforo: señales de los protones pirrólicos en la región de 6.0–6.5 ppm, correspondientes a los H en posición β del núcleo BODIPY, así como singuletes intensos en 2.5 y 1.4 ppm atribuidos a los grupos metilo en posiciones α y γ del andamio dipirrometeno.

Los protones alifáticos de la cadena sustituyente se manifestaron como multipletes e integrales consistentes con el número de grupos metileno esperados en cada derivado. Para el BODIPY-C5SH, se observaron señales en 1.3–1.8 ppm (m, $–CH_2–$ de la cadena), mientras que para los derivados de cadena más larga (BODIPY-C10SH y BODIPY-C15Br) se identificó un incremento proporcional en la integral de la zona alifática (δ 1.2–1.7 ppm), consistente con el mayor número de unidades $–CH_2–$ en la cadena. La señal del grupo $–CH_2–S–$ terminal apareció desplazada hacia campo bajo (~2.5 ppm) como un triplete característico, confirmando la proximidad del azufre en los derivados tiolados. Los espectros fueron consistentes con las estructuras moleculares propuestas y comparables con datos reportados en la literatura para derivados análogos [5,6].

Punto de fusión y propiedades ópticas

Los compuestos purificados presentaron un punto de fusión cercano a 91 °C, valor coherente con la formación de compuestos orgánicos sólidos de pureza aceptable y dentro del rango esperado reportado en literatura para derivados BODIPY de estructura similar [5,6]. Este resultado refuerza la conclusión sobre la identidad y pureza de los productos obtenidos.

La evaluación preliminar de las propiedades ópticas reveló absorción máxima a 332 nm y excitación fluorescente alrededor de 510 nm en solución de DCM, valores consistentes con el comportamiento fotofísico característico de los fluoróforos tipo BODIPY tetrametilados [2,3]. Bajo irradiación UV (365 nm), todos los compuestos exhibieron fluorescencia intensa de coloración verde-anaranjada característica del núcleo BODIPY, observable a simple vista. Aunque no se realizaron mediciones cuantitativas de rendimiento cuántico ni tiempos de vida de fluorescencia, la evidencia cualitativa indica que el núcleo fluorescente se preservó íntegramente a lo largo de las cinco etapas sintéticas.

Modelado molecular

Como parte de la caracterización computacional preliminar de los derivados obtenidos, se realizaron estudios de modelado molecular orientados a estimar la geometría de equilibrio de las moléculas. Estos estudios permitieron visualizar la conformación preferida de las cadenas alquílicas con respecto al plano del núcleo BODIPY, así como estimar la distribución electrónica en el sistema conjugado. Este enfoque es consistente con la tendencia actual en el campo de la química de fluoróforos, donde los cálculos de teoría del funcional de la densidad (DFT) y DFT dependiente del tiempo (TD-DFT) se emplean rutinariamente para rationalizar las propiedades ópticas de derivados BODIPY [2,3].

POTENCIAL DE APLICACIÓN

Los derivados BODIPY tiolados sintetizados en el presente trabajo presentan características estructurales y propiedades fisicoquímicas que los hacen atractivos para diversas aplicaciones tecnológicas. La presencia del grupo tiol libre en los derivados BODIPY-C5SH y BODIPY-C10SH los convierte en candidatos para la formación de monocapas autoensambladas (SAMs) sobre superficies de oro mediante el enlace Au–S, de acuerdo con la metodología reportada por Shepherd et al. [5,6]. Este tipo de sistemas BODIPY/SAM permite monitorear mediante microscopía de fluorescencia los procesos de desorción y reorganización de la monocapa inducidos electroquímicamente, constituyendo herramientas poderosas para el estudio de interfaces metal/solución.

La longitud de la cadena alquílica es un parámetro determinante en el comportamiento de las SAMs sobre oro. Investigaciones con compuestos tiol-funcionalizados de diferente longitud de cadena han demostrado que cadenas largas (>C10) favorecen la formación de monocapas más ordenadas y densamente empaquetadas, mientras que cadenas cortas (C5) exhiben mayor fluidez y permeabilidad al electrolito [3]. En este contexto, la disponibilidad de la serie BODIPY-C5SH/C10SH/C15Br permite estudiar sistemáticamente la influencia de la longitud de cadena sobre las propiedades de anclaje superficial y el comportamiento electroquímico de las SAMs derivadas.

Más allá de las aplicaciones interfaciales, los derivados BODIPY funcionalizados obtenidos son relevantes en el campo de los sensores fluorescentes. La literatura reciente documenta el uso de derivados BODIPY para la detección selectiva de iones metálicos, aniones y moléculas de interés ambiental y biomédico mediante modulación de la fluorescencia [4]. La posibilidad de inmovilizar estos fluoróforos sobre sustratos sólidos a través del enlace tiol-oro amplía las perspectivas de aplicación hacia sensores de estado sólido y dispositivos electroquímicos integrados.

CONCLUSIONES

En el presente trabajo se desarrolló y estandarizó exitosamente una ruta sintética multietapa para la obtención de tres derivados fluorescentes BODIPY funcionalizados con cadenas alquílicas: BODIPY-C5SH, BODIPY-C10SH y BODIPY-C15Br. Los resultados obtenidos permiten establecer las siguientes conclusiones:

- Se demostró la viabilidad y reproducibilidad de la ruta sintética de cinco etapas a partir de ácidos bromados, estableciendo un protocolo experimental documentado para la obtención de derivados BODIPY tiolados.

- La caracterización por FTIR confirmó la presencia de las bandas diagnósticas del núcleo BODIPY (B–F a 1347 cm^{-1}, C=N a ~1508 cm^{-1}, C=C a ~1603 cm^{-1}) y de la cadena alquílica (CH_2 a ~2924 y 2854 cm^{-1}), así como la funcionalización tiol (C–S en 1100–1000 cm^{-1}).
- Los espectros de 1H RMN mostraron señales coherentes con las estructuras propuestas, confirmando la incorporación de los sustituyentes alquílicos de diferente longitud y la preservación del núcleo fluorescente.
- Los compuestos presentaron punto de fusión cercano a 91 °C y comportamiento fotofísico consistente con el núcleo BODIPY, con absorción a 332 nm y excitación fluorescente a ~510 nm.
- La longitud de la cadena alquílica influyó en las propiedades físicas (solubilidad, punto de fusión) de los derivados obtenidos, lo que tiene implicaciones directas en su procesabilidad y aplicación en sistemas interfaciales.
- Los derivados obtenidos presentan potencial aplicación en sensores químicos ópticos, monocapas autoensambladas sobre oro, materiales fotoactivos y sistemas electroquímicos avanzados.

Los resultados aquí reportados sientan las bases metodológicas para investigaciones futuras orientadas a la medición de propiedades fotofísicas avanzadas (rendimiento cuántico, tiempos de vida de fluorescencia), la caracterización completa por espectrometría de masas, y la evaluación del comportamiento electroquímico de las SAMs derivadas de estos compuestos sobre electrodos de oro.

BIBLIOGRAFÍA

[1] Treibs, A., & Kreuzer, F. H. (1968). Difluorboryl-Komplexe von Di- und Tripyrrylmethenen. Justus Liebigs Annalen der Chemie, 718(1), 208–223.

[2] Avellanal-Zaballa, E., et al. (2022). Laser dyes based on BODIPY scaffolds. En: Li, C., & Das, A. (Eds.), BODIPY Dyes in Life Sciences, Biomedicine and Biotechnology. Elsevier.

[3] Hicguet, M., Mongin, O., Leroux, Y. R., Roisnel, T., Berrée, F., & Trolez, Y. (2024). Synthesis and optoelectronic properties of threaded BODIPYs. ChemistryOpen, e202400196. https://doi.org/10.1002/open.202400196

[4] Frontiers in Chemistry. (2024). Carborane-based BODIPY dyes: synthesis, structural analysis, photophysics and applications. Frontiers in Chemistry, 12, 1485301. https://doi.org/10.3389/fchem.2024.1485301

[5] Shepherd, J. L., Kell, A., Chung, E., Sinclar, C. W., Workentin, M. S., & Bizzotto, D. (2004). Supporting information for selective reductive desorption of a SAM coated gold electrode revealed using fluorescence microscopy. Journal of the American Chemical Society.

[6] Shepherd, J. L., Kell, A., Chung, E., Sinclar, C. W., Workentin, M. S., & Bizzotto, D. (2004). Selective reductive desorption of a SAM-coated gold electrode revealed using fluorescence microscopy. Journal of the American Chemical Society, 126(26), 8329–8335. https://doi.org/10.1021/ja047933r

[7] Silverstein, R. M., Webster, F. X., Kiemle, D. J., & Bryce, D. L. (2014). Spectrometric Identification of Organic Compounds (8va ed.). Wiley.

[8] Bard, A. J., & Faulkner, L. R. (2001). Electrochemical Methods: Fundamentals and Applications (2da ed.). Wiley.

COMPOSICIÓN MICROBIOLÓGICA DE UN SUSTRATO TIPO COMPOST PARA ESPECIES FORESTALES

Amador Alberto Arzola Jiménez, María Elena Granados García, María Alcalá de Jesús, María de los Ángeles Beltrán Nambo

Facultad de Biología Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo
1702235f@umich.mx, elena.granados.garcia@umich.mx, maria.alcala@umich.mx, maria.beltran@umich.mx.

RESUMEN

Durante la fase del compostaje se lleva a cabo una compleja interacción de microorganismos debido a la descomposición de la materia orgánica en condiciones de elevada temperatura. La descomposición de los materiales comienza con los microorganismos mesófilos (MM) que actúan de 20 a 40°C, posteriormente prosperan los microorganismos termófilos (MT), que subsisten a temperaturas de 60°C; conforme avanza el proceso, disminuye la temperatura del compost, en la que prosperen nuevamente los MM. El objetivo fue determinar la composición microbiológica durante la elaboración de un sustrato compostado para especies de pino. Se usaron materiales forestales, microorganismos y elementos diversos para el proceso de compostaje a partir de dos pilas: la primera pila consta de mantillo de bosque, hidróxido de calcio, ceniza de parangua, roca fosfórica, melaza de caña, microorganismos como *bacillus subtilis, B. megaterium* ,*Trichoderma harzianum* y micorrizas; la segunda pila contiene rastrojo de maíz, paja de frijol, paja de trigo, salvado de trigo, alfalfa seca, olotes molidos, estiércol de vaca, gallinaza, aserrín de madera y paja de avena. Todos los componentes se mezclaron con agua hasta obtener el sustrato en etapa inicial. Diariamente se volteó el compost y se registró la temperatura, cuando esta llegó a 60°C, el volteo se realizó dos veces al día. Se tomaron muestras del compost en proceso: etapa inicial (control), a los dos, cuatro, seis, nueve, trece, dieciséis y a los cuarenta y seis días. Las muestras colectadas se usaron para hacer diluciones y aplicarlas en cajas de Petri con agar nutritivo, por duplicado. Se determinó la diversidad de especies de bacterias y actinomicetos mediante Unidades Formadoras de Colonias (UFC) y se diferenciaron fenotípicamente por medio de la morfología y a través de le tinción Gram. Se identificaron estructuras reproductoras de los hongos encontrados, con claves específicas. Se encontraron 51 especies de bacterias mesófilas: 7 del mantillo, 20 de la muestra compost control y 24 de la última muestra del compost a una temperatura de 30 a 40°C. en general se determinó la presencia de 30 colonias Gram (+) y 21 colonias Gram (-). Se identificaron 51 especies bacterianas de la etapa termofílica a una temperatura de 65°C, en general fueron 38 colonias Gram (+) y 13 colonias Gram (-). Se hallaron 18 especies de actinomicetos en etapa termofílica y 11 especies de hongos, 5 en etapa mesófila y 6 en termófila. El proceso de compostaje es posible por la presencia de bacterias y hongos presentes tanto en el mantillo del bosque, como en los materiales diversos para la liberación de carbono y nitrógeno, necesarios para la germinación y el crecimiento de los pinos, en el sustrato resultante, el compost.

INTRODUCCIÓN

Los microorganismos son las entidades biológicas encargados de descomponer la materia orgánica del suelo en condiciones naturales. El suelo funciona como un almacén de nutrientes, mejora la estructura de la tierra y la presencia de bacterias y hongos es indispensable para llevar a cabo las reacciones químicas que contribuyen con la descomposición de restos de animales y plantas, los cuales se incorporan en forma de compuestos inorgánicos solubles como minerales que son aprovechados por estas. (Román *et al*., 2013).

Este proceso de descomposición de la materia orgánica, que ocurre de manera natural en los ecosistemas forestales, es posible repetirlo en condiciones de vivero utilizando los componentes adecuados para la fabricación de un sustrato útil en la producción de plantas. Durante la mezcla de

estos componentes ocurre la fragmentación de la materia orgánica por microorganismos que forman un ambiente con alta temperatura, lo que permite la degradación de la materia orgánica. En estas condiciones, las moléculas complejas se convierten en compuestos disponibles en el sustrato conocido como compost, rico en nutrientes para las plantas en sus primeros estados de desarrollo. (Moreno Casco y Moral Herrero, 2011).

El compost se elabora a partir de un tipo de materia prima conocida como material verde y material marrón: los residuos verdes son los que tienen un alto contenido de nitrógeno como el estiércol, el pasto fresco, los restos de frutas y vegetales y los restos de café; mientras que le material marrón aporta carbono a partir de los restos de la cosecha, las hojas secas, la corteza de árbol y el aserrín. Los materiales verdes y marrones forman capas, las cuales deben mantenerse húmedas, con un recambio constante de estos para oxigenar y disminuir la temperatura durante el proceso. El compost es un abono orgánico fértil producto de la actividad microbiana, tiene numerables beneficios para las plantas, promueve el sistema inmune de las raíces, mejora la estructura del suelo, proporciona nutrientes asimilables para las plantas, optimiza la retención de humedad, además de contener microorganismos benéficos para las plantas que les ayuda a su crecimiento y desarrollo (Moreno Casco y Moral Herrero, 2011; Román *et al*., 2013).

TEORÍA

Compostaje

El proceso de compostaje es llevado a cabo inicialmente por los microorganismos mesófilos (MM) que crecen desde los 20 a los 40°C, son los responsables del aumento de la temperatura, degradando los materiales y haciéndolos más disponibles para su asimilación, como aquellos ricos en azúcares y aminoácidos. Este consumo de alimento por los MM genera calor; sucesivamente surgen los microorganismos termófilos (MT) capaces de vivir a temperaturas elevadas. Los MT degradan eficientemente moléculas difícilmente digeribles, ayudando a descomponer polímeros grandes en un ambiente cálido (Laich, 2011). Durante el compostaje ocurre la eliminación de hongos fitopatógenos perjudiciales para las plantas como *Fusarium*, que a altas temperaturas no pueden sobrevivir. Al añadir microorganismos antagónicos como *Trichoderma harzianum* y B*acillus subtilis*, a lo largo del desarrollo del compost, ocurre la competencia por recursos, lo que significa un control biológico muy efectivo y genera la salud del sustrato con microorganismos benéficos que ayudan al crecimiento y desarrollo de la planta (González-León *et al*., 2022). Con el paso del tiempo en el proceso de compostaje decae la temperatura, empieza el enfriamiento del compost para dar lugar a la fase de maduración, nuevamente aparecen los MM para continuar con la degradación de la materia orgánica (Moreno Casco y Moral Herrero, 2011).

Bacterias

Las bacterias son organismos unicelulares procariotas que no poseen núcleo, cuyo material genético está distribuido en todo el citoplasma, miden entre 1 a 10 micras. Las bacterias se encuentran en todos los ecosistemas terrestres y acuáticos y contribuyen con la descomposición de la materia orgánica. De acuerdo con la tinción de Gram las bacterias se dividen en Gram positiva y Gram negativa: las bacterias Gram (+) poseen una capa gruesa de peptidoglicano, además de poseer acido teicoicos, mientras que las bacterias Gram (-) tienen una capa más delgada entre la membrana plasmática y la membrana externa (Pírez y Mota, 2006). Durante el compostaje las bacterias se encuentran presentes desde el inicio del proceso. Tanto las bacterias Gram (+) como las bacterias Gram (-) generan calor durante la digestión de la materia orgánica. En la fase termófila, surgen bacterias termófilas Gram (+) porque su pared celular resiste el calor, y disminuyen las bacterias Gram (–) que son parcialmente eliminadas (Moreno Casco y Moral Herrero, 2011). Las bacterias del género *Bacillus* tienen la capacidad de formar endosporas y engrosar sus paredes celulares cuando las condiciones son extremas; en esta etapa las bacterias termófilas incrementan su población debido a la cantidad de alimento disponible (Laich, 2011). Cuando baja la temperatura comienza la fase de enfriamiento y maduración del compost, la población de termófilas disminuye y es

remplazada por bacterias mesófilas donde hay una mayor diversidad taxonómica y metabólica (Laich, 2011; Moreno Casco y Moral Herrero, 2011).

Hongos

Los hongos son organismos eucariotas, a diferencia de las bacterias, los hongos presentan un núcleo verdadero, y diversos orgánulos con membrana como las mitocondrias donde producen la energía para la célula. La mayoría de los hongos están conformados por hifas a excepción de los hongos unicelulares como las levaduras; las hifas en conjunto forman una red extensa llamada micelio, existiendo hifas septadas e hifas cenocíticas. Las hifas septadas son filamentos en forma de tubo que dividen en compartimentos individuales mediante paredes transversales denominados septos; las hifas cenocíticas no poseen septos, sino que forman un tubo largo y contiene numerosos núcleos que conforma el filamento, las hifas septadas se encuentran en hongos de los grupos Ascomycota y basidiomycota, mientras que las cenocíticas son exclusivos los grupos Zigomycota (Garcés de Granada *et al*., 2003).

Los hongos están implicados desde el inicio del compostaje, tanto los hongos benéficos, como los hongos patógenos crecen en el sustrato para consumir los materiales disponibles, cuando incrementa la temperatura, los hongos patógenos son eliminados, y los benéficos siguen expandiéndose consumiendo materiales difíciles de descomponer como la celulosa y la lignina, cuando baja la temperatura los hongos siguen creciendo ayudando en la descomposición de la materia orgánica (Ferrera-Cerrato y Alarcón, 2014).

Actinomicetos

Los actinomicetos son bacterias Gram (+), con formas de bacilo o coco, forman cadenas similares a los filamentosos del micelio, sin embargo, son más delgados que los de los hongos. Son responsables de la descomposición de la materia orgánica en el suelo, ayudan con el reciclaje de nutrientes, son reconocidos por el olor a tierra húmeda, debido a un compuesto denominado geosmina, un metabolito secundario que se encuentra en esporas que liberan al suelo. Los actinomicetos se encuentran en la etapa termófila, cuando incrementa la temperatura ellos se encargan de degradar de manera eficiente los materiales complejos al igual que los hongos, debido a su pared celular gruesa soporta el calor y permanecen en el compost (Javed *et al*., 2021).

Parámetros del compostaje

Durante la elaboración del compost es necesario conocer los parámetros indispensables para que este se lleve a cabo de manera eficiente, como la humedad, la temperatura y la aireación. La humedad es fundamental para que los microorganismos inicien el compostaje, requieren agua para sus procesos metabólicos. Así mismo, es importante conocer y medir la temperatura, al alcanzar temperaturas alrededor de 65 a 70°C, es necesario hacer el volteo dos veces al día para disminuirla y para que no se pierda humedad (Moreno Casco y Moral Herrero, 2011). La aireación está en relación con la temperatura y la humedad, ya que tanto los MM como los MT requieren oxígeno por ser organismos aerobios. Es importante mantener la oxigenación de los microorganismos, para evitar ser remplazados por los microorganismos anaerobios que pueden provocar malos olores e interrumpir el proceso de compostaje. Por lo tanto, es necesario cuidar la humedad y la temperatura, así como realizar los volteos necesarios para disminuir la temperatura y oxigenar el sustrato (Román *et al*., 2013).

PARTE EXPERIMENTAL

Elaboración del sustrato tipo compost para especies forestales

La elaboración del compost inicia a partir de diferentes materiales divididos en dos pilas: la primera pila abarca el mantillo de bosque, hidróxido de calcio, ceniza de parangua, harina de rocas, melaza

de caña, *Bacillus subtilis, B. megaterium, Trichoderma harzianum*, y micorrizas; la segunda pila contiene alfalfa, rastrojo de maíz, aserrín de madera, paja de frijol, paja de trigo, olotes molidos, salvado de trigo, estiércol bovino o de caballo, y gallinaza. El mantillo de bosque se colecta en un bosque de pino.

Todos los materiales se juntan formando una serie de capas a las que se agrega agua para hacer una mezcla homogénea hasta formar una pila. Diariamente se realiza la mezcla de estos materiales volteando la pila de un lugar a otro y se registra la temperatura con un termómetro de mercurio, si esta es mayor de 60°C se realizan dos volteos, uno por la mañana y otro por la tarde.

Toma de muestras

Las muestras se colectaron al momento de registrar la temperatura del compost, se toman 10 gr del compost en proceso de elaboración en frascos de cristal estériles con su etiqueta; se colectó una muestra del mantillo de bosque y otra en la etapa inicial del compost, como control, posteriormente se colectaron muestras a los dos, cuatro, seis, nueve, trece, dieciséis, y cuarenta seis días.

Preparación de medios de cultivo

De cada muestra se hicieron diluciones seriadas y se sembraron en cajas de Petri de plástico de 90x15 mm con agar nutritivo para bacterias y hongos, mientras que para actinomicetos se preparó un medio enriquecido con agua de coco, sacarosa, malta, peptona y avena.

Diluciones seriadas

Se agregaron 10 gr del compost a un frasco con 100 ml de agua destilada estéril y se mezcló con una varilla de cristal; de esta mezcla se tomó 1 ml con una pipeta de cristal, se vertió a un tubo de ensayo con 9 ml de agua destilada, se agitó y de ese mismo tubo se tomó 1 ml para verterlo a un segundo tubo, repitiendo sucesivamente hasta el tubo 5, las diluciones se hicieron por duplicado.

De cada dilución se tomó 0.1 ml y se agregó a una caja de Petri distribuyéndolo con un asa de cristal, se selló la caja y se marcó con los datos correspondientes. Las cajas se incubaron a la temperatura correspondiente con la que se registró en el compost, al momento de su colecta.

Unidades formadoras de colonias (UFC)

El número de colonias que crecieron en cada caja con la dilución correspondiente se contaron, marcando un límite entre los 30 a 300 colonias, se anotó el número de colonias por cada caja. Con la respectiva formula se calcularon las UFC:

$$\text{UFC} = \text{número de colonias x la dilución}$$

Con las UFC de cada caja se hizo un promedio de acuerdo con la dilución correspondiente, a partir de la muestra de 10 gr colectada, para obtener la cantidad de UFC por 1 gr se dividió entre 10.

$$1\ \text{gr} = \frac{\text{UFC 10 gr}}{10}$$

Siembras individuales

De cada caja de Petri obtenida por dilución, se eligieron colonias de bacterias, hongos y actinomicetos diferenciadas visualmente para sembrarlas en nuevas cajas, incubando a la temperatura correspondiente.

En el caso de los hongos, estos se sembraron con una navaja, esterilizando la punta a la flama, se eligieron las cajas que contenían hongos, se realizó un corte cuadrangular pequeño, se ingresó a una nueva caja y se selló.

Morfología de las colonias de bacterias y actinomicetos

En caso de las bacterias las colonias se diferenciaron de los actinomicetos por medio del tamaño, el color, la forma, el borde, la elevación y la superficie:

- Forma: circular, puntiforme, irregular, rizoide, filamentoso
- Borde: entero, ondulado, lobulado o filamentoso
- Elevación: plana, elevada, convexa, crateriforme, y acuminada.
- Superficie: lisa o rugosa, mate o brillante, seca o cremosa

Tinción Gram

La tinción de Gram se realizó de acuerdo con la técnica reportada por Hans Christian Joachim Gram (Casasola, 2022). Una vez realizada la tinción para cada colonia de bacterias y actinomicetos aislados, se observó bajo el microscopio con el objetivo de 100x, para identificar su forma bacteriana y diferenciar su carácter como Gram positiva (+) o Gram negativa (-).

Identificación taxonómica de los hongos

Después de realizar un corte del hongo, se agregó al portaobjetos, se hizo una tinción con azul de metileno, después de colocar el cubreobjetos, se observó bajo el microscopio para localizar estructuras reproductivas, el tipo de hifas si son cenocíticas o septadas y para identificarlos a nivel de género el hongo.

RESULTADOS

Unidades Formadoras de Colonias (UFC)

Las UFC de bacterias durante el proceso de compostaje, fueron diversas y numerosas, en el control se observó un incremento de los MM. En la Figura 1 se observa que a partir del segundo día de compostaje se incrementaron las UFC, que corresponden a MT. Con el paso del tiempo, a partir del día 6 por la tarde, decayó la temperatura debido a la pérdida de agua, lo que interrumpió el proceso; al añadir agua, en días posteriores se incrementó la temperatura y la actividad biológica continuó, hasta que la temperatura se estabilizó y los MT fueron remplazados por los MM. Aunque en menor número, los MM continuaron con le descomposición de la materia orgánica y la maduración del compost.

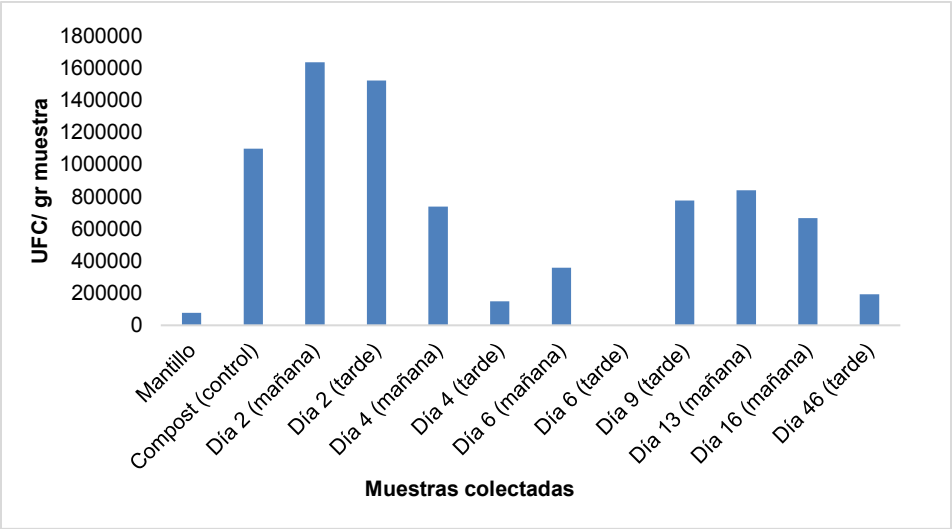


Figura 1. Unidades formadoras de colonias a lo largo del tiempo.

Morfología de las bacterias

La morfología de las colonias bacterianas fue variable, la mayoría presentó un color blanco, de tamaño grande, con una forma puntiforme, de elevación plana con superficie lisa, brillante y cremosa (Figura 2). Las colonias bacterianas más numerosas son de la última muestra, el día 46 por la tarde.

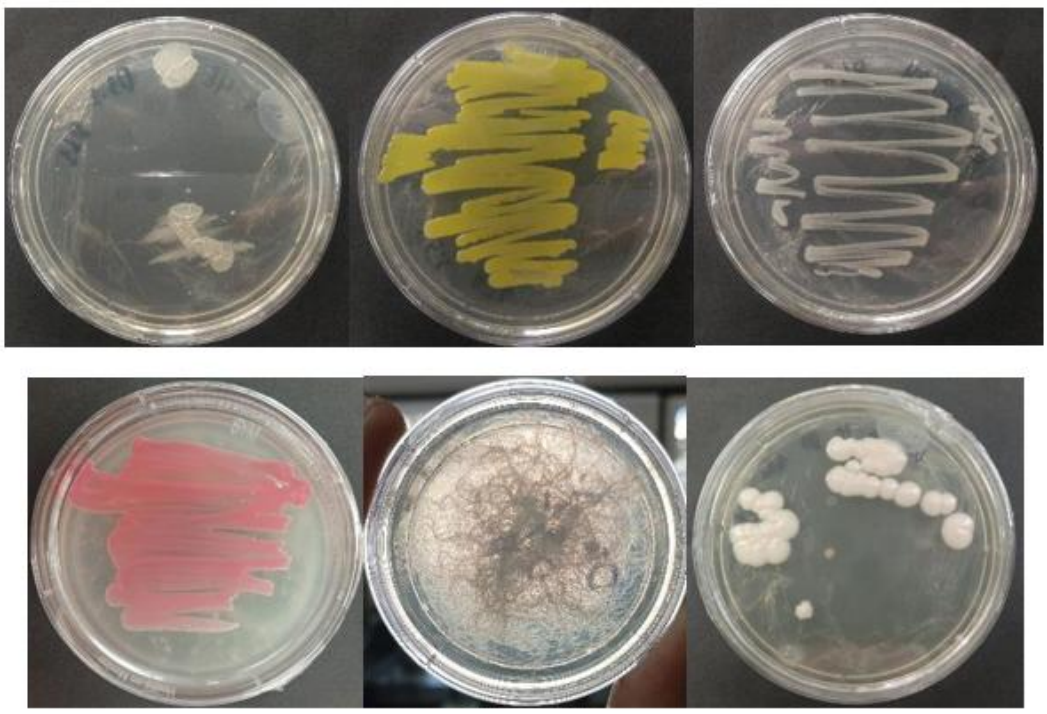


Figura 2. Morfología de las colonias de bacterias.

Los actinomicetos presentaron en su mayoría un color blanco, filamentosos e irregulares, ondulados o filamentosos, elevados acuminadas, rugosos, mate y secos, el aspecto es similar a los hongos. Todos los actinomicetos se encontraron en la fase termófila desde el día 2 hasta el día 9 (Figura 3).

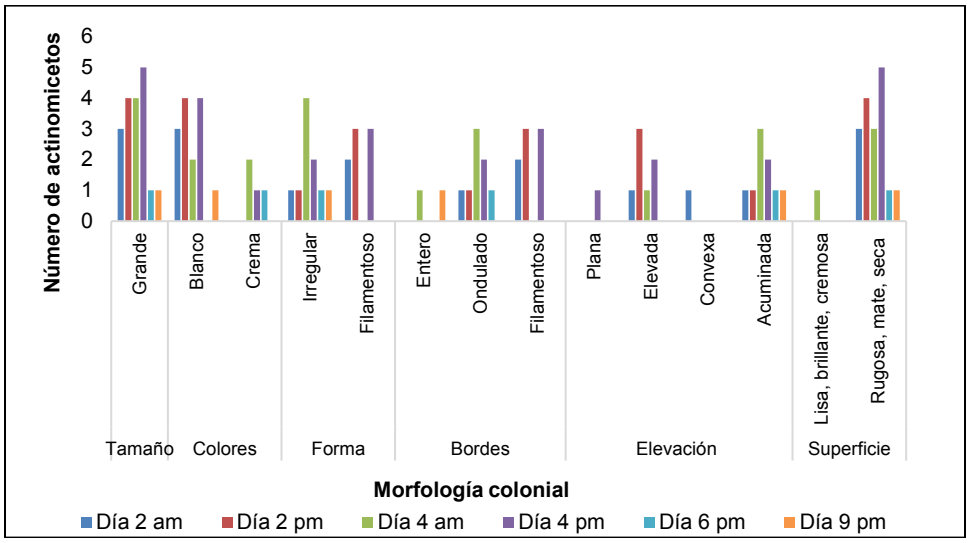


Figura 3. Número y morfología de Actinomicetos.

Tinción Gram de las bacterias y actinomicetos

En el mantillo de bosque en la etapa inicial del compostaje se encontraron 7 bacterias, posteriormente hay un incremento de bacterias 20 bacterias 13 Gram (+) y 7 Gram (-). A partir del día 2, cuando la temperatura aumenta aparecen gran número de bacterias termófilas y actinomicetos Gram (+), en mayor número con respecto a las Gram (-). La muestra con mayor número de bacterias encontradas fue del día 46 encontrando 13 bacterias Gram (+) y 11 Gram (-) encargadas de la maduración del compost.

Las formas bacterianas (FB) son cocos (forma esférica) con un total de 87, en comparación con los bacilos (forma de bastón) son menos numerosos de 15. Del mismo modo, la FB de los actinomicetos que se identificaron son 9 cocos y 9 bacilos (Cuadro 1).

Cuadro 1. Presencia de bacterias y actinomicetos durante el proceso de compostaje.

Muestra	Fase	T (°C)	No. Bacterias	No. Actinomicetos	No. FB	No. Gram (+)	No. Gram (-)	Total
Mantillo	Mesófila		7		6 cocos, 1 bacilo	4	3	7
Compost (control)	Mesófila	22	20		18 cocos, 2 bacilos	13	7	20
Día 2 am	Termófila	51	1	3	2 cocos, 2 bacilos	4		4
Día 2 pm	Termófila	60	1	4	3 cocos, 2 bacilos	5		5
Día 4 am	Termófila	69	3	4	6 cocos, 1 bacilo	7		7
Día 4 pm	Termófila	69		5	2 cocos, 3 bacilos	5		5
Día 6 am	Termófila	70	9		7 cocos, 2 bacilos	9		9
Día 6 pm	Termófila	43	5	1	5 cocos, 1 bacilo	3	3	6
Día 9 pm	Termófila	70	10	1	7 cocos, 4 bacilos	7	4	11

Día 13 am	Termófila	65	12		10 cocos, 2 bacilos	8	4	12
Día 16 am	Termófila	67	10		9 cocos. 1 bacilo	8	2	10
Día 46 pm	Mesófila	22	24		21 cocos, 3 bacilos	13	11	24

En total se encontraron 102 bacterias, 68 Gram positiva (+) y 34 Gram negativa (-), mientras que los actinomicetos son un tipo de bacteria Gram (+) con un total de 86 bacterias Gram (+) junto con los 18 actinomicetos forman 120 bacterias a través del proceso de compostaje (Cuadro 2).

Cuadro 2. Bacterias y actinomicetos Gram (+) Gram (-).

Número total de bacterias y actinomicetos			
	No. Gram (+)	**No. Gram (-)**	**Totales**
Bacterias mesófilas	30	21	51
Bacterias termófilas	38	13	51
Actinomicetos	18		18

Identificación taxonómica de los hongos

Los 11 hongos encontrados en el compost son septados, los demás son cenocíticos que forman parte del Phylum Zigomycota. Los hongos patógenos encontrados como en el caso de *Fusarium* aparecieron en la fase inicial del compost, conforme pasó el tiempo se eliminaron del sustrato y empezaron a dominar otros hongos saprófitos que se encargan con la descomposición de materia orgánica. Sin embargo, 3 hongos no se pudieron identificar debido a lo ausencia de estructuras reproductoras sexuales, debido a que no se identificaron a nivel de género se les denominó morfotipo (MF), estos tres hongos presentan hifas septadas, por lo que pueden formar parte del grupo Ascomycota o Basidiomycota (Cuadro 3). Los hongos encontrados en la última muestra indica que hay mucha materia orgánica que ayudaran a su descomposición liberando nutrientes.

Cuadro 3. Identificación taxonómica de los hongos presentes en el compost a lo largo del tiempo.

	Muestra	**Fase**	**Phylum**	**Suphylum**	**Clase**	**Orden**	**Familia**	**Género**
Hongo 1	Compost (control)	Mesófila	Ascomycota	Pezizomycotina	Sordariomycetes	Hypocreales	Hypocreaceae	*Fusarium*
Hongo 2	Día 2 pm	Termófila	Zigomycota	Mucoromycotina	Mucoromycetes	Mucorales	Mucoraceae	*Rizhopus*
Hongo 3	Día 4 pm	Termófila	Ascomycota/ Basidiomycota					MF1
Hongo 4	Día 9 pm	Termófila	Ascomycota	Pezizomycotina	Dothideomycetes	Pleosporales	Pleosporaceae	*Alternaria*
Hongo 5	Día 13 am	Termófila	Ascomycota/ Basidiomycota					MF2
Hongo 6	Día 13 am	Termófila	Ascomycota	Pezizomycotina	Sordariomycetes	Microascales	Microascaceae	*Scopulariopsis*

Hongo 7	Día 13 am	Termófila	Ascomycota	Pezizomycotina	Dothideomycetes	Cladosporiales	Cladosporiaceae	*Cladosporium*
Hongo 8	Día 46 pm	Mesófila	Zigomycota	Mucoromycotina	Mucoromycetes	Mucorales	Mucoraceae	*Mucor*
Hongo 9	Día 46 pm	Mesófila	Ascomycota	Pezizomycotina	Sordariomycetes	Hypocreales	Hypocreaceae	*Trichoderma*
Hongo 10	Día 46 pm	Mesófila	Ascomycota	Pezizomycotina	Sordariomycetes	Hypocreales	Hypocreaceae	Acremonium
Hongo 11	Día 46 pm	Mesófila	Ascomycota/ Basidiomycota					MF3

CONCLUSIONES

Las bacterias fueron los microorganismos dominantes durante todo el proceso de compostaje incluyendo a los actinomicetos, en ambos casos presentaron una variedad de formas, tamaños y colores. Los hongos se presentaron en menor cantidad, sin embargo, resultaron indispensables en la descomposición de la materia orgánica, formaron un ecosistema microbiano dinámico para la degradación de los distintos materiales que tiene el sustrato. Estos microorganismos son la base fundamental en la transformación de los materiales reunidos durante el proceso de compostaje a un abono orgánico rico en nutrientes disponibles para la germinación, el crecimiento y el desarrollo de las plantas de pino.

BIBLIOGRAFÍA

1. Casasola Bado, M. J. (2022). La importancia de realizar una correcta tinción de Gram en la identificación bacteriana. Revista Colegio de Microbiología química clínica de Costa Rica Vol. 27. Costa Rica.
2. Ferrera-Cerrato, R., & Alarcón, A. (2014). Microbiología agrícola hongos, bacterias, micro y macrofauna, control biológico y plantas-microorganismos. Primera edición. Trillas, 2007. México. 49 pp.
3. Garcés de Granada, E., Correa de Restrepo, M., Coba de Gutiérrez, B., Orozco de Amézquita, M., Zapata, A. C., Anacona Chingana, A., & Sabogal, S. P. (2003). Morfología y clasificación de los hongos. Departamento de biología. Facultad de Ciencias Universidad Nacional de Colombia. Bogotá, Colombia. 1-19 p.
4. González-León, Y. Ortega-Bernal, J., Anducho-Reyes, M.A., & Mercado-Flores, Y. (2022). *Bacillus subtilis* y *Trichoderma*: Características generales y su aplicación en la agricultura. Revista especializada en ciencias químico-biológicas, vol.25. Universidad Nacional Autónoma de México. Facultad de Estudios Superiores Zaragoza.
5. Javed, Z., Datta Tripathi, G., Mishra, M., & Dashora, K. (2021). Actinomycetes the microbial machinery for the organic cycling, plant growth, and sustainable soil health. Biocatalysis and Agricultural Biotechnology. Vol 31. 101983.
6. Laich, F. (2011). El papel de los microorganismos en el proceso de compostaje. Unidad de Microbiología aplicada. Instituto Canario de Investigaciones Agrarias.
7. Moreno Casco, J., & Moral Herrero, R. (2011). Compostaje. Ediciones Mundi-prensa. Madrid, España. 66 pp.
8. Pírez, M., & Mota, M. (2006). Morfología y estructura bacteriana. Temas de bacteriología y virología médica, 23-42 p.
9. Román, P., Martínez, M. M., & Pantoja, A. (2013). Manual de compostaje del agricultor experiencias en América latina. Organización de las Naciones Unidas para la alimentación y la agricultura. Santiago, Chile. 18-30 pp.

CALIDAD DEL SUELO EN FUNCIÓN DE LA MATERIA ORGÁNICA

María Alcalá De Jesús, Mariela Casillas Corona; Jacqueline Arreola Coronel; María Elena Granados García

Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.
tupuri12@yahoo.com.mx

RESUMEN

La materia orgánica (MO) es un indicador clave para determinar la calidad y fertilidad de un suelo. La fertilidad es la capacidad que el suelo tiene para sostener vegetación, lo cual depende de la disponibilidad de nutrientes, retención de agua y de un espacio físico para el crecimiento de las plantas. La abundancia de MO también define la calidad, así se tienen suelos muy fértiles, mientras que los bajos en MO presentar limitaciones en la producción de las plantas y existe riesgo a la pérdida del suelo. Para determinar la calidad de un suelo se han adoptado diversos indicadores, entre ellos, el contenido de MO, uno de los más utilizados. Alto contenido de MO, contribuye en el mejoramiento de la estructura del suelo y en el incremento de la actividad biológica, en cambio, su disminución o pérdida implica procesos de degradación. Al sureste de la presa Cointzio en el municipio de Morelia, Michoacán, se están realizando prácticas de reforestación en áreas degradadas y se requiere saber si la calidad del suelo es adecuada para el desarrollo de las plantas. El objetivo fue evaluar la calidad del suelo en función de la materia orgánica. Se colectaron 71 muestras de suelo dentro de los primeros 30 cm de espesor. Se determinó el porcentaje de materia orgánica mediante el método de combustión húmeda de Walkley y Black. Se realizó una prueba de Kruskal Wallis para evaluar la MO y se determinó la condición del suelo con fines de fertilidad asociada a la calidad del suelo con base en lo establecido por Ibarra *et al.* (2007). De acuerdo con los promedios de MO, se obtuvieron cuatro clases: muy rica (6%), rica (3.4%), media (2.6%) y pobre (1.6%). Con base en la clasificación establecida por Ibarra *et al.* (2007), 66% de los suelos (muy ricos en MO) tienen condiciones favorables para mejorar la estructura y retener la humedad del suelo, son de fertilidad alta, contribuyen en la conservación y su productividad; 20% (ricos en MO) son de buena fertilidad y participan en la conservación del suelo; 11% (clase media en MO) son de fertilidad regular, pero limitan la conservación y la productividad del suelo; 3% (clase pobre en MO), restringen la conservación del suelo con riesgo a su pérdida. La prueba de Kruskal Wallis evalúo las medianas de la MO dentro de cada clase, mostrando un valor de P menor a 0.05, lo que indica que existe diferencia estadísticamente significativa entre las medianas con un nivel de confianza de 95.0%. Se concluye que 86% de las muestras de suelo en el área de estudio indican suelos de buena calidad cuyos contenidos de MO muy ricos y ricos contribuyen en la conservación del suelo y su productividad, lo cual favorece el desarrollo de las plantas.

Palabras clave

Indicadores de calidad del suelo, fertilidad, degradación.

INTRODUCCIÓN

La materia orgánica es un importante componente de la biosfera vinculado a funciones ecológicas esenciales, entre ellas, la provisión de nutrientes para los cultivos, el mantenimiento de la calidad del agua, el almacenamiento de carbono (C) y la mitigación de las emisiones de gases efecto invernadero. La MO resulta de vital importancia para definir la calidad del suelo. El aporte que hace a las diferentes funciones en las que participa depende de su cantidad en los suelos (Quiroga *et al*., 2017) así como de un espacio físico para el crecimiento de las plantas (Sepúlveda *et al.,* 2010). La fertilidad depende en gran parte del contenido de MO y ésta proviene de la desintegración de los residuos de la vegetación que sostiene y que se van acumulando en la superficie de los suelos, siendo más alto en los primeros centímetros de espesor. La MO además de ser un indicador de

fertilidad, es también un indicador de calidad del suelo, tanto para la agricultura como para las cuestiones ambientales.

Una clasificación de suelos con fines de fertilidad–calidad se ha reportado por Ibarra *et al.* (2007) de acuerdo con el contenido de MO, también define la calidad, así se tienen suelos muy fértiles, mientras que los bajos en MO presentar limitaciones en la producción de las plantas y existe riesgo a la pérdida del suelo. Para determinar la calidad de un suelo se han adoptado diversos indicadores, entre ellos, el contenido de MO, uno de los más utilizados. Alto contenido de MO, contribuye en el mejoramiento de la estructura del suelo y en el incremento de la actividad biológica, en cambio, su disminución o pérdida implica procesos de degradación. Al sureste de la presa Cointzio en el municipio de Morelia, Michoacán, se están realizando prácticas de reforestación en áreas degradadas y se requiere saber si la calidad del suelo es adecuada para el desarrollo de las plantas.

ÁREA DE ESTUDIO

El área de estudio se localiza en el ejido Santa Rosalía, al sureste de la Presa Cointzio, municipio de Morelia, Michoacán (Figura 1); rocas Ígneas extrusivas; suelo Luvisol caracterizado por un horizonte árgico, cuya función es acumular arcillas de alta actividad en los horizontes subsuperficiales (Prontuario de Morelia, 2010).



Figura 1. Localización del área de estudio en el ejido Santa Rosalía, al sureste de la Presa Cointzio, municipio de Morelia, Michoacán.

Clima templado subhúmedo con lluvias en verano; temperatura media anual de 17.6 °C y precipitación media anual de 790.1 mm. En la Figura 2 se muestra un climograma realizado con datos de la estación meteorológica Cointzio correspondiente al periodo de 1971 a 2000 (Ramos, 2012).

METODOLOGÍA

Se realizaron perfiles de suelo a 30 cm de profundidad (Figura 3); se colectaron muestras de suelo en bolsas de plástico con su respectiva etiqueta; se secaron a la sombra en un sitio ventilado; se

trituraron en mortero de porcelana y se pasaron por un tamiz de 2.0 mm de diámetro para obtener la fracción de tierra fina requerida para el análisis químico.

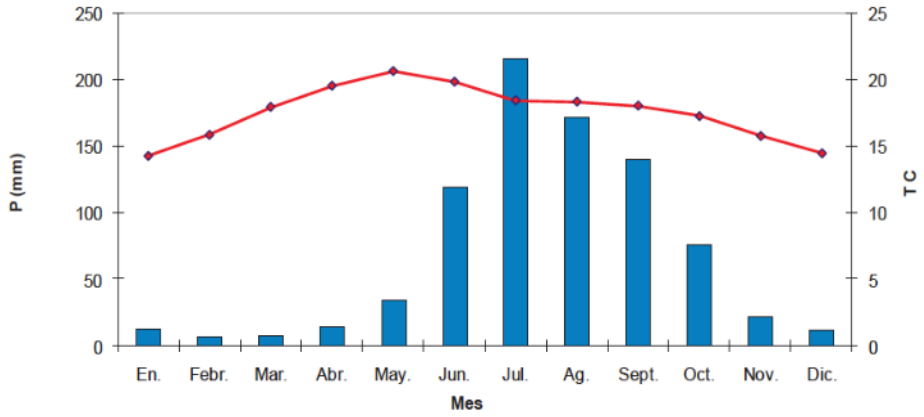


Figura 2. Climograma de la estación Cointzio (Ramos 2012).



Figura 3. Perfiles de suelo a 30 cm de espesor en el ejido de Santa Rosalía al sureste de la Presa Cointzio, municipio de Morelia, Michoacán.

Se determinó la materia orgánica con el método de combustión húmeda de Walkley y Black (SEMARNAT, 2001). Se realizó una prueba de Kruskal Wallis con el programa de statgraphics para evaluar la MO y se determinó la condición del suelo con fines de fertilidad asociada a la calidad del suelo con base en lo establecido por Ibarra *et al.* (2007) (Cuadro 1).

Cuadro 1. Fertilidad de los suelos con base en el contenido de MO

Materia orgánica	Clase	Fertilidad y conservación de suelos
%		
≥ 4.0	Muy rica	Alta fertilidad. Contribuye en la conservación y productividad del suelo.
3.0 - 3.99	Rica	Fertilidad adecuada o buena. Contribuye a la conservación del suelo.
2.0 - 2.99	Media	Regula la fertilidad de los cultivos. Limita la conservación y productividad.
1.0 - 1.99	Pobre	Restringe la conservación y productividad. Riesgo a la pérdida del suelo.

RESULTADOS

De acuerdo con los promedios de materia orgánica, se obtuvieron cuatro clases: muy rica (6%), rica (3.4%), media (2.6%) y pobre (1.6%) (Figura 4). Con base en la clasificación establecida por Ibarra *et al.* (2007), 66% de los suelos (muy ricos en MO) tienen condiciones favorables para mejorar la estructura y retener la humedad del suelo, son de fertilidad alta, contribuyen en la conservación y su productividad, además, se mejora la estructura y aumenta la actividad biológica en los suelos, lo cual beneficia la productividad y la calidad edáfica (Rattan *et al*., 2004); 20% (ricos en MO) son de buena fertilidad y participan en la conservación del suelo; 11% (clase media en MO) son de fertilidad regular, pero limitan la conservación y la productividad del suelo; 3% (clase pobre en MO), restringen la conservación del suelo con riesgo a su pérdida.

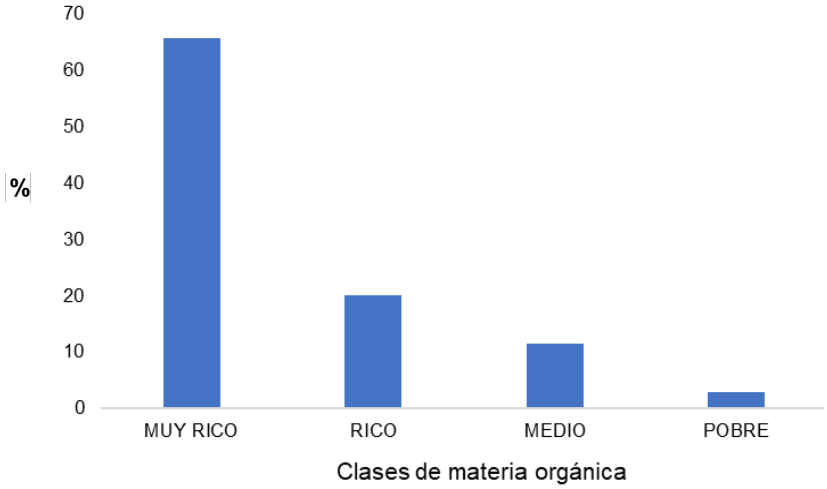


Figura 4. Materia orgánica del suelo del área de estudio en el ejido Santa Rosalía al sureste de la Presa de Cointzio, municipio de Morelia, Mich.

El análisis estadístico de la prueba no paramétrica de Kruskal-Wallis muestra diferencias significativas dentro del contenido de materia orgánica de las clases analizadas con un valor de **P < 0.05**, ésto indica que existe diferencia estadísticamente significativa entre las medianas con un nivel de confianza de 95 % (Figura 5)

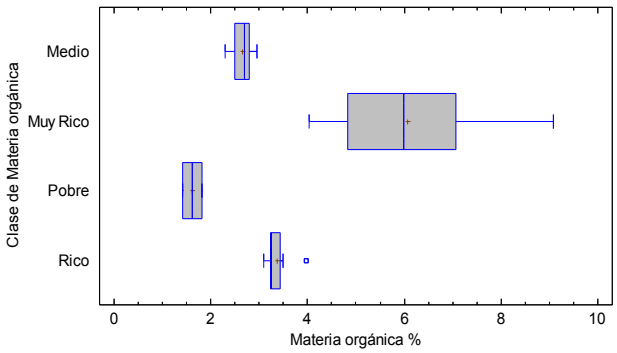


Figura 5. Prueba de Kruskal-Wallis en clases de materia orgánica del suelo en el ejido Santa Rosalía al sureste de la Presa de Cointzio, municipio de Morelia, Mich.

CONCLUSIONES

Ochenta y seis por ciento de las muestras del área evaluada indican suelos de buena calidad con clases de materia orgánica muy ricos y ricos. Mientras más alto es este nivel, se optimizan las propiedades físicas del suelo, mejorando la estructura y la retención hídrica. Esto favorece directamente la fertilidad natural, disponibilidad de nutrientes esenciales y conservación del suelo, garantizando una alta sostenibilidad agrícola y productividad biológica a largo plazo. 11% de los suelos de clase media son de fertilidad y conservación regular. El resto, de clase pobre, presentan inminente riesgo a perderse. Estadísticamente existen diferencias significativas en el contenido de materia orgánica.

BIBLIOGRAFÍA

1. Ibarra, E. (2007). Introducción de especies leñosas para la rehabilitación ecológica de sitios perturbados en el poblado El Escobal del municipio de Morelia, Michoacán. Tesis profesional para obtener el grado de Bióloga, Facultad de Biología. Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.
2. Quiroga A., D. Funaro, R. Fernández y E. Noellemeyer. (2017). La materia orgánica como indicador de cambios en la calidad de los suelos influenciados por el manejo. *In* book: Manejo y conservación de suelos con especial énfasis en situaciones argentinas. Asociación Argentina de la Ciencia del Suelo
3. Ramos R., A. G. (2012). Relación entre el tiempo de cambio de uso del suelo y el nivel de degradación de los suelos en la cuenca de Cointizio, Michoacán. Tesis de Maestría en Ciencias Biológicas. Facultad de Biología, U.M.S.N.H.
4. Rattan, Lal (2004). Soil Carbon Sequestration Impacts on Global Climate Change and Food Security. Science 304, 1623. DOI:10.1126/SCIENCE.1097396.
5. SEMARNAT (2001). Norma Oficial Mexicana que establece las especificaciones de fertilidad, salinidad y clasificación de suelos. Estudios, muestreos y análisis (NOM-021-RECNAT-2000). Diario Oficial de la Nación. México, D. F.
6. Sepúlveda S. F., Tapia F. F. y Ardiles R. S. (2010). Beneficios de la materia orgánica en los suelos. Instituto de Investigaciones Agropecuarias, Centro de Investigación Especializado en Agricultura del Desierto y Altiplano (CIE), INIA URURI, Región de Arica y Parinacota. Ministerio de Agricultura. Informativo n° 23, abril de 2010.

NANOPARTÍCULAS ORGÁNICAS FOTOSENSIBILIZADORAS COMO ESTRATEGIA PARA LA DISMINUCIÓN DEL CRECIMIENTO MICROBIANO

Francisco Gabriel Martínez Iñiguez, Mónica Sarahí Chávez Pantoja, Xiadani González Velázquez, Mario Rodríguez.

Centro de Investigaciones en Óptica A.C.
gamartinez@cio.mx, mrodri@cio.mx

RESUMEN

Los procedimientos para reducir agentes bacteriológicos del agua son de gran interés debido a la problemática mundial asociada al acceso al agua potable [1]. En este trabajo se evaluó el efecto de nanopartículas de sílice funcionalizadas con un fotosensibilizador sobre el crecimiento microbiano bajo distintas condiciones de iluminación. Las nanopartículas se sintetizaron mediante una variación del método de Stöber, utilizando poliestireno como núcleo debido a sus propiedades inertes [2,3]. Posteriormente, la superficie fue funcionalizada con grupos amino (-NH_2), empleados como grupos enlazantes para la incorporación del colorante Rosa de Bengala (RB) mediante la formación de enlaces amida.

Las partículas se purificaron por centrifugación a 14500 rpm durante 45 minutos. Sus propiedades morfológicas se determinaron mediante dispersión dinámica de luz (DLS), obteniéndose una distribución de diámetros hidrodinámicos de 80±10 nm. El proceso de bioconjugación se confirmó mediante espectroscopía de absorción, estableciendo la presencia del fotosensibilizador en la superficie de las partículas. Las muestras de agua se recolectaron del río temporal al norte de la ciudad de León. La actividad fotosensibilizadora de las partículas bioconjugadas se evaluó mediante un método indirecto basado en la degradación de ácido úrico al excitar el fotosensibilizador con luz de 532 nm.

El crecimiento microbiano se analizó en medios de cultivo agar papa dextrosa (PDA), comparando muestras con y sin nanopartículas decoradas iluminadas con luz natural o luz verde artificial. Se utilizaron controles con agua contaminada y agua destilada. Los medios se prepararon con distintas concentraciones de nanopartículas y el crecimiento se monitoreó mediante observación directa y conteo de colonias durante dos días de incubación.

Los resultados mostraron que el agar simple no favorece el crecimiento microbiano por la falta de nutrientes, mientras que el medio PDA permitió observar claramente el desarrollo de bacterias y hongos. La exposición únicamente a luz verde no inhibió el crecimiento e incluso incrementó el número de colonias en algunos casos. En contraste, las muestras con nanopartículas presentaron una disminución significativa del crecimiento o un desarrollo más lento, efecto más evidente al combinar nanopartículas con iluminación. Asimismo, se observó que la concentración de nanopartículas y el tiempo de exposición a la luz influyen directamente en la viabilidad bacteriana.

INTRODUCCIÓN

La contaminación del agua representa uno de los principales problemas ambientales y de salud pública a nivel mundial. La presencia de microorganismos patógenos, materia orgánica y otros contaminantes puede comprometer la calidad del agua y provocar enfermedades en la población. Se estima que cada año millones de personas consumen agua contaminada, lo que contribuye a la propagación de enfermedades gastrointestinales e infecciosas. Debido a esta problemática, existe un interés creciente en el desarrollo de nuevas estrategias de desinfección que permitan eliminar microorganismos de manera eficiente y segura, reduciendo los riesgos asociados al consumo de agua de baja calidad. En 2022, 115 millones de personas recolectaron agua superficial de lagos, estanques, ríos y arroyos [1]. La necesidad de agua no se limita únicamente al acceso, sino que su

calidad es de suma importancia. Uno de estos motivos es por salud, existe una gran cantidad de enfermedades relacionadas al consumo de agua de mala calidad, provocando síntomas cómo diarrea, siendo que al año cerca de un millón de personas mueren de esta sintomática [1]. Además, al tener acceso a agua de calidad implicaría un aumento en su economía, evitando el gasto en medicamentos y tratamientos médicos, así como reduciendo el tiempo que podrían estar enfermos. Se estima que en el 2030, para que todas las personas tengan acceso a agua limpia, se necesitaría multiplicar por 6 los servicios potabilizadores de agua actuales.

En la actualidad existen diversos métodos para la desinfección del agua, de manera general se pueden clasificar en métodos químicos y métodos físicos, los más comunes son: la cloración, la ozonización, la irradiación ultravioleta y la filtración. Uno de los métodos químicos más empleados en los sistemas de tratamiento de agua potable es la cloración debido a su alta capacidad para eliminar bacterias, virus y otros microorganismos. Su importancia radica en su bajo costo, facilidad de aplicación y capacidad para mantener un efecto desinfectante residual durante el almacenamiento y la distribución del agua. Sin embargo, esta metodología genera subproductos potencialmente nocivos, como los trihalometanos y los ácidos haloacéticos, que han sido asociados con riesgos para la salud [5].

Otro de los métodos ampliamente utilizados es la ozonización, que emplea ozono como agente oxidante de sustancias orgánicas. Este proceso destaca por su eficiencia para destruir microorganismos y degradar compuestos orgánicos presentes en el agua. Además, el ozono mediante reacciones laterales puede generar radicales hidroxilos con un alto poder oxidante, lo que incrementa su capacidad de desinfección. No obstante, la implementación de este método requiere equipos especializados, un mayor consumo energético y puede dar lugar a la formación de subproductos secundarios, como iones bromatos [5].

Dentro de los métodos físicos, el uso de la luz ultravioleta constituye una alternativa eficaz para la inactivación microbiana. Este proceso se basa en el efecto de la radiación UV sobre el ADN y ARN de los microorganismos, ya que al dañarlos impide su reproducción. Una de sus principales ventajas es que no requiere la adición de reactivos químicos y que prácticamente no genera subproductos durante el tratamiento. Sin embargo, su efectividad se reduce con la transparencia del agua a tratar y de la exposición directa de los microorganismos a la radiación, por lo que presenta limitaciones cuando existen partículas suspendidas o elevada turbidez [5].

Por otra parte, la filtración es un proceso físico que se utiliza comúnmente como etapa previa a la desinfección. Su función principal consiste en remover partículas suspendidas y en algunos casos reducir la carga microbiana mediante el uso de membranas específicas. Este método mejora significativamente la calidad del agua y aumenta la eficiencia de los tratamientos posteriores. Sin embargo, debido a que algunos microorganismos pueden atravesar los sistemas de filtración o permanecer viables después del proceso, generalmente debe combinarse con otros métodos de desinfección para garantizar una eliminación completa de los agentes patógenos [5].

A pesar de la efectividad de estos métodos, cada uno presenta limitaciones relacionadas con la formación de subproductos, costos de operación o eficiencia. Por ello, existe un interés creciente en el desarrollo de tecnologías alternativas basadas en materiales fotosensibilizadores que son capaces de generar especies reactivas de oxígeno para la inactivación microbiana. Los fotosensibilizadores son moléculas orgánicas que tienen la capacidad de excitarse a una longitud de onda determinada y posteriormente transferir esa energía al medio que las rodea, promoviendo la formación de especies oxidantes. El mecanismo inicia con la absorción de luz que provoca una transición electrónica hacia un estado singulete y posteriormente ocurre un entrecruzamiento intersistema hacia un estado triplete, caracterizado por una mayor estabilidad y reactividad química. A partir de este estado excitado, el fotosensibilizador puede interactuar con el oxígeno molecular o con otras moléculas cercanas mediante transferencia de energía o de electrones, originando especies reactivas de oxígeno (ROS) como oxígeno singulete ($^1O_2$), peróxido de hidrógeno (H_2O_2), anión superóxido (O_2^-) y radical hidroxilo (•OH). Debido a su alta reactividad, estas especies participan en procesos de degradación y daño celular, razón por la cual los fotosensibilizadores han sido

ampliamente utilizados en aplicaciones como la terapia fotodinámica para inducir alteraciones controladas en proteínas, lípidos y ácidos nucleicos [6].

En este trabajo se presenta una metodología para fabricar nanofotosensibilizadores que busca disminuir la población bacteriana en el agua. Esta consiste en el uso de nanopartículas de sílice cuya superficie se bioconjuga con un fotosensibilizador comercial que, en conjunto con una fuente de luz de una longitud de onda específica, genera especies reactivas de oxígeno capaces de inactivar las bacterias presentes en el agua. Se utilizó poliestireno como matriz (núcleo) de las nanopartículas debido a sus propiedades ópticas (transparencia) y químicas (reactividad reducida) [3]. Para la fabricación de la pared de sílice se siguió una metodología basada en la desarrollada por Stöber, la cual consiste en la síntesis controlada de partículas de sílice a partir de compuestos silanos en solución, permitiendo obtener partículas esféricas con tamaños relativamente uniformes y con alta estabilidad superficial [2]. El método de Stöber convencional se enfoca principalmente en la obtención de partículas de sílice monodispersas en soluciones alcohólicas homogéneas, mientras que en el presente trabajo se emplea un sistema más complejo basado en la preparación de microemulsiones utilizando AOT y 1-butanol como surfactantes y co-surfactantes. Además, en esta metodología el poliestireno actúa como núcleo de la nanopartícula, generando una estructura tipo núcleo-coraza, a diferencia del método de Stöber donde las partículas son completamente de sílice. Finalmente, el proceso desarrollado incluye una etapa de funcionalización y bioconjugación con rosa de bengala, que conferirá propiedades fotosensibilizadoras a las nanopartículas para evaluarse en desinfección y degradación de materia orgánica.

PARTE EXPERIMENTAL

Fabricación de nanopartículas

En un vial se colocó el surfactante sulfosuccinato de dioctilo sal sódica (AOT), el co-surfactante 1-butanol, 1-metil-2-pirrolidinona (NMP) como disolvente orgánico y agua destilada. Una vez generada una solución homogénea se adicionó poliestireno (PS) disuelto en NMP. La capa de sílice se generó adicionando trietoxivinilsilano (VTES), mientras que para funcionalizar la superficie de sílice se adicionó 3-aminopropiltrietoxisilano (APTES). Posteriormente, las partículas fabricadas se purificaron mediante el uso de centrífuga y se lavaron con agua, finalmente estas se resuspenden en una solución acuosa de rosa de bengala (el fotosensibilizador), se adicionó una solución de clorhidrato de N-(3-dimetilaminopropil)-N′-etilcarbodiimida (EDC) usado para activar los grupos aminos y enlazar el fotosensibilizador a los grupos amino de la superficie.

Pruebas antibacterianas

Para el medio de cultivo se utilizó caldo de papa recién preparado. Posteriormente, se añadieron agar-agar y dextrosa monohidratada al caldo contenido dentro de un matraz Erlenmeyer. La mezcla se calentó a 165 °C durante 30 minutos, manteniendo la solución en agitación constante. Una vez completamente disuelto el agar, el medio se mantuvo bajo agitación sin calentamiento durante aproximadamente 20 minutos, con el fin de reducir la temperatura para verter el medio en cajas Petri.

Para el primer método a tres viales se les adicionó 2000 µL de agua encharcada a cada uno, al primer vial llamado “Control” se iluminó con luz verde durante 4 horas, al segundo vial llamado “Oscuridad” se le adiciono una suspensión de 500 µL de NPs bioconjugadas y este se mantuvo en oscuridad, al tercer vial llamado “Luz” se le adicionó 500 µL de una suspensión de NPs bioconjugadas y se mantuvo bajo iluminación con luz verde durante 4 horas. Posteriormente, 200 µL de la solución de cada vial se adicionó a la correspondiente caja Petri con sustrato que se etiquetaron con el nombre correspondiente al vial.

Para el segundo método se utilizaron tres cajas Petri con sustrato a los cuáles se les adicionó 200 µL de agua encharcada a cada una, la primera caja llamada “Luz natural” se iluminó con luz natural, la segunda caja llamada “Luz verde” solo se iluminó con luz verde, en cuanto a la tercera caja llamada “Nanos” se le adicionó 500 µL de la suspensión de NPs bioconjugadas y se iluminó con luz verde por 10 h.

RESULTADOS

Después de mantener las cajas Petri durante 10 horas de incubación, se contó la población microbiana dentro de los medios analizados, la primera metodología, presenta 300 colonias en la caja "Control", 180 colonias en la caja "Oscuridad", 90 colonias en la caja "Luz". Mientras que en las cajas Petri de la segunda metodología se realizó el conteo después de 18 horas, se obtuvo un total de colonias de 173 en la caja etiquetada como "Luz natural", 325 en la caja "Luz verde" y sólo 36 en la caja que contiene los nanofotosensibilizadores ("Nanos").

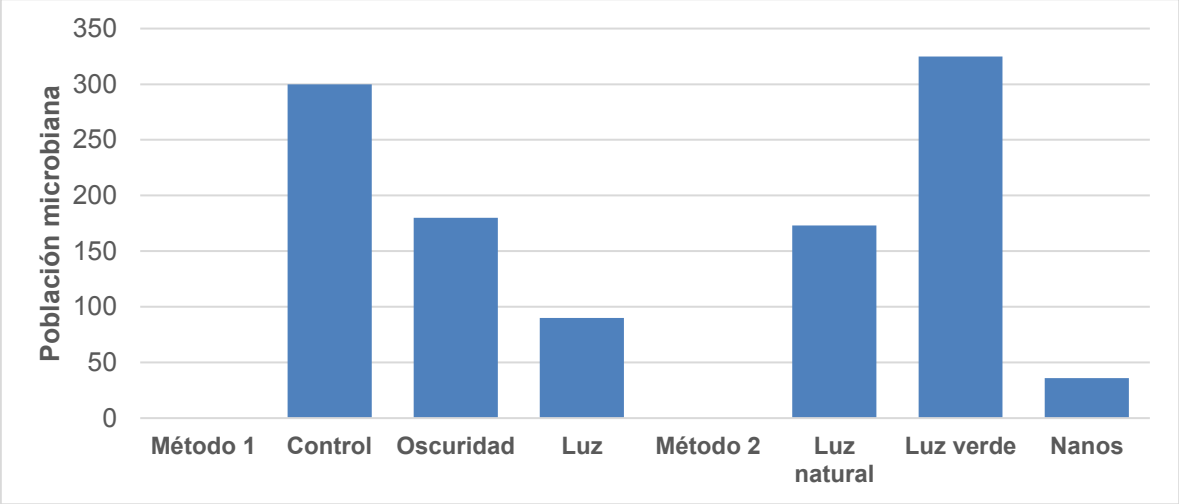


Figura 1.- Población microbiana obtenida para los experimentos utilizando ambos métodos.

CONCLUSIONES

Las nanopartículas bioconjugadas con rosa de bengala mostraron un efecto importante en la disminución del crecimiento microbiano de las muestras de agua contaminada, especialmente cuando fueron iluminadas con luz verde. Los resultados obtenidos indican que la combinación entre el fotosensibilizador y la iluminación favorece la generación de especies reactivas de oxígeno, las cuales participan en procesos de oxidación capaces de afectar la viabilidad de bacterias presentes en el medio de cultivo.

En general, este trabajo demuestra el potencial de las nanopartículas orgánicas decoradas con fotosensibilizador como una alternativa para la desinfección de agua. Además, los resultados obtenidos establecen bases para futuras investigaciones enfocadas en optimizar las condiciones de iluminación, concentración y funcionalización de las nanopartículas con el propósito de mejorar su eficiencia en procesos de control microbiológico.

BIBLIOGRAFÍA

1. World Health Organization. (2023). Drinking-water. World Health Organization. https://www.who.int/news-room/fact-sheets/detail/drinking-water
2. Stöber, W.; Fink, A.; Bohn, E. Controlled growth of monodisperse silica spheres in the micron size range. Journal of Colloid and Interface Science, 1968, 26(1), 62–69.
3. Singh, A., Chauhan, A., & Gaur, R. (2025). A comprehensive review on the synthesis, properties, environmental impacts, and chemiluminescence applications of polystyrene (PS). Discover Chemistry, 2(1), 47.
4. Yan, Z., Jin, X., Feng, C., Leung, K. M. Y., Zhang, X., Lin, Q., & Wu, F. (2025). Beyond the single-contaminant paradigm: Advancing mixture toxicity and cumulative risk assessment in environmental toxicology. Environmental Science & Technology, 59(22), 10711–10714. https://doi.org/10.1021/acs.est.5c05712

5. An T, Zhao H, Wong PK. Introduction. Advances in Photocatalytic Disinfection. 2016 Nov 22:1–16. doi: 10.1007/978-3-662-53496-0_1.
6. Roblero-Bartolón, G. V., & Ramón-Gallegos, E. (2015). Uso de nanopartículas (NP) en la terapia fotodinámica (photodynamic therapy [PDT]) contra el cáncer. Gaceta medica de Mexico, 151(1), 85-98.

EFECTO DEL EXTRACTO ETANÓLICO DE *Eryngium Carlinae* EN MARCADORES DE ESTRÉS OXIDANTE EN HÍGADO DE RATA CON ENFERMEDAD HEPÁTICA NO ALCOHÓLICA

Daniela Gómez Guillén [1], Claudia Isabel García Berumen [2], Jenaro Lemus de la Cruz [2], Alfredo Saavedra Molina [2].

Facultad de Químico Farmacobiología [1] , UMSNH, Instituto de Investigaciones Químico-Biológicas UMSNH [2] .
1900238e@umich.mx

RESUMEN

La enfermedad hepática no alcohólica (EHNA) es una manifestación clínico-patológica que se define como la acumulación excesiva de grasa en el hígado en forma de ácidos grasos y triacilglicéridos denominada esteatosis; forma parte del síndrome metabólico, junto con la resistencia a la insulina, diabetes tipo 2, obesidad, hipertensión. Dicha enfermedad causa alteraciones en la señalización de las vías de supervivencia, aumento en la expresión de genes fibrogénicos, inflamación, estrés oxidante, entre otros. Se ha sugerido que el extracto etanólico de *Eryngium carlinae* (*E. carlinae*) presenta efectos benéficos al disminuir los niveles de lípidos y glucosa, como un efecto positivo durante la diabetes, además de tener efecto anti inflamatorio y mejorar la función hepática. El modelo experimental fueron ratas Wistar machos de 3 meses de edad con un peso de 350g, alimentadas con una dieta alta en grasa, carbohidratos más fructosa para desarrollar la enfermedad hepática. Administradas con 30 mg del extracto etanólico de *E. carlinae.* Los niveles de triglicéridos y glucosa fueron medidos. Una vez terminado el tratamiento, se extrajo el hígado y se prepararon los homogenados de acuerdo al método descrito por Saavedra-Molina y Devlin (1997). Después, se detectó la expresión de proteínas antioxidantes mediante Western blot empleando los anticuerpos primarios para catalasa, keap1 y SOD2; tambien se evaluó el estrés oxidante en hígado mediante la actividad de los citocromos b y c + c1, los cuales forman parte del complejo III en la cadena de transporte de electrones, principal generador de especies reactivas de oxígeno en la mitocondria. Los resultados obtenidos sugieren que el extracto etanólico de *E. carlinae* ejerce un efecto sobre los niveles de estrés oxidante, lo que indica un posible papel protector a nivel celular. Por lo tanto, el extracto etanólico de *Eryngium carlinae*, es una alternativa natural prometedora con potencial terapéutico, específicamente, como una estrategia preventiva frente al daño asociado al estrés oxidante.

INTRODUCCIÓN

La esteatosis hepática, caracterizada por la acumulación excesiva de ácidos grasos y triacilglicéridos en el hígado, es una de las principales manifestaciones de la enfermedad hepática no alcohólica (EHNA). Esta patología forma parte del síndrome metabólico y se relaciona con resistencia a la insulina, diabetes tipo 2, obesidad, hipertensión, entre otras alteraciones. Además, ocasiona cambios en las vías de señalización asociadas a la inflamación y el estrés oxidante. El estrés oxidante se define como un desequilibrio entre las especies reactivas de oxígeno (ERO) y la capacidad del organismo para neutralizarlas mediante mecanismos antioxidantes; estas moléculas son altamente reactivas y pueden causar daño celular o contribuir al desarrollo de diversas enfermedades. Asimismo, una dieta alta en grasas y carbohidratos, junto con un elevado consumo de fructosa, aumenta el riesgo de desarrollar resistencia a la insulina, diabetes tipo 2 y enfermedades hepáticas como la EHNA.

La planta *Eringyum carlinae,* conocida conmúnmente como “hierba del sapo”, es una especie fanerógama perteneciente a la familia *Apiáceae* a la cual debido a sus propiedades, es utilizada en la medicina tradicional mexicana, ya que se le atribuyen efectos antioxidantes. Además, se ha sugerido que su extracto etanólico presenta efectos beneficos al disminuir los niveles de lípidos y glucosa teniendo un efecto positivo durante la diabetes, además de tener efecto antinflamatorio y mejora la función hepática.

TEORÍA

El hígado es el órgano glandular más grande del cuerpo, lleva a cabo funciones como el metabolismo de la fructosa, la desintoxicación, síntesis de proteínas, almacenamiento de nutrientes, etc. Es uno de los principales contribuyentes al mantenimiento de los mecanismos homeostáticos (Mahadevan,2020).

Una dieta alta en grasas y carbohidratos puede desencadenar obesidad, hiperinsulinemia, hiperglucemia, hipertensión, daño hepático o todas aquellas características principales de un síndrome metabólico. El resultado de llevar una dieta excesiva y falta de ejercicio físico, conlleva al aumento del contenido de lípidos tanto en el tejido adiposo como el no adiposo y, a través de la lipotoxicidad, conduce a la disfunción celular, especialmente en el hígado (Lian et al., 2020). Actualmente, se relaciona al tipo de dieta con la progresión de esteatosis hepática. La grasa se acumula en los hepatocitos cuando el aporte celular de los ácidos grasos, ya sea por ingestión o síntesis, supera la salida de ácidos grasos por oxidación o exportación, como en el caso de la dieta rica en grasas (Valenzuela et al., 2015).

La enfermedad del hígado graso no alcohólico (EHNA) se caracteriza por la acumulación de lípidos en los hepatocitos y, en estados avanzados, por inflamación y fibrosis. La producción excesiva de especies reactivas de oxígeno (ERO) es debido a la disfunción mitocondrial, ya que la desregulación de proteínas relacionadas con los procesos de fisión y fusión, las ERO provocan cambios morfológicos en las membranas interna y externa de este orgánulo, modificando el potencial de membrana mitocondrial, lo que conlleva a alteraciones en la función de la cadena transportadora de electrones y con esto, una fuga de ERO pricipalmente desde los complejos I y III (Poblete-Aro et al., 2018), lo que provocara un estado de estrés oxidante y así se contribuye al desarrollo de EHNA. Sin embargo, hasta el momento, no se ha aprobado ningún fármaco para el tratamiento de EHNA. Esto ha instado a la búsqueda de nuevas estrategias para atenuar la progresión de EHNA (García-Berumen et al., 2022).

La planta *Eryngium carlinae* también conocida como la “hierba del sapo”, es una planta fanerógama perteneciente a la familia de las apiáceas, la cual debido a sus propiedades, es utilizada en la medicina tradicional mexicana ya que se le atribuyen efectos antioxidantes, hipoglucemiantes e hipolipidémicos. Se ha sugerido que el extracto etanólico de *E. carlinae*, presenta efectos benéficos al disminuir los niveles de lípidos, glucosa, creatinina, ácido úrico, colesterol total y triacilglicéridos (Noriega-Cisneros et al., 2012; Saavedra-Molina et al., 2024; Peña-Montes et al., 2019).

PARTE EXPERIMENTAL

Ratas Wistar macho de 3 meses de edad con un peso de 350g, fueron alimentadas con una dieta alta en grasa, carbohidratos más fructosa para desarrollar la enfermedad hepática. Al mes de tratamiento fueron administradas con 30mg del extracto etanólico de *Eryngium carlinae.* Los niveles de triglicéridos y glucosa fueron medidos cada mes. Una vez terminado el tratamiento, previo al sacrificio, se realizó una curva de tolerancia a la glucosa, posterior al sacrificio, se extrajo el suero sanguíneo por centrifugación para obtener la medición final de la glucosa, de los triacilglicéridos y de la fosfatasa alcalina. El análisis de medición se realizó por doble ciego en el laboratorio veterinario Cocan. Por otro lado, tambien se extrajo el hígado, se prepararon los homogenados y se extrajeron mitocondrias de acuerdo al método descrito por Saavedra-Molina y Devlin (1997). Los homogenados fueron tratados con proteasas para evitar su degradación y se realizó una dilución 1:9.

Grupos:	Meses de tratamiento: 0 1 2 3 4 5
Control (CTRL)	I ——— S
Enfermo (G3)	D ——— S
Enfermo + EC (G4)	D — EC — S
Enfermo + DE + EC (G5)	D ——— DE+EC ——— S

30 mg/Kg de peso corporal del extracto de *E.Carlinae*

Tabla 1. Distribución al azar de las ratas en los diferentes grupos, más el tiempo de su respectivo tratamiento.

determinó la cantidad de proteína a emplear mediante el método de Lowry. Los homogenados (40 ug) fueron mezclados 1:1 con buffer Laemmli (SDS 10%, glicerol, Tris 0.5 M pH 6.8, 2-Mercaptoetanol 20%, azul de bromofenol 0.01% y agua desionizada c.b.p.) para poder iniciar el proceso de desnaturalización de proteínas en un baño María a 100 °C durante 5 minutos. Transcurrido el tiempo, se pasaron a un baño de hielo para detener la reacción, para posteriormente colocar las muestras en los pozos de carga de los geles de poliacrilamida al 8%, 10% y 12%, los cuales se corrieron a 100 volts y, después por transferencia húmeda, fueron movilizados a una membrana de fluoruro de polivinilideno (PVDF) a 100 volts durante 1 hora. Después, las membranas fueron bloqueadas con buffer TBST (Tris-HCl 10 mM, NaCl 150 mM y Tween-20 0.5%, pH 7.6) y leche en polvo baja en grasa al 5% por 2 horas en agitación constante. Una vez terminado el tiempo de bloqueo, las membranas fueron incubadas con los anticuerpos primarios monoclonales y policlonales obtenidos de Santa cruz biotechnology: Keap1 (SC-514914), SOD-2 (SC-30080) y catalasa (SC-34280) como marcador antioxidante; actina (SC-47778) como control de carga, todos fueron empleados a una concentración de 10:10000. Posteriormente, se emplearon anticuerpos secundarios monoclonales Goat anti-mouse (SC-2005) y Donkey anti-mouse (SC-2306) y como anticuerpos secundarios policlonales Donkey anti-rabbit (SC-2313) y Mouse anti-goat (SC-2354) de Santa cruz biotechnology, todos a una concentración de 8:10000. Finalmente, fueron revelados por quimioluminiscencia en un fotodocumentador Biorad modelo No. universal Hood III.

Para evaluar la reducción de los citocromos *b* y *c+c1* en mitocondrias de hígado de rata, se utilizó un espectrofotómetro de doble haz Shimadzu UV 2550. Las mitocondrias fueron aisladas por centrifugación diferencial de acuerdo con el método descrito por Saavedra-Molina y Devlin (1997). En una celda (el blanco), solo se adicionó 2 ml de una solución tampón de KH_2PO_4 50 mM (pH 7.4); en otra celda, se colocaron 1.0 mg/ml de mitocondrias y la misma solución tampón de KH_2PO_4 para un volumen final de 2 ml. Se registró una línea basal de ambas celdas entre los 500 y 580 nm, posteriormente, a la celda que contenía la muestra de mitocondrias, se le adicionó succinato 10 mM y se incubó durante 5 minutos para reducir los citocromos. Transcurrido el tiempo, se le adicionó KCN 0.75 mM para bloquear la reoxidación de los citocromos por el complejo IV. La celda del blanco solo es oxidada con aire. Para finalizar, ambas celdas fueron colocadas en el espectrofotómetro y se realizó un escaneo de entre 500 y 580 nm, detectándose un pico a 550 y 562 nm.

RESULTADOS

Al finalizar el periodo de los tratamientos, se compararon los parámetros bioquímicos, tomando como referencia los valores normales de: glucosa (70-110 mg/dL), triacilglicéridos (>150 mg/dL) y fosfatasa alcalina (30-120 UI/L).

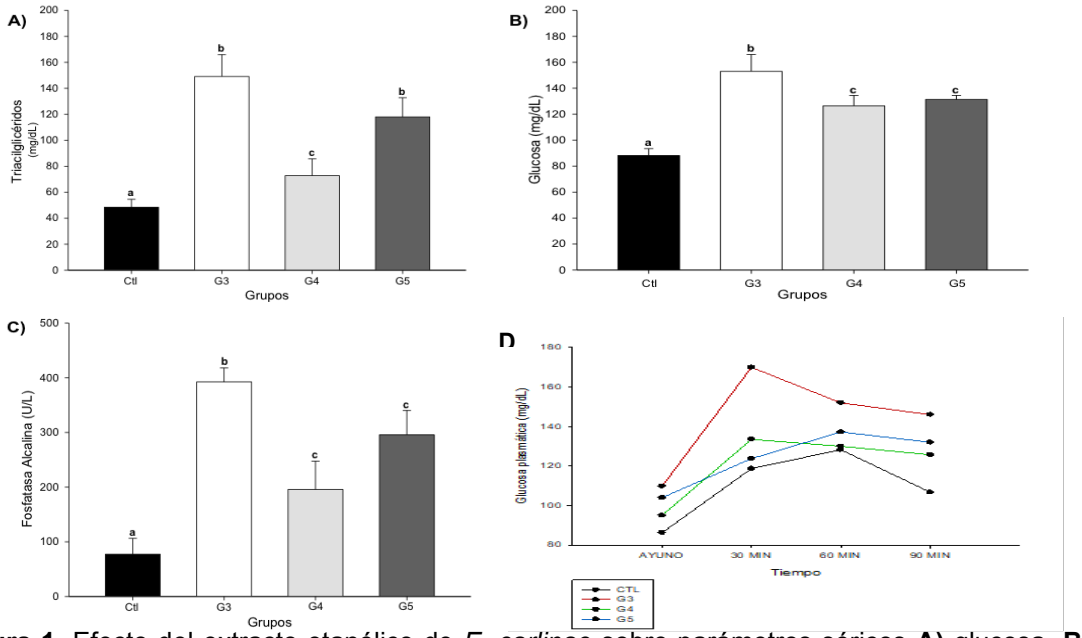


Figura 1. Efecto del extracto etanólico de *E. carlinae* sobre parámetros séricos **A)** glucosa. **B)** triacilglicéridos. **C)** fosfatasa alcalina. **D)** curva de glucosa. **Ctrl: grupo control; G3: grupo enfermo, G4: grupo enfermo + EC; G5: grupo enfermo+DE+EC.** ANOVA a una vía, Tukey, $p<0.05$, $n=4$.

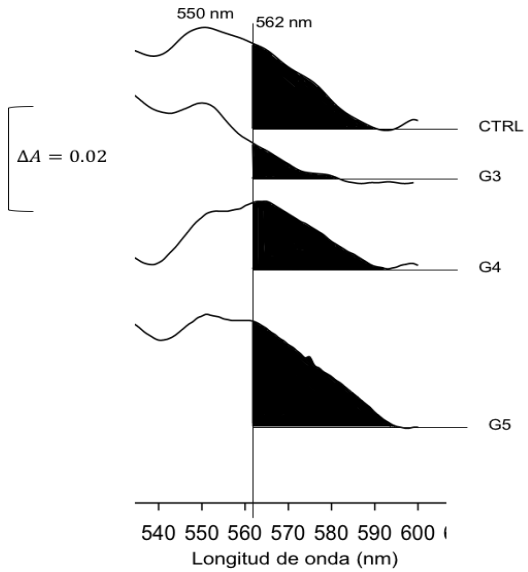


Figura 2. Efectos del extracto etanólico de *E. carlinae* en los espectros de los citocromos de mitocondrias hepáticas. Se utilizó cianuro de potasio como sustrato para la reducción de los citocromos. Los espectros son representativos de cuatro determinaciones independientes realizadas con muestras mitocondriales obtenidas de diferentes animales de cada grupo.

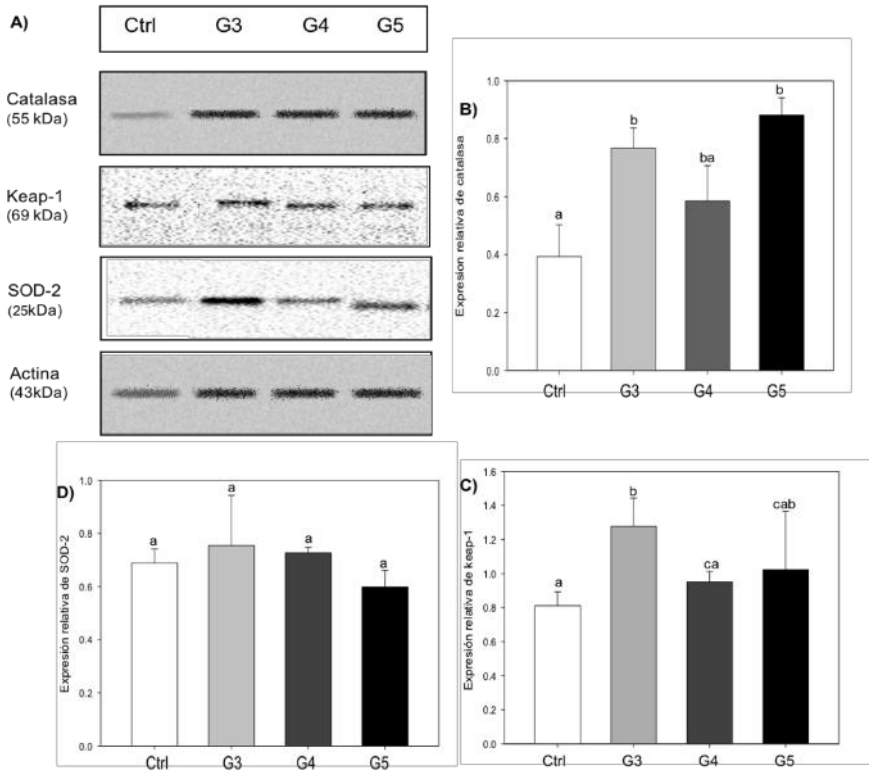


Figura 3. A) Imágenes representativas que muestran los niveles de catalasa, keap1, SOD-2 y actina como control de carga. **B)** expresión relativa de catalasa, **C)** expresión relativa de SOD-2. **D)** expresión relativa de Keap1**.**

CONCLUSIÓN

Estos hallazgos sugieren que el extracto etanólico de *Eryngium carlinae* ejerce efectos moduladores sobre el estrés oxidante, demostrando un potencial efecto protector metabólico y celular. Sin embargo, su eficacia parece ser preventiva, ya que no fue suficiente para revertir por completo las alteraciones hepáticas una vez que la enfermedad estuvo establecida. Por lo tanto, con los resultados obtenidos, se sugiere que el extracto etanólico de *Eringyum carlinae* representa una alternativa natural prometedora con potencial terapéutico en etapas tempranas de la enfermedad hepática no alcohólica.

BIBLIOGRAFÍA

1. Mahadevan, V. (2020). Anatomy of the liver. *Surgery (Oxford)*, *38*(8), 427-431.
2. Saavedra-Molina, A. Devlin, T. M. (1997). Effect of extra- and intra-mitochondrial calcium on citrulline synthesis. Amino Acids, 12, 293-298.
3. Valenzuela, R., Hernández-Rodas, M. C., Barrera, C., Pérez, F., & Ruz, M. (2015). Reducción de la esteatosis hepática, insulino resistencia y pérdida de la defensa antioxidante en ratones alimentados con dieta alta en grasa suplementados con AGPICL n-3 más aceite de oliva extra virgen. *Rev. chil. endocrinol. diabetes*, *8*(4), 154-161.
4. Liu M., Li H., Yang R., Ji D., Xia X. GSK872 and necrostatin-1 protect retinal ganglion cells against necroptosis through inhibition of RIP1/RIP3/MLKL pathway in glutamate-induced retinal excitotoxic model of glaucoma. J Neuroinflammation. 2022 Oct 26;19(1):262. doi: 10.1186/s12974-022-02626-4. PMID: 36289519; PMCID: PMC9608931.

5. Poblete-Aro C., Russell-Guzmán J., Parra P., Soto-Muñoz M., Villegas-González B., Cofré-Bolados C., Herrera-Valenzuela T. Efecto del ejercicio físico sobre marcadores de estrés oxidativo en pacientes con diabetes mellitus tipo 2 [Exercise and oxidative stress in type 2 diabetes mellitus]. Rev Med Chil. 2018 Mar;146(3):362-372. Spanish. doi: 10.4067/s0034-98872018000300362. PMID: 29999107.
6. García-Berumen, C. I., Vargas-Vargas, M. A., Ortiz-Avila, O., Piña–Zentella, R. M., Ramos-Gómez, M., Figueroa–García, M. D. C., ... & Cortés-Rojo, C. (2022). Avocado oil alleviates non-alcoholic fatty liver disease by improving mitochondrial function, oxidative stress and inflammation in rats fed a high fat–High fructose diet. *Frontiers in pharmacology*, *13*, 1089130.
7. Noriega-Cisneros R., Ortiz-Ávila O., et al. Saavedra-Molina A. Hypolipidemic Activity of Eryngium carlinae on Streptozotocin-Induced Diabetic Rats. Biochem Res Int. 2012; 2012:603501. doi: 10.1155/2012/603501. Epub 2011 Nov 24. PMID: 22162811; PMCID: PMC3227232.
8. Saavedra-Molina, A., Lemus-de la Cruz, J., Landa-Moreno, C., Murillo-Villicaña, M., García-Berumen, C., Montoya-Pérez, R., … Cortés-Rojo, C. (2024). Actividad Antioxidante de Productos Naturales provenientes de Plantas Medicinales. IntechOpen. doi: 10.5772/intechopen.1004272
9. Peña-Montes, D. J., Huerta-Cervantes, M., Ríos-Silva, M., Trujillo, X., Huerta, M., Noriega-Cisneros, R., ... & Saavedra-Molina, A. (2019). Protective effect of the hexanic extract of Eryngium carlinae inflorescences in vitro, in yeast, and in streptozotocin-induced diabetic male rats. *Antioxidants*, *8*(3), 73.

DISEÑO PEPTIDOMIMÉTICO BASADO EN HIDANTOÍNAS COMO INHIBIDORES SELECTIVOS DE HDAC1 Y HDAC6: UN ENFOQUE DE DOCKING MOLECULAR Y RECONOCIMIENTO SUPRAMOLECULAR

Stephanie García Zavala,[a] Ramón Guzmán Mejía,[a] Juan Carlos Jiménez Cruz,[b] Fredy Geovannini Morales Palacios,[a] María Viviana Correa Pille,[a] Hugo Alejandro García Gutiérrez,[a] Judit A. Aviña Verduzco.[a*]

[a] Instituto de Investigaciones Químico Biológicas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.[b] Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación-Instituto de Investigaciones Químico Biológicas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo
1106886k@umich.mx; jaavina@umich.mx*

RESUMEN

Las deacetilasas de histonas dependientes de zinc (HDACs) constituyen una familia de enzimas epigenéticas clave en la regulación de la expresión génica y en la progresión tumoral. En particular, las isoformas HDAC1 (clase I) y HDAC6 (clase IIb) representan dianas de alto interés debido a sus diferencias estructurales, celulares y biológicas. HDAC1 es predominantemente nuclear y está directamente implicada en la represión transcripcional y proliferación celular, mientras que HDAC6 es mayoritariamente citosólica, regula la acetilación de proteínas no histónicas y participa en procesos de migración celular, respuesta al estrés y resistencia terapéutica. Estas diferencias hacen evidente la necesidad de estrategias de diseño molecular que permitan discriminar entre isoformas, superando las limitaciones de los inhibidores pan-HDAC clásicos.

En este contexto, el presente capítulo se centra en el diseño racional y evaluación computacional de una hidantoína peptidomimética, explorando tanto su potencial como inhibidor selectivo de HDACs como el comportamiento frente al ion Zn^{2+} de su sitio catalítico. Las hidantoínas (imidazolidin-2,4-dionas) se consideran núcleos privilegiados en química medicinal por su versatilidad estructural, estabilidad y capacidad para establecer múltiples interacciones no covalentes. Sin embargo, su aplicación específica en el campo de la epigenética y la inhibición de HDACs permanece escasamente explorada, lo que las posiciona como un núcleo estructural de investigación de vanguardia.

La molécula estudiada fue diseñada a partir de la ciclación intramolecular de la leucina (Leu), dando lugar a un núcleo hidantoínico donde la cadena lateral aminoacídica queda fijada en la posición 5. Esta disposición confiere rigidez conformacional y permite proyectar un sustituyente hidrofóbico hacia regiones del canal catalítico de las HDACs. Adicionalmente, en la posición 3 del heterociclo se incorporó un residuo de β–alanina (β–Ala), con el objetivo de generar un derivado peptidomimético que combine elementos proteinogénicos y no proteinogénicos. Esta estrategia busca ampliar el espacio químico explorado, mejorar la estabilidad metabólica y modular las propiedades de reconocimiento molecular.

La evaluación del potencial inhibidor de la hidantoína se realizó por modelado molecular, mediante la comparación del docking ciego y dirigido. El docking ciego permitió identificar regiones preferenciales de unión en HDAC1 y HDAC6 sin imponer restricciones previas, proporcionando información sobre las interacciones supramoleculares de la cavidad catalítica. Por su parte, el docking dirigido se enfocó en el sitio catalítico dependiente de Zn^{2+}, permitiendo analizar con mayor detalle el modo de unión, la orientación del núcleo hidantoínico y su capacidad para coordinar directa o indirectamente el ion zinc, evaluando así la capacidad de su comportamiento como grupo de anclaje.

Finalmente, el análisis comparativo de las poses obtenidas y de las interacciones clave permite establecer relaciones estructura-actividad preliminares. Estas diferencias en los patrones de

interacción entre HDAC1 y HDAC6 se discuten a la luz de sus funciones biológicas divergentes, sentando las bases para el desarrollo futuro de inhibidores hidantoínicos selectivos, con perfiles epigenéticos más finos y un potencial terapéutico mejorado.

INTRODUCCIÓN

El cáncer es una enfermedad compleja cuya progresión no depende exclusivamente de alteraciones genéticas, sino también de modificaciones epigenéticas que regulan la accesibilidad y expresión del ADN sin modificar su secuencia. Entre los principales reguladores epigenéticos se encuentran las deacetilasas de histonas (HDACs), enzimas responsables de catalizar la eliminación de grupos acetilo de residuos de lisina presentes tanto en histonas como en proteínas reguladoras, promoviendo una cromatina más compacta y transcripcionalmente menos activa. La alteración de esta actividad epigenética se ha asociado directamente con proliferación celular descontrolada, evasión de la apoptosis, inestabilidad genómica y resistencia terapéutica, fenómenos ampliamente descritos en diversos tipos de cáncer [1-3].

Las HDACs 1-8 pertenecen a isoformas catalíticamente activas dependientes de la presencia de un ion zinc (Zn^{2+}) en su sitio activo, distribuidas en distintas clases con funciones biológicas diferenciadas. Dentro de esta familia, HDAC1 y HDAC6 (Figura 1) representan dianas particularmente relevantes debido a sus diferencias estructurales y funcionales. HDAC1, integrante de la clase I, se localiza principalmente en el núcleo celular y participa directamente en la regulación transcripcional, estando estrechamente relacionada con la proliferación celular y mantenimiento del fenotipo tumoral. En contraste; HDAC6, miembro de la clase IIb, es predominantemente citosólica y regula la acetilación de proteínas no histónicas como α–tubulina y Hsp90 (proteína de choque térmico o *Heat Shock Protein* 90) influyendo en la migración celular, homeostasis proteica y mecanismos de resistencia al estrés celular, lo que contribuye a la resistencia a terapias anticancerígenas [2,4]. Estas diferencias funcionales y de localización subcelular han impulsado el desarrollo de inhibidores selectivos por isoforma, ya que la inhibición indiscriminada de múltiples HDACs puede derivar en efectos secundarios no deseados y limitar la eficacia terapéutica [5].

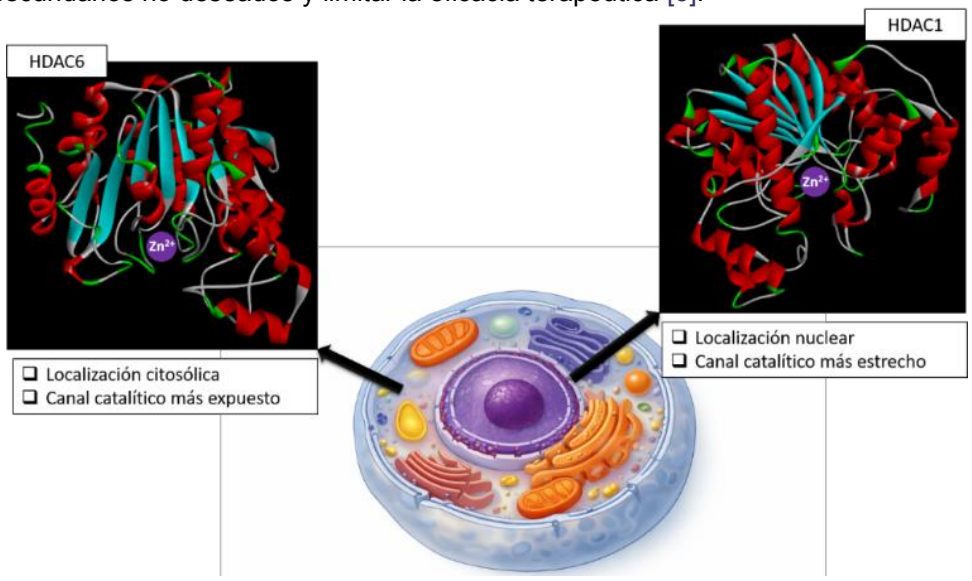


Figura 1. Representación esquemática de la distribución subcelular de HDAC1 y HDAC6, con ampliación estructural del sitio catalítico dependiente de Zn^{2+}.

Desde el punto de vista estructural, el diseño de inhibidores de HDAC se basa en un modelo constituido por tres farmacóforos: un grupo de unión al Zn^{2+} (zinc-binding group, ZBG), un conector (linker) que se extiende a lo largo del canal catalítico y un grupo CAP que establece interacciones con la superficie de la enzima [6]. Dicho modelo ha sido ampliamente utilizado como base racional

para el desarrollo de inhibidores selectivos, donde la coordinación del ZBG al Zn^{2+} bloquea la acción catalítica de la enzima e impide la desacetilación de los sustratos, favoreciendo la acumulación de proteínas acetiladas y la reactivación de genes asociados con la detención del ciclo celular y la apoptosis [6,7].

Los inhibidores clínicamente aprobados emplean mayoritariamente grupos hidroxámicos capaces de coordinar el Zn^{2+} de forma bidentada y con alta afinidad (Figura 2A). En este tipo de interacción, dos átomos donadores de electrones del mismo grupo funcional participan simultáneamente en la coordinación del ion metálico, lo que generalmente incrementa la estabilidad del complejo enzima-inhibidor. En contraste, la coordinación monodentada implica la participación de un único átomo donador en la interacción con el Zn^{2+}, dando lugar a una quelación menos intensa y, en algunos casos, a una mayor contribución de las interacciones complementarias establecidas con los residuos del bolsillo catalítico. No obstante, la fuerte quelación característica de los grupos hidroxámicos suele asociarse con baja selectividad entre isoformas y posible toxicidad sistémica, lo que ha impulsado la búsqueda de ZBG alternativos con afinidad moderada y mayor dependencia del reconocimiento molecular [6-8]. Entre los núcleos químicos que han despertado interés bajo esta premisa se encuentran las hidantoínas (imidazolidin-2,4-dionas – Figura 2B). El anillo hidantoínico presenta carbonilos y nitrógenos amídicos que pueden actuar como donadores de pares electrónicos, permitiendo su interacción con el Zn^{2+} del sitio activo. Aunque tradicionalmente se han reconocido como núcleo privilegiado en química medicinal por su versatilidad estructural y presencia en fármacos aprobados [6,9], estudios en metaloenzimas dependientes de zinc, como metaloproteasas, han demostrado que derivados hidantoínicos tienen una capacidad quelante más moderada que la de los ácidos hidroxámicos, al comportarse como ZBG mediante coordinaciones monodentadas estables, esta característica resulta ventajosa, ya que promueve una inhibición más fina y potencialmente más selectiva para cada isoforma, basada no solo en la coordinación al metal, sino también en interacciones supramoleculares específicas del entorno proteico [10,11].

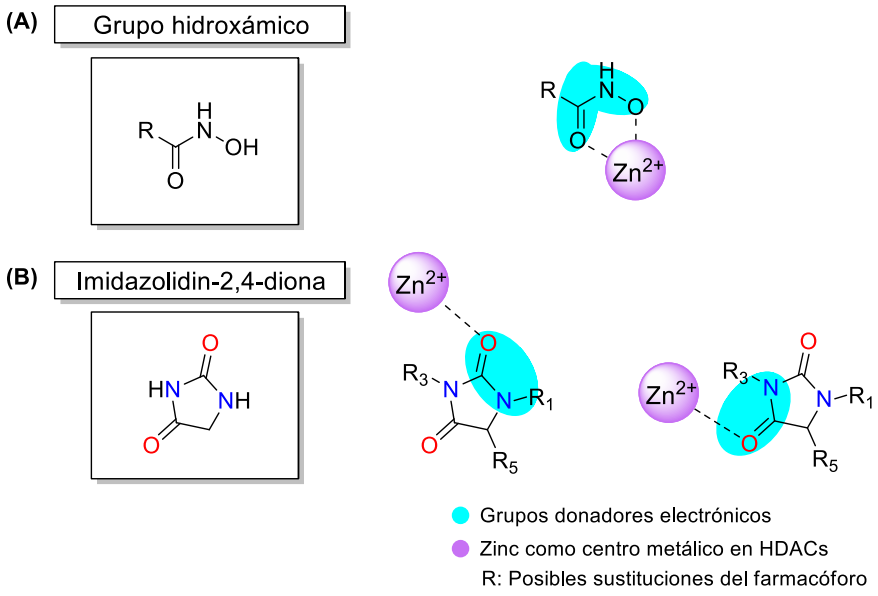
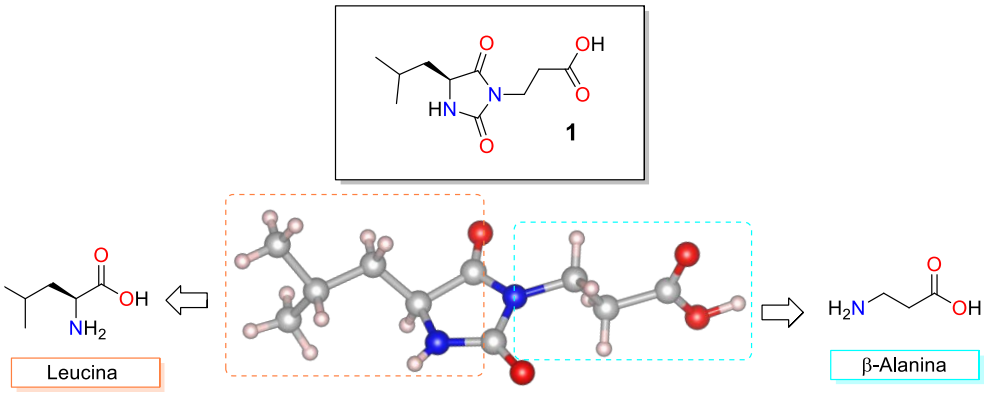


Figura 2. Representación bidimensional de la coordinación bidentada por ácidos hidroxámicos (A) y monodentada por hidantoínas (B) al ion Zn^{2+}.

Bajo esta perspectiva, el presente trabajo aborda el diseño del ácido (*S*)-3-(4-isobutil-2,5-dioxoimidazolidin-1-il)propanoico (**1**), de fórmula molecular $C_{10}H_{16}N_2O_4$, que es una hidantoína obtenida a partir de la ciclación de Leu y funcionalizado con β–Ala. Su estructura química bidimensional, así como su representación cristalográfica tridimensional, se muestran en el Esquema

1. Este enfoque permite combinar elementos proteinogénicos y no proteinogénicos, ampliando el espacio químico explorado y modulando propiedades fisicoquímicas y de reconocimiento molecular.



Esquema 1. Representación tridimensional de la hidantoína **1** como candidato inhibidor de HDACs y sus componentes aminoacídicos primarios.

Para comprender su posible comportamiento como inhibidor de HDAC, se emplearon estudios de docking molecular comparando estrategias de docking ciego y dirigido. Este análisis permite evaluar simultáneamente la capacidad del núcleo hidantoínico como posible ZBG y las diferencias en patrones de interacción entre HDAC1 y HDAC6, proporcionando una visión integrada de química medicinal, modelado molecular y epigenética aplicada al cáncer.

TEORÍA

Relación estructura-actividad (SAR) de hidantoínas 3,5-disustituidas como farmacóforos

Las hidantoínas constituyen un andamiaje heterocíclico ampliamente reconocido en química medicinal por su versatilidad como núcleo farmacofórico y su capacidad para generar múltiples derivados con actividades biológicas diversas. Este núcleo estructural ha sido ampliamente explorado en el desarrollo de compuestos con actividad anticonvulsiva, anticancerígena y antimicrobiana, lo que evidencia su relevancia en el diseño racional de moléculas bioactivas [12]. En la actualidad, las sustituciones específicas del anillo hidantoínico se han consolidado como una estrategia eficaz para el desarrollo de compuestos con baja toxicidad y perfiles de selectividad mejorados, particularmente en el ámbito de enfermedades oncológicas. Este comportamiento se ve reflejado tanto en compuestos sintéticos como en productos naturales bioactivos y fármacos clínicamente relevantes [13].

Desde el punto de vista estructural, este heterociclo presenta posiciones estratégicas de funcionalización, siendo especialmente relevantes N-1 (R_1), N-3 (R_3) y C-5 (R_5) (Figura 3). Estas posiciones influyen de manera directa en la reactividad química, la orientación espacial del ligando y su capacidad de establecer interacciones supramoleculares con blancos biológicos. La modificación de estas posiciones permite la modulación de parámetros fisicoquímicos como lipofilia, polaridad y flexibilidad conformacional, factores determinantes en la afinidad y selectividad biológica [13-15]. Si bien las tres posiciones pueden contribuir a la actividad biológica, los derivados R_1-sustituidos han sido asociados principalmente con actividad antimicrobiana. En contraste, las hidantoínas 3,5-sustituidas (R_3 y R_5) constituyen la familia más estudiada debido a su correlación con la actividad anticancerígena, por lo que serán el foco principal de este capítulo.

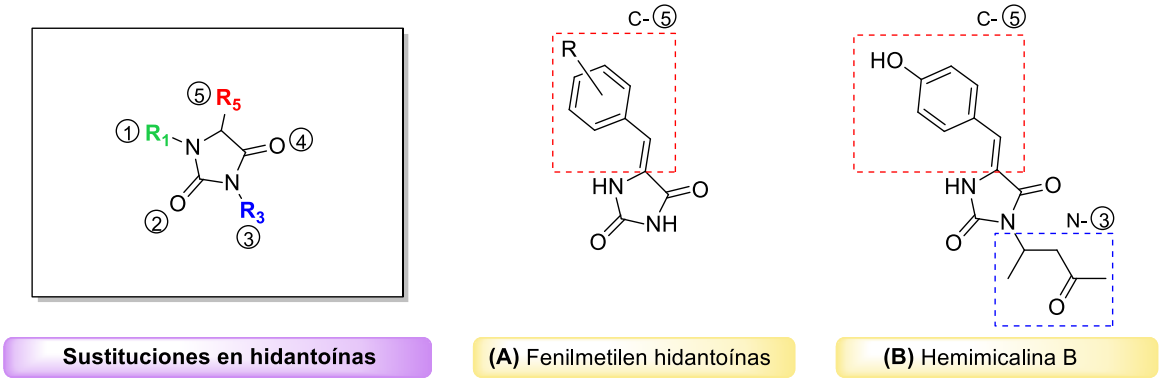


Figura 3. Sustituciones del anillo hidantoínico con actividad biológica presente en compuestos naturales.

Tradicionalmente, numerosos derivados bioactivos han incorporado sustituyentes aromáticos en la posición C-5, los cuales favorecen interacciones hidrofóbicas extensas y contactos con residuos aromáticos presentes en proteínas diana [16]. Ejemplos de ello incluyen las fenilmetil hidantoínas, reportadas como potentes inhibidores de la proliferación y metástasis en cáncer de próstata y mama [17]. Sin embargo, si bien los grupos aromáticos pueden incrementar la afinidad, también suelen incrementar la lipofilia y disminuir la solubilidad acuosa, lo que puede traducirse en perfiles farmacocinéticos menos favorables y limitar su aplicabilidad terapéutica.

En este contexto, la sustitución en la posición C-5 por cadenas alquílicas derivadas de aminoácidos representa una estrategia alternativa basada en principios de química medicinal peptidomimética. Aminoácidos como Leu, con un grupo isobutilo de volumen moderado y carácter hidrofóbico bien definido, son capaces de interactuar con subcavidades apolares del sitio activo sin imponer la rigidez conformacional propia de los sistemas aromáticos. Esta mayor flexibilidad conformacional permite al ligando adaptarse de manera más eficiente a canales catalíticos estrechos o topológicamente variables, como los observados en distintas isoformas de HDAC.

Antecedentes del uso de docking ciego frente a docking dirigido

El docking molecular es una técnica de modelado computacional utilizada para predecir la orientación preferida de un ligando, habitualmente una molécula de bajo peso molecular comprendida en el rango aproximado de 100 a 1000 Da, al unirse a una proteína. Esta metodología permite estimar los modos de unión y la afinidad de interacción mediante funciones de puntuación y algoritmos de búsqueda conformacional [18]. Existen dos enfoques principales:

- **Docking ciego (blind docking):** No presupone información previa sobre el sitio de unión y explora la totalidad de la superficie proteica para identificar posibles regiones potenciales de interacción. Este enfoque resulta particularmente útil para identificar sitios secundarios o alostéricos, así como para evaluar la selectividad diferencial entre isoformas proteicas. Aunque el docking ciego implica un espacio de búsqueda mayor y potencialmente menor precisión inicial, permite obtener una visión global del reconocimiento molecular, especialmente útil en etapas exploratorias de diseño molecular, como las modificaciones estructurales en hidantoínas 3,5-disustituidas.

- **Docking dirigido (focused docking):** Cuando se conoce previamente el sitio activo de la proteína, la búsqueda conformacional del ligando se restringe a esa región específica. Esto permite una exploración más exhaustiva del sitio catalítico, optimizando poses y puntuaciones con base a interacciones esperadas con residuos clave y cofactores metálicos, como el ion Zn^{2+} en enzimas dependientes de zinc.

La comparación de ambos enfoques permite combinar la identificación de posibles sitios de unión con la validación estructural del sitio catalítico, proporcionando una estrategia complementaria para evaluar la selectividad entre isoformas y el posible comportamiento del ligando frente al ion Zn^{2+}.

Aplicación a proteínas HDAC1 y HDAC6

Las estructuras cristalográficas de HDAC1 (PDB ID: 1C3S) [19] y HDAC6 (PDB ID: 5EDU) [7] representan modelos tridimensionales de isoformas clave en la familia HDAC. HDAC1 muestra un dominio catalítico con un canal relativamente estrecho y ambiente polar, mientras que HDAC6 presenta un dominio más amplio con diferencias topológicas significativas. Estas variaciones estructurales influyen directamente en la selectividad de ligandos, permitiendo evaluar cómo las hidantoínas 3,5-sustituidas interactúan con el sitio activo. Los estudios de docking comparativo en estas dos isoformas permiten identificar diferencias en afinidad, orientación y contactos supramoleculares, proporcionando información relevante para el diseño racional de inhibidores selectivos.

Vorinostat como estándar estructural y farmacológico

Vorinostat, ácido *N*-hidroxi-*N'*-feniloctanodiamida o ácido suberoilanilida hidroxámica (SAHA) (**2**), de fórmula molecular $C_{14}H_{20}N_2O_3$ y masa molecular de 264.32 g/mol, fue el primer inhibidor de HDAC (HDACi) aprobado por la FDA para el tratamiento de linfoma cutáneo de células T y constituye un referente fundamental en el diseño de fármacos. Desde el punto de vista estructural, incorpora un grupo hidroxámico, reconocido como un ZBG clásico, capaz de establecer una coordinación bidentada con el Zn^{+2} presente en el sitio catalítico. Esta interacción desplaza la molécula de agua catalítica y bloquea eficientemente la actividad enzimática, lo que explica su elevada potencia inhibitoria, con valores de IC_{50} en el rango nanomolar para HDAC1 (IC_{50} < 86 nM), así como su actividad de amplio espectro frente a HDACs de clase I y II, incluyendo HDAC6. Sin embargo, esta fuerte dependencia de la coordinación metálica también se asocia con una limitada discriminación entre isoformas, característica de los denominados pan-HDACi [1-9, 20]. Por ello, el compuesto **2** (Figura 4) se emplea en este estudio para sustentar el análisis comparativo presentado en la sección de resultados, permitiendo comparar el comportamiento, las interacciones y la posible selectividad de la hidantoína **1** frente a HDAC1 y HDAC6.

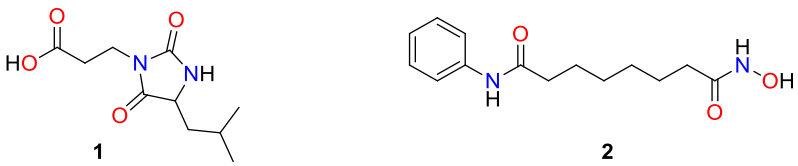


Figura 4. Estructuras químicas bidimensionales de la hidantoína **1** y de Vorinostat (**2**), empleado como referencia estructural y farmacológica.

PARTE EXPERIMENTAL

Predicción de propiedades fisicoquímicas y farmacocinéticas

Las propiedades fisicoquímicas y farmacocinéticas de **1** y **2** se estimaron mediante herramientas computacionales disponibles en la plataforma SwissADME (http://www.swissadme.ch) [21]. A partir de las estructuras moleculares en formato SMILES, se calcularon parámetros relevantes de relación estructura-actividad como peso molecular, superficie polar (TPSA), enlaces rotables, donadores y aceptores de hidrógeno, lipofilicidad (LogP) y solubilidad. Asimismo, se evaluaron propiedades farmacocinéticas predictivas, incluyendo absorción gastrointestinal, permeabilidad bilógica, interacciones metabólicas y criterios del perfil farmacológico tipo fármaco (*drug-likeness*). Estos datos permitieron comparar el perfil estructural y farmacológico de **1** con el inhibidor de referencia **2**.

Estudios de docking molecular

Los estudios de docking molecular se realizaron con AutoDock Vina (v1.1.2) [22] utilizando las estructuras cristalográficas de HDAC1 (PDB ID: 1C3S) y HDAC6 (PDB ID: 5EDU) obtenidas del Protein Data Bank. Las proteínas fueron preparadas eliminando ligandos y moléculas de agua no estructurales, conservando el ion catalítico Zn^{2+}, y adicionando hidrógenos polares con asignación de cargas de Gasteiger mediante AutoDockTools. El ligando **1** fue obtenido cristalográficamente y es la base de la matriz z empleada para el modelo preparado en formato PDBQT en UCSF Chimera. Se realizaron tanto docking ciego—abarcando la totalidad de la proteína—, como dirigido—centrado en el Zn^{2+} del sitio catalítico. Los complejos ligando-proteína fueron clasificados de acuerdo con sus valores de energía libre de unión estimada (ΔG, kcal/mol), orientación en el canal catalítico y proximidad al Zn^{2+}. Mientras que las interacciones supramoleculares fueron analizadas mediante Discovery Studio Visualizer, evaluando contactos hidrofóbicos y puentes de hidrógeno para la comparación estructural entre ambas isoformas. Como control interno, el protocolo fue validado mediante el redocking del ligando cocristalizado **2**, determinando la desviación RMSD entre la pose experimental y la pose predicha; se consideró aceptable un valor de RMSD ≤ 2.0 Å como criterio de confiabilidad del método.

RESULTADOS

Análisis comparativo estructural entre los compuestos 1 y 2

Con el fin de contextualizar los resultados obtenidos desde una perspectiva estructural y mecanística, se realizó un análisis comparativo entre la hidantoína **1** y el inhibidor **2**, permitiendo examinar la relación estructura-actividad (SAR, *Structure Activity Relationship* – Figura 5), los resultados de docking molecular frente a HDAC1 y HDAC6, y la evaluación de las diferencias estructurales que influyen en las propiedades fisicoquímicas, farmacocinéticas y modos de interacción.

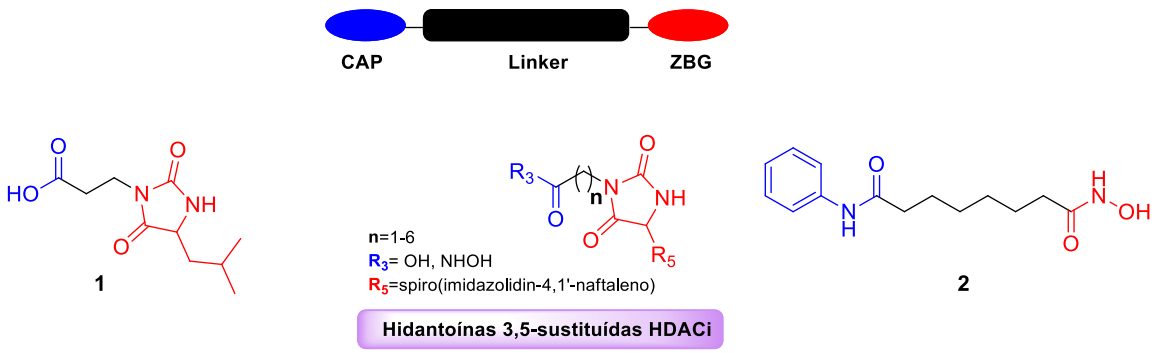


Figura 5. Relación estructura-actividad (SAR) en inhibidores de HDAC.

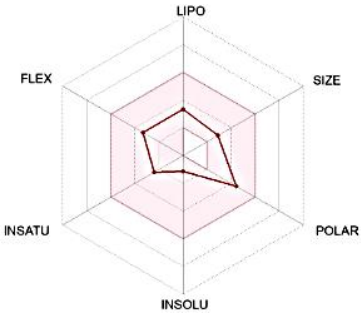
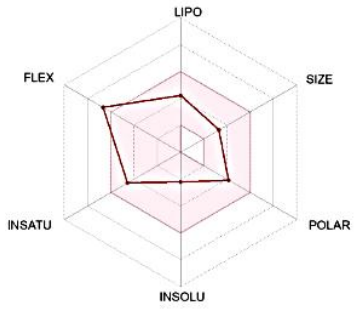
Como se mencionó anteriormente, los HDACi clásicos presentan tres dominios estructurales principales: i) Un ZBG, ii) un linker, y iii) un grupo CAP que interactúa con la superficie del canal catalítico. El compuesto **2** constituye el paradigma de este modelo, donde el grupo hidroxámico actúa como ZBG, la cadena alifática como linker y el anillo aromático CAP. Este arreglo permite la coordinación bidentada con el Zn^{2+} y explica su elevada potencia inhibitoria y carácter pan-HDAC. En contraste, la hidantoína **1** presenta un diseño alternativo basado en interacciones supramoleculares distribuidas. Desde una perspectiva SAR, las hidantoínas 3,5-sustituídas (Figura 5) combinan un núcleo heterocíclico rígido con potencial para actuar como ZBG alternativo, mientras que los sustituyentes β–Ala en N-3 y Leu en C-5 desempeñan funciones análogas a los dominios CAP y linker. El grupo carboxílico terminal de β–Ala puede contribuir al reconocimiento molecular, mientras que la cadena lateral hidrofóbica de Leu favorece interacciones laterales que podrían modular la afinidad y selectividad, particularmente hacia isoformas con mayor tolerancia estérica como HDAC6 [10].

Comparación de propiedades fisicoquímicas y farmacocinéticas

Las propiedades predichas mediante SwissADME muestran perfiles comparables entre ambos compuestos, con diferencias estructurales relevantes (Tabla 1). Ambos compuestos presentan bajo

peso molecular y cumplen las reglas de Lipinski sin violaciones, conservando una alta absorción gastrointestinal, buena disponibilidad biológica y accesibilidad sintética comparable.

Tabla 1. Comparación de propiedades fisicoquímicas y farmacocinéticas predichas por SwissADME para los compuestos **1** y **2**.

Gráfico radar de biodisponibilidad		

Parámetro*	**1**	**2**
Fórmula molecular	$C_{10}H_{16}N_2O_4$	$C_{14}H_{20}N_2O_3$
Peso molecular (g/mol)	228.25	264.32
TPSA (Å^2)	86.71	78.43
Enlaces rotables	5	8
Aceptores H	4	3
Donadores H	2	3
Fracción Csp^3	0.70	0.64
LogP consenso	0.39	1.22
Solubilidad (ESOL)	Muy soluble	Soluble
Absorción GI	Alta	Alta
Permeante BBB	No	No
Sustrato P-gp	No	Sí
Inhibición CYP	No	CYP3A4
Log Kp (cm/s)	−7.44	−6.85
Violaciones Lipinski	0	0
Disponibilidad biológica	0.56	0.55
Accesibilidad sintética	2.54	2.47

***Propiedades calculadas mediante SwissADME. TPSA: superficie polar topológica; GI: gastrointestinal; P-gp:glicoproteína-P; CYP: citocromos P450.**

No obstante, la hidantoína **1** exhibe características que podrían favorecer un perfil más selectivo, incluyendo un menor tamaño molecular, una ligera mayor superficie polar (TPSA), mayor rigidez conformacional y una fracción Csp^3 superior, factores que sugieren una mayor tridimensionalidad y potencial capacidad de reconocimiento molecular. Asimismo, el menor número de enlaces rotables podría reducir el costo entrópico asociado a la unión, mientras que el incremento en aceptores de hidrógeno puede compensar la ausencia de un grupo hidroxámico clásico mediante interacciones polares complementarias. Por otra parte, aunque **2** presenta mayor lipofilicidad, **1** muestra una solubilidad acuosa superior manteniendo una adecuada permeabilidad. Desde la perspectiva farmacocinética, la ausencia de interacción predicha de **1** con P-gp y CYP3A4, en contraste con **2**, sugiere un perfil potencialmente más favorable. En conjunto, estos resultados indican que el compuesto **1** conserva propiedades fisicoquímicas y farmacocinéticas comparables a las de Vorinostat (**2**), pero con características estructurales que podrían favorecer una mayor selectividad hacia isoformas específicas de HDAC.

Docking ciego hidantoína—HDAC1 y análisis SAS

Con el fin de evaluar la afinidad espontánea del ligando, se realizó docking ciego sobre toda la superficie de HDAC1. A pesar de la ausencia de restricciones espaciales, la hidantoína **1** se posicionó preferentemente dentro del canal catalítico, lo que sugiere una afinidad intrínseca por el sitio activo. El análisis de la superficie accesible al disolvente (SAS, Figura 6) reveló una distribución funcional de sus dominios estructurales: la cadena lateral de Leu en C5 mostró un mayor enterramiento en el bolsillo hidrofóbico, mientras que las zonas con valores de SAS intermedios (17.5-15.0), mostradas en blanco, corresponden mayoritariamente al sustituyente β–Ala que permaneció más expuesto al disolvente. Por su parte, el anillo hidantoínico en las regiones verdes (SAS 10.0-15.0), presenta accesibilidad intermedia compatible con su función como andamio rígido. En conjunto, estos resultados sugieren que la Leu actúa como región hidrofóbica tipo CAP, el núcleo hidantoínico funciona como linker, y el fragmento β–Ala–CO_2H como elemento polar involucrado en el reconocimiento periférico, más que un papel catalítico directo.

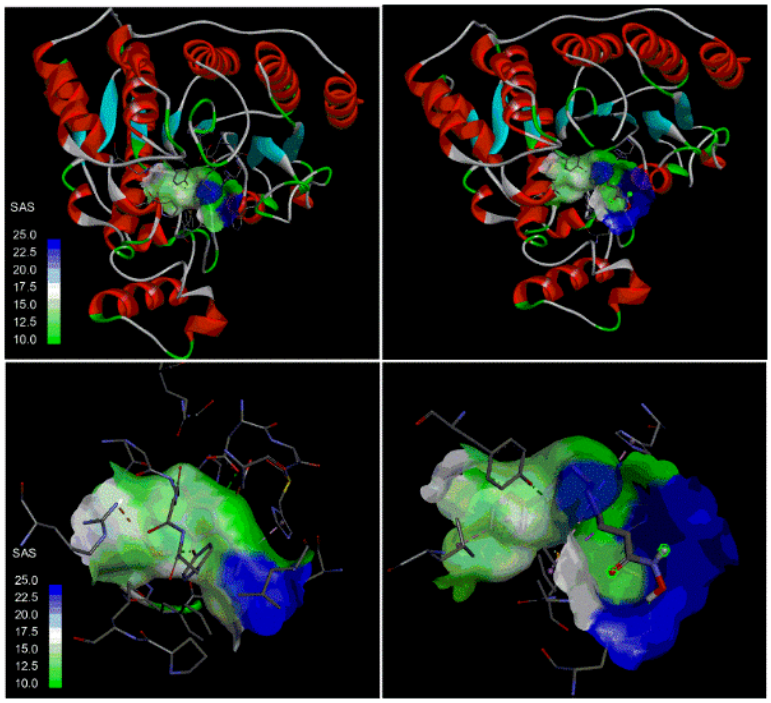


Figura 6. Comparación de la superficie accesible al disolvente de la hidantoína **1** (izquierda) con respecto a **2** (derecha) en sus respectivos complejos con HDAC1. La fila superior muestra la disposición general de los ligandos dentro del complejo, mientras que en la fila inferior presenta una vista ampliada de los ligandos coloreados según sus valores de SAS.

Comparación del docking dirigido de los compuestos 1 y 2 sobre HDAC1

Se realizó docking dirigido en HDAC1 (PDB ID: 1C3S) utilizando AutoDock Vina, con el objetivo de disponer de un complejo de referencia basado en el inhibidor **2** y comparar directamente el modo de unión de la hidantoína **1** dentro del canal catalítico. Este enfoque permitió evaluar diferencias en el reconocimiento molecular y su implicación en la relación estructura-actividad. El complejo **2**-HDAC1 (Figura 7) mostró el patrón clásico de inhibición hidroxámica característico de inhibidores pan-HDAC. El grupo hidroxámico se orienta hacia el centro catalítico y establece interacciones con residuos conservados próximos al ion Zn^{2+}, incluyendo puentes de hidrógeno con His132 y Tyr297, además de la coordinación metal-ligando que constituye el principal elemento estabilizador del complejo.

Paralelamente, la cadena alifática del compuesto **2** se dispone a lo largo del canal hidrofóbico estableciendo interacciones π-alquil con Phe198 y Phe141, mientras que contactos hidrofóbicos adicionales se observan con Leu265 y Pro22, lo que refuerza el anclaje del ligando dentro del canal catalítico. Este patrón es consistente con estructuras cristalográficas previamente reportadas y valida el modelo de docking dirigido utilizado [19].

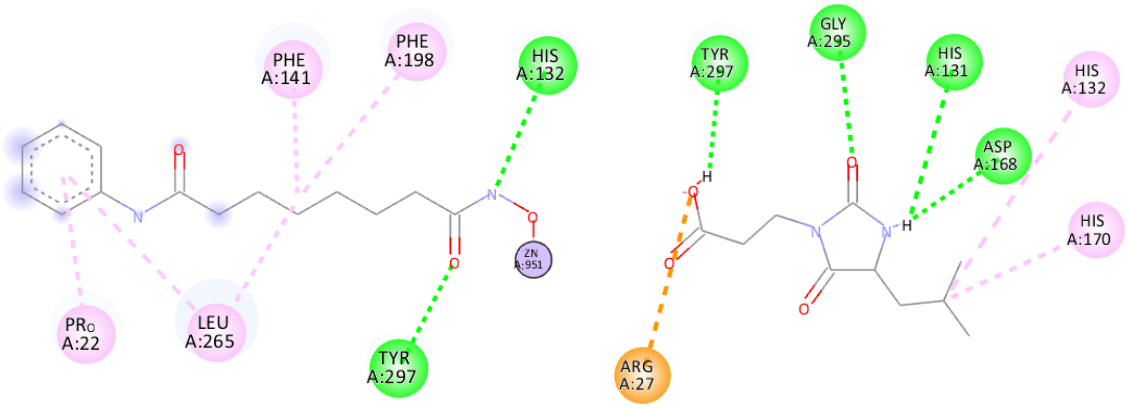


Figura 7. Interacciones supramoleculares del complejo **2**—HDAC1 (izquierda) e hidantoína **1**—HDAC1 (derecha). Código de color: verde, puentes de hidrógeno; rosa, interacciones alquílicas; y anaranjado, carga atractiva; morado, coordinación con Zn^{2+}.

En contraste, la hidantoína **1** carece de un grupo hidroxámico clásico y, en consecuencia, su estabilización no depende de una coordinación metálica dominante, sino de un entramado distribuido de interacciones polares e hidrofóbicas a lo largo del canal catalítico. El análisis de docking revela la formación de puentes de hidrógeno entre el grupo carboxílico de la β–Ala y Tyr297, así como interacciones entre uno de los carbonilos ureicos del núcleo hidantoínico y Gly295. Adicionalmente, el nitrógeno N-1 del anillo hidantoínico establece contactos por puente de hidrógeno con HIS131 y ASP168.

De manera complementaria, la cadena lateral de Leu en C5 se inserta en un subpocket hidrofóbico, donde establece interacciones de tipo π-alquil con His132 e His170, contribuyendo de manera significativa al anclaje del ligando. Este contraste evidencia que, mientras SAHA concentra su afinidad en la región metal-dependiente del sitio activo, la hidantoína distribuye sus interacciones a lo largo de residuos catalíticos y laterales, anticipando un modo de reconocimiento menos dependiente del centro metálico y potencialmente más sensible a las particularidades estructurales de la isoforma.

Discusión estructural: HDAC1 como isoforma de referencia

HDAC1 constituye una isoforma altamente conservada, frecuentemente utilizada como modelo para evaluar inhibidores pan-HDAC. El canal catalítico estrecho y la fuerte dependencia de la coordinación con Zn^{+2} favorecen ligandos lineales y flexibles como el inhibidor **2** [19]. En este contexto, la hidantoína **1** presenta restricciones estéricas moderadas debido a su mayor tridimensionalidad, lo que sugiere una afinidad potencialmente menor hacia HDAC1 pero mayor selectividad. Bajo este marco, el compuesto **1** muestra un conjunto de propiedades estructurales y funcionales claramente distintas, resumidas en la Tabla 2, donde el comportamiento favorece un reconocimiento supramolecular distribuido y dependiente del microentorno proteico.

Tabla 2. Comparación estructural y funcional entre **1** y **2** en la inhibición de HDAC1.

Elemento estructural / parámetro	***1***	***2***	*Implicación SAR en HDAC1*
Núcleo central	Imidazolidin-2,4-diona	Cadena alifática con grupo hidroxámico terminal	Andamio rígido vs ligando flexible
ZBG	No clásico (Grupo carboxílico de β-Ala)	Clásico Hidroxámico (bidentado)	Puente de hidrógeno con TYR297 vs coordinación con Zn^{2+}
CAP	Sustitución C-5: Leu	Anillo aromático	Elemento CAP hidrofóbico enterrado
Naturaleza del linker	Aminoacídico integrado al núcleo	Alifático flexible	Restricción conformacional vs flexibilidad
Distribución espacial (SAS)	Hidrofóbico enterrado + polar expuesto	Hidrofílico enterrado (ZBG) + aromático expuesto	Reconocimiento distribuido vs centralizado
Volumen global del ligando	Moderado–alto	Bajo–moderado	Penalización estérica posible/ ventana SAR estrecha
Dependencia del Zn^{2+}	Moderada	Alta	Menor promiscuidad esperada para hidantoínas
Tipo de interacciones dominantes	Puentes de hidrógeno + alquílicas	Coordinación metálica + puentes de hidrógeno + alquílicas	Estrategias de estabilización distintas
Modo de inhibición esperado	Alternativo, no hidroxámico	Clásico, hidroxámico	Potencia vs selectividad

Docking y discusión estructural en HDAC6

Con la finalidad de evaluar la hipótesis de selectividad observada en HDAC1, se extendió el análisis hacia HDAC6, una isoforma perteneciente a la clase IIb que presenta diferencias estructurales y funcionales relevantes. A diferencia de HDAC1, cuyo canal catalítico es más estrecho y altamente conservado, HDAC6 se caracteriza por una cavidad catalítica más amplia y mayor tolerancia estérica. Esta distinción resulta particularmente relevante, ya que diversos estudios han reportado compuestos con baja o nula inhibición frente a HDAC1 que, sin embargo, muestran preferencia por isoformas de clase IIb como HDAC6, evidenciando que una menor afinidad por HDAC1 no necesariamente implica baja actividad global sobre HDACs, sino que puede reflejar un perfil selectivo dependiente de la arquitectura del sitio activo [23]. Además de estas diferencias estructurales, HDAC6 posee un interés biológico creciente debido a su papel en la desacetilación de microtúbulos y en la regulación de proteínas clave implicadas en procesos oncológicos e inmunológicos, incluyendo la modulación de PD-L1, lo que ha impulsado el desarrollo de inhibidores selectivos con potencial aplicación en inmunoterapia contra el cáncer [24, 25]. Desde el punto de vista estructural, estudios cristalográficos de alta resolución han identificado residuos catalíticos conservados en HDAC6, tales como His610, His611, Tyr745, Phe620, Phe680 y Leu749, los cuales participan en el reconocimiento de inhibidores hidroxámicos como el compuesto **2**. Estructuras cristalográficas reportadas para **2** y otros derivados hidroxámicos en HDAC6 muestran coordinación bidentada con el Zn^{+2}, acompañada de puentes de hidrógeno con His610 y Tyr745, mientras que el canal hidrofóbico está formado por residuos aromáticos como Phe620 y Phe680. Estos residuos generan un subpocket más amplio que en HDAC1, favoreciendo ligandos tridimensionales [7].

En el caso particular del docking molecular dirigido en Vina, el compuesto **1** fue evaluado utilizando la estructura cristalográfica HDAC6 (PDB ID: 5EDU) mediante un grid box de 40x40x40 Å, centrado en x= 17.047, y= −40.436, z= 99.555, abarcando el sitio catalítico dependiente de Zn^{2+}. Los resultados mostraron cinco poses con energías de unión entre −6.2 y −6.1 kcal/mol y valores de RMSD entre 1.68 y 2.30 Å, lo que indica la presencia de un clúster conformacional compacto y un modo de unión estable dentro del canal catalítico. Un aspecto particularmente relevante es que la

interacción con el ion Zn^{2+} ocurre predominantemente a través del ácido carboxílico terminal del sustituyente β-Ala (Figura 8), el cual actúa como ZBG alternativo, comportamiento que también había sido descrito en otras variedades de compuestos hidantoínicos con ácidos carboxílicos terminales [26], además dicha interacción supramolecular también se presenta como puente de hidrógeno dominante en estructuras cristalográficas de hidantoínas con ácidos carboxílicos terminales interrumpiendo la α-red generada por los puentes de hidrógeno bidentados del grupo ureico.

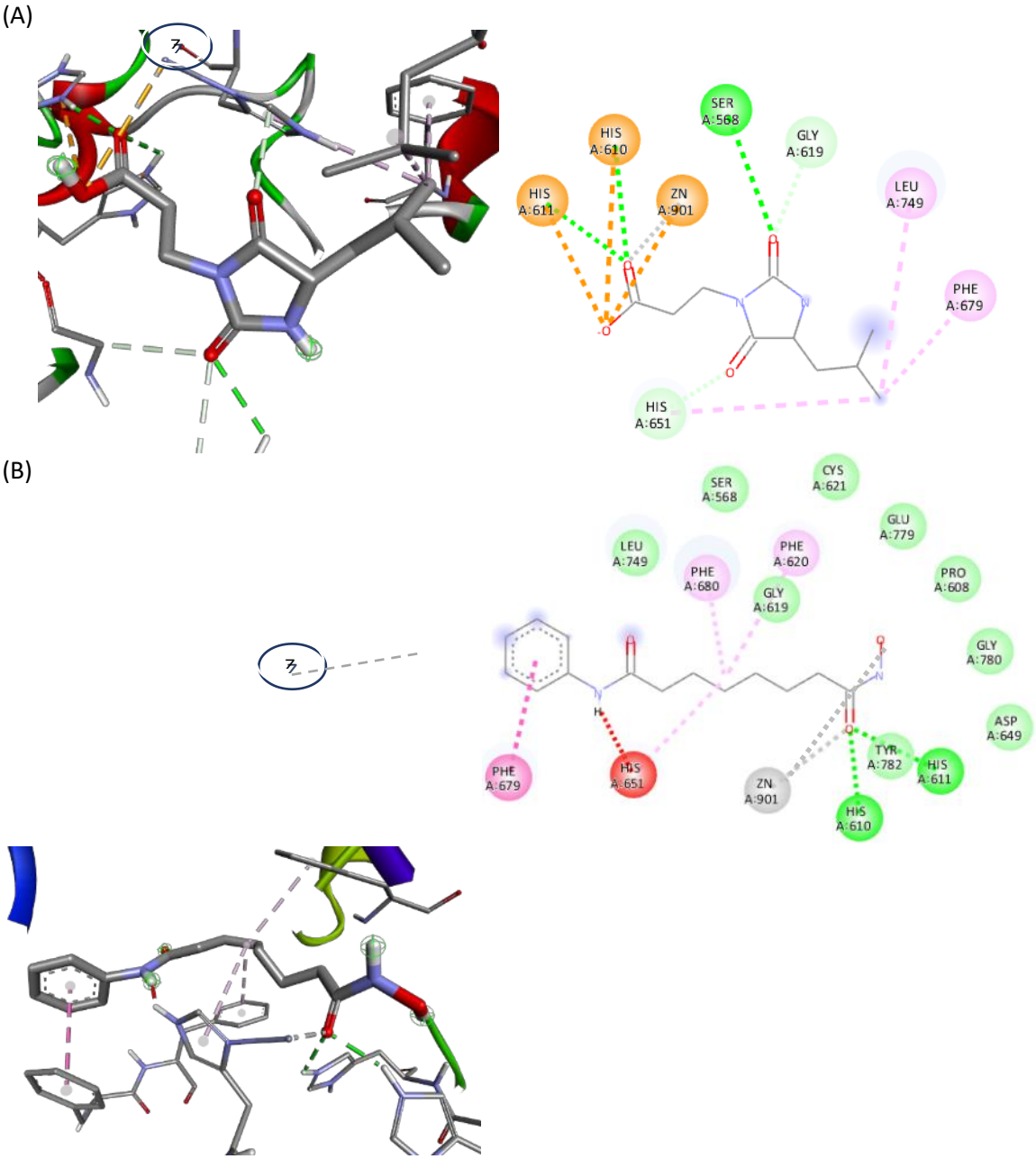


Figura 8. Interacciones supramoleculares de los complejos proteína-ligando con HDAC6. (A) Complejo **1** con HDAC6; (B) complejo de **2** con HDAC6. En cada panel, a la izquierda se muestra la pose de acoplamiento molecular en 3D, mientras que a la derecha se presentan las principales interacciones proteína-ligando en 2D. Código de color: verde, puentes de hidrógeno; rosa, interacciones alquílicas; anaranjado, interacciones electrostáticas atractivas; gris, coordinación con Zn^{2+} catalítico, monodentada para **1** y bidentada para **2**.

La coordinación mediante el ácido carboxílico difiere con otros reportes de hidantoínas donde es el propio anillo heterocíclico el que participa principalmente en interacciones de estabilización, constituyendo el principal grupo quelante [27]. En la hidantoína **1**, el grupo carboxilato presenta mayor densidad electrónica y una geometría más favorable para la coordinación metálica, permitiendo una interacción monodentada estable con el Zn^{2+} catalítico.

Adicionalmente, el complejo ligando-proteína se estabiliza mediante puentes de hidrógeno convencionales con His610, His611 y Ser568, así como no convencionales con His651 y Gly619, además de interacciones hidrofóbicas alquílicas con Leu749 y Phe679, residuos previamente descritos como relevantes en la unión de inhibidores selectivos de HDAC6. Estas interacciones sugieren que el compuesto adopta un farmacóforo tipo CAP-Linker-ZBG, donde el ácido carboxílico de β–Ala actúa como ZBG, su cadena de carbonos funciona como linker, y el núcleo hidantoínico participa como región CAP estructural. Este comportamiento estructural sugiere que el heterociclo **1** constituye un andamiaje alternativo no hidroxamato, capaz de reproducir parcialmente el modo de unión de **2** dentro del sitio catalítico de HDAC6, manteniendo estabilidad conformacional y conservación de residuos clave, lo que respalda su potencial como inhibidor selectivo de HDAC6.

Tabla 3. Parámetros comparativos de docking molecular dirigido de **1** y **2** en HDAC6 (PDB ID: 5EDU).

Parámetro	***1***	***2***
Energía de unión (kcal/mol)	−6.2 a −6.1	−7.5 a −7.7
RMSD (Å)	1.68 a 2.30 Å	< 2.0 Å
Interacción Zn^{+2}	Coordinación monodentada mediante ácido carboxílico	Quelación bidentada mediante ácido hidroxámico
Puentes de hidrógeno	His610, His611, Ser568	His610, His611, Tyr745, Ser568
Residuos clave HDAC6	His610, His611, Ser568, Gly619, His651	His610, His611, Gly619, Phe679, Leu749
Interacciones hidrofóbicas	Leu749, Phe679	Phe679, Leu749
Sitio activo	Canal catalítico dependiente de Zn^{2+}	Canal catalítico dependiente de Zn^{2+}

CONCLUSIONES

En conjunto, los estudios de docking molecular, análisis supramolecular y evaluación farmacocinética *in silico* indican que el heterociclo **1** exhibe un modo de unión distintivo que podría constituir la base de su selectividad hacia HDAC6. A diferencia de los inhibidores hidroxámicos convencionales, **1** distribuye la contribución energética de la interacción entre una coordinación monodentada con el Zn^{2+} catalítico y una red de contactos polares e hidrofóbicos con aminoácidos clave del sitio activo, evitando una dependencia predominante de la interacción metal-ligando. De manera particularmente relevante, **1** conservó la coordinación con el Zn^{2+} únicamente en HDAC6, mientras que no se observó en HDAC1, lo que sugiere que la selectividad observada está condicionada por características estructurales propias de la isoforma, de manera que el entorno proteico de HDAC6 modula el reconocimiento del centro metálico, más que por la simple presencia del Zn^{2+} catalítico. Adicionalmente, la combinación de la rigidez conformacional del núcleo hidantoínico, la tridimensionalidad aportada por la Leu y la contribución del ácido carboxílico en el fragmento β–Ala permitió integrar el modelo tripartito de farmacóforos para HDACi con propiedades farmacocinéticas favorables y potencial biodisponibilidad oral, mientras que el redocking de **2** permitió la validación de las características observadas. En consecuencia, estos resultados posicionan las hidantoínas 3,5-sustituidas funcionalizadas con β–Ala en N3 como un andamio alternativo peptidomimético innovador para la modulación selectiva de HDAC6 y proporcionan una base racional para el desarrollo de inhibidores epigenéticos de nueva generación con potencial aplicación en terapias anticancerígenas.

BIBLIOGRAFÍA

1. A. Suraweera, K. J. O'Byrne, D. J. Richard, "Epigenetic drugs in cancer therapy". *Cancer Metastasis Rev*., Vol. 44, 1, 2025, p. 37. https://doi.org/10.1007/s10555-025-10253-7
2. J. E. Bolden, M. J. Peart, R. W. Johnstone. "Anticancer activities of histone deacetylase inhibitors". *Nat. Rev. Drug Discov.*, Vol. 5, 9, 2006, pp. 769-784. https://doi.org/10.1038/nrd2133
3. Y. Li, E. Seto. "HDACs and HDAC inhibitors in cancer development and therapy." *Cold Spring Harb. Perspect. Med.*, Vol. 6, 10, 2016, p. a026831. https://doi.org/10.1101/cshperspect.a026831
4. E. Verdin, F. Dequiedt, H. G. Kasler. "Class II histone deacetylases: versatile regulators." *Trends Genet.*, Vol. 19, 5, 2003, pp. 286-293. https://doi.org/10.1016/S0168-9525(03)00073-8
5. K. H. Ali, C. Sharma, Y. J. Oh, J. H. Yu, S. H. Kim, H. Lee, Y. H. Seo. "Design and evaluation of highly selective HDAC6 inhibitors derived from the natural product tryptoline". *Mol. Pharmacol*., 2025, p. 100062. https://doi.org/10.1016/j.molpha.2025.100062
6. H. Mohammed, "Next-Generation HDAC Inhibitors: Advancing Zinc-Binding Group Design for Enhanced Cancer Therapy." *Cells*, Vol. 14, 24, 2025, pp. 1997. https://doi.org/10.3390/cells14241997
7. Y. Hai, D. W. Christianson. "Histone deacetylase 6 structure and molecular basis of catalysis and inhibition." *Nat. Chem. Biol.*, Vol. 12, 9, 2016, pp. 741-747. https://doi.org/10.1038/nchembio.2134
8. West, Alison C., and Ricky W. Johnstone. "New and emerging HDAC inhibitors for cancer treatment." *J. Clin. Invest.*, Vol. 124, 1, 2014, pp. 30-39. https://doi.org/10.1172/JCI69738
9. E. Vitaku, D. T. Smith, J. T. Njardarson. "Analysis of the structural diversity, substitution patterns, and frequency of nitrogen heterocycles among US FDA approved pharmaceuticals: miniperspective." *J. Med. Chem.*, Vol. 57, 24, 2014, pp. 10257-10274. https://doi.org/10.1021/jm501100b
10. A.M.A.A. Aboeldahab, E.A.M.M. Beshr, M.E. Shoman, S.M. Rabea, O.M. Aly. "Spirohydantoins and 1,2,4-triazole-3-carboxamide derivatives as inhibitors of histone deacetylase: Design, synthesis, and biological evaluation". *Eur. J. Med. Chem.* 2018, Vol. 146, p. 79-92. https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2018.01.021
11. H. G. Abdulwahab, R. E. S. Mansour, T. A. Farghaly, H. M. El-Sehrawi. "Discovery of novel benzimidazole derivatives as potent HDACs inhibitors against leukemia with (Thio) Hydantoin as zinc-binding moiety: Design, synthesis, enzyme inhibition, and cellular mechanistic study". *Bioorg. Chem.*, 2024, Vol. 146, p. 107284. https://doi.org/10.1016/j.bioorg.2024.107284
12. A. K. Gupta, G. S. Thakur, S. K. Jain. "Recent development in hydantoins, thiohydantoins, and selenohydantoins as anticancer agents: structure-activity relationship and design strategies". *Mini-Rev. Med. Chem.*, 2025, Vol. 25, 9, pp. 693-726. https://doi.org/10.2174/0113895575329643241206101210
13. M. A. Hassanin, M. Mustafa, H. A. Hassan, E. A. Beshr, A. Elshennawy, O. M. Aly. "Hydantoin derivatives: A review on their anticancer activities". *Octahedron Drug Res.*, Vol. 4, 1, 2024, pp. 61-74. https://doi.org/10.21608/odr.2023.232555.1029
14. M. Naufal, E. Hermawati, Y. M. Syah, A. T. Hidayat, I. W. Hidayat, J. Al-Anshori. "Structure–Activity Relationship Study and Design Strategies of Hydantoin, Thiazolidinedione, and Rhodanine-Based Kinase Inhibitors: A Two-Decade Review". *ACS omega*, 2024, Vol. 9, 4, pp. 4186-4209. https://doi.org/10.1021/acsomega.3c04749
15. A. Obradović, M. Matić, M. Paunović, B. Ognjanović, B. Božić, B. B. Nedeljković. "Hydantoin derivatives: Harnessing antitumor and immunomodulation potential" *Biologia Serbica*, 2024, Vol. 46, 2, pp. 21-27. https://doi.org/10.5281/zenodo.14535535
16. M. A. Khanfar, B. A. Asal, M. Mudit, A. Kaddoumi, K. A. El Sayed. "The marine natural-derived inhibitors of glycogen synthase kinase-3β phenylmethylene hydantoins: In vitro and in vivo activities and pharmacophore modeling." *Bioorg. Med. Chem.*, Vol. 17, 16, 2009, pp. 6032-6039. https://doi.org/10.1016/j.bmc.2009.06.054
17. G. V. Shah, A. Muralidharan, S. Thomas, M. Gokulgandhi, M. Mudit, M. Khanfar, K. El Sayed, "Identification of a small molecule class to enhance cell-cell adhesion and attenuate prostate tumor growth and metastasis." *Mol. cancer ther*., Vol. 8, 3, 2009, pp. 509-520. https://doi.org/10.1158/1535-7163.MCT-08-0693

18. D. B. Kitchen, H. Decornez, J. R. Furr, J. Bajorath, Docking and scoring in virtual screening for drug discovery: methods and applications. *Nat. Rev. Drug Discov.*, 2004, Vol. 3, 11, pp. 935-949. https://doi.org/10.1038/nrd1549
19. M. Finnin, J. Donigian, A. Cohen, V. M. Richon, R. A. Rifkind, P. A. Marks, R. Breslow, N. P. Pavletich. "Structures of a histone deacetylase homologue bound to the TSA and SAHA inhibitors". *Nature* 401, 188–193 (1999). https://doi.org/10.1038/43710
20. P. A. Marks, R. Breslow, "Dimethyl sulfoxide to vorinostat: development of this histone deacetylase inhibitor as an anticancer drug." *Nat. Biotechnol.*, Vol. 25, 1, 2007, pp. 84-90. https://doi.org/10.1038/nbt1272
21. A. Daina, O. Michielin, V. Zoete, "SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules". *Sci. Rep.*, 2017, Vol. 7, 1, p. 42717. https://doi.org/10.1038/srep42717
22. O. Trott, A. J. Olson. "AutoDock Vina: improving the speed and accuracy of docking with a new scoring function, efficient optimization, and multithreading". *J. Comput. Chem.*, 2010, Vol. 31, 2, p. 455-461. https://doi.org/10.1002/jcc.21334
23. A. H. Tarawneh, S. A. Al-Trawneh, T. Z. Yesiloglu, M. Zessin, D. Robaa, C. Barinka, S. A. Ross. "Novel selective indole based histone deacetylase 10 inhibitors as anticancer therapeutics". *Sci. Rep*., 2025, Vol. 15,1, p. 33307. https://doi.org/10.1038/s41598-025-02774-6
24. D. T. Vogl, N. Raje, S. Jagannath, P. Richardson, P. Hari, R. Orlowski, S. Lonial, S. Ricolinostat. "The first selective histone deacetylase 6 inhibitor, in combination with bortezomib and dexamethasone for relapsed or refractory multiple myeloma". *Clin. Cancer Res.* 2017, Vol. 23, 3307. https://doi.org/10.1158/1078-0432.CCR-16-2526
25. T. Li, C. Zhang, S. Hassan, X. Liu, F. Song, K. Chen, J. Yang. "Histone deacetylase 6 in cancer". *J Hematol Oncol*., 2018, Vol. 11, 1, p. 111. https://doi.org/10.1186/s13045-018-0654-9
26. T. Suzuki, N. Miyata. "Non-hydroxamate histone deacetylase inhibitors". *Front. Med. Chem.*, 2009, Vol. 4, p. 619-641. https://doi.org/10.2174/97816080520731090401
27. L. Goracci, N. Deschamps, G.M. Randazzo, C. Petit, C. Dos Santos Passos, P. Carrupt, A. Nurisso. "A rational approach for the identification of non-hydroxamate HDAC6-selective inhibitors". *Sci. rep*., 2016, Vol. 6, 1, p. 29086. https://doi.org/10.1038/srep29086

PREPARACIÓN DEL ANTIMONIATO DE MAGNESIO PARA SU ESTUDIO COMO SENSOR DE GASES

Andrea Carolina Gallegos Reyes[1], Héctor Guillén-Bonilla[1], José Trinidad Guillén-Bonilla[1], César Rosales-Martínez[1], Alex Guillén-Bonilla[1], Jorge Ramírez-Ortega[1] y Emilio Huízar-Padilla[2]

[1]Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingeniería, [2] Otra
andrea.gallegos4732@alumnos.udg.mx

RESUMEN

Los óxidos semiconductores con estructura tipo trirutilo ($MgSb_2O_6$, $ZnSb_2O_6$, $CoSb_2O_6$, $MnSb_2O_6$), son materiales de interés para aplicaciones como fotocatálisis sensores de gases oxidantes y reductores, debido a sus propiedades eléctricas (sensibilidad, estabilidad térmica, reproducibilidad). Por lo anterior, se empleó una síntesis coloidal asistida con microondas en presencia de etilendiamina para la obtención de polvos del óxido semiconductor $MgSb_2O_6$. Posteriormente, la fase cristalina fue corroborada mediante difracción de rayos-X. Luego, la morfología y los tamaños de partícula fueron estudiados a través de microscopías electrónicas de barrido y transmisión. También, se estimó el band-gap utilizando la técnica de UV-Visible por reflectancia difusa. Finalmente, se estudió la respuesta dinámica en atmósferas de aire-propano, donde el material exhibió una buena sensibilidad, reproducibilidad, tiempos de respuesta y de recuperación. Como conclusión el óxido semiconductor $MgSb_2O_6$ podría ser un buen candidato como sensor de propano.

INTRODUCCIÓN

Actualmente, en las zonas densamente pobladas la contaminación por diferentes tipos de gases ha incrementado significativamente debido a los altos consumos energéticos [1]. En particular, el gas propano empleado para el gas licuado de petróleo (GLP), si bien, contamina menos que otros combustibles fósiles, contribuye significativamente a la contaminación ambiental debido a su constante uso en los sectores doméstico, comercial, industrial, transporte, agrícola, por mencionar algunos [2]. Dentro de estos sectores, el propano contamina por medio de combustión incompleta, fugas, mala ventilación, mal mantenimiento de equipos, uso diario y explosiones, produciendo otros gases tóxicos como monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO_2) y óxidos nitrosos (NO_x) como consecuencia [3]. Lo anterior ha contribuido al deterioro de ecosistemas, medio ambiente, así como la salud de miles de personas [4]. Cabe mencionar que, el propano es un gas inoloro, incoloro, altamente inflamable y que, aunque no es tóxico puede producir efectos nocivos en caso de una exposición prolongada [5]. Por ejemplo, algunos de estos efectos pueden ser mareos (100–1000 ppm), náuseas (10,000–50,000 ppm), pérdida de consciencia (≥ 50,000 ppm) y en muy altas concentraciones, hipoxia e incluso la muerte dependiendo del tiempo de exposición [5].

Una alternativa que existe desde hace varios años, es el desarrollo y diseño de dispositivos a base de óxidos semiconductores con la capacidad de detectar una gran variedad de gases oxidantes/reductores para tratar de controlar su emisión hacia la atmósfera y reducir los riesgos de explosión y daños a la salud [6]. Anteriormente, múltiples autores han estudiado ampliamente óxidos semiconductores binarios como el dióxido de titanio (TiO_2), óxido de zinc (ZnO) e incluso el óxido de estaño (SnO_2), para su uso como sensores de gases atmosféricos [7]. No obstante, estos óxidos binarios tienen la desventaja de trabajar a altas temperaturas de operación, su selectividad es limitada ya que, responden a diferentes gases al mismo tiempo, suelen presentar saturación de señal cuando son sometidos a altas concentraciones de gases, es complejo controlar los defectos estructurales y, por último, requieren de dopajes para lograr un mejor ajuste electrónico [8].

Sin embargo, desde hace algunos años se ha reportado que los óxidos semiconductores ternarios con estructura tipo trirutilo, presentan una estructura cristalina más compleja, con alta anisotropía electrónica, que se ve reflejada en una mejor interacción gas-superficie, mayor control de defectos

estructurales, mejor respuesta eléctrica en un amplio intervalo de concentraciones y una estabilidad superior frente a la humedad [9]. Particularmente, los materiales con estructura tipo trirutilo pertenecientes a la familia de los antimoniatos ($MgSb_2O_6$, $ZnSb_2O_6$, $CoSb_2O_6$, $CuSb_2O_6$) exhiben una mejor sensibilidad, selectividad, estabilidad térmica y actividad catalítica mejor que los óxidos semiconductores binarios tradicionales (TiO_2, ZnO, SnO_2) [10]. Lo anterior, está estrechamente relacionado con el tamaño de partícula, la morfología y la porosidad que los materiales tipo trirutilo presentan. Cuando los tamaños de partícula son inferiores a los 100 nm, el área superficial, los sitios activos y la velocidad de reacción gas-superficie incrementan considerablemente [11]. Además, otros factores que impactan en la capacidad del sensor son la temperatura de operación, el espesor de la superficie y el tipo de geometría empleada (pastilla, película gruesa o delgada) [12]. Según los reportes, dependiendo de la temperatura de operación (150–250°C), las especies de oxígeno tienen una mayor reactividad ($\mathbf{O^-}$ y $\mathbf{O^{2-}}$) [13]. Por otra parte, si el espesor decrece, entonces la respuesta eléctrica aumenta y los tiempos de respuesta y de recuperación del sensor serán más cortos [14]. Por último, la geometría tiene un gran impacto en la relación superficie/volumen, lo cual, puede favorecer la conductividad eléctrica y la cantidad de sitios activos debido al incremento en el área superficial del sensor [15].

Asimismo, otra de las ventajas que ofrece trabajar con antimoniatos para el sensado de gases es su obtención, ya que es posible sintetizarlos mediante técnicas de química húmeda sencillas y de bajo costo que incluyen el método de sol-gel, hidrotermal, solución polimerización y solución asistida por microondas [16,17]. Recientemente, se ha reportado que la síntesis de solución asistida por microondas permite mantener un buen control en la estequiometría, así como, la nucleación, crecimiento y propagación de nanoestructuras con morfologías específicas como nanopartículas, nanopoliedros, nanovarillas, nanocubos, entre otras [18,19]. Igualmente, la aparición de estas nanoestructuras les confiere las propiedades eléctricas (sensibilidad, selectividad, estabilidad térmica, reproducibilidad) ideales para su uso como detectores de gases [20,21].

TEORÍA

La estructura tipo trirutilo, aparece debido a un cambio en el eje “z” de la estructura tipo rutilo [22]. Cabe mencionar que, la estructura rutilo está formada por enlaces iónicos metal–oxígeno, que se adaptan a la siguiente fórmula: $\mathbf{AO_2}$ siendo $\mathbf{A}$ sustituido por un ion metálico (Ti, Sn, Ir, Cr, etc.) [23]. Por otra parte, la estructura tipo trirutilo se ajusta a la fórmula empírica $\mathbf{AB_2O_6}$, donde $\mathbf{A}$ es un ion metálico con valencia 2^+ (Zn, Mg, Co, Cu, Ni, etc) y $\mathbf{B}$ es un ion metálico con valencia 5^+ (Nb, Ta, Sb) [24]. Por lo tanto, las estructuras tipo trirutilo pueden cristalizar tanto en sistemas tetragonales como en sistemas ortorrómbicos, pertenecientes a los grupos espaciales $P4_2/mnm$ $P2_1/n$ y $P2_1$ según su naturaleza [25].

Estudios revelaron que el arreglo atómico dentro de la celda unitaria de una estructura tipo trirutilo como la del $MgSb_2O_6$, los iones divalentes ($\mathbf{Mg^{2+}}$), están rodeados por 6 aniones de oxígeno formando una sub estructura octaedros [26]. Similarmente, los iones pentavalentes ($\mathbf{Sb^{5+}}$) también están rodeados por 6 aniones de oxígeno formando otra sub estructura de octaedros con distorsiones de red diferentes. Por lo anterior, los iones $\mathbf{Mg^{2+}}$ y $\mathbf{Sb^{5+}}$ coordinados octaédricamente comparten aristas y vértices, dando lugar a una red tridimensional rígida pero estructuralmente versátil [27]. La complejidad estructural del $MgSb_2O_6$ le proporciona propiedades como alto ordenamiento iónico, vacancias de oxígeno controladas, selectividad, estabilidad térmica y alta densidad de sitios activos, lo cual, es de interés para aplicaciones de sensado de gases, fotocatálisis y de almacenamiento de energía. En la **Figura 1** se muestra la celda unitaria de la estructura tipo trirutilo $MgSb_2O_6$.

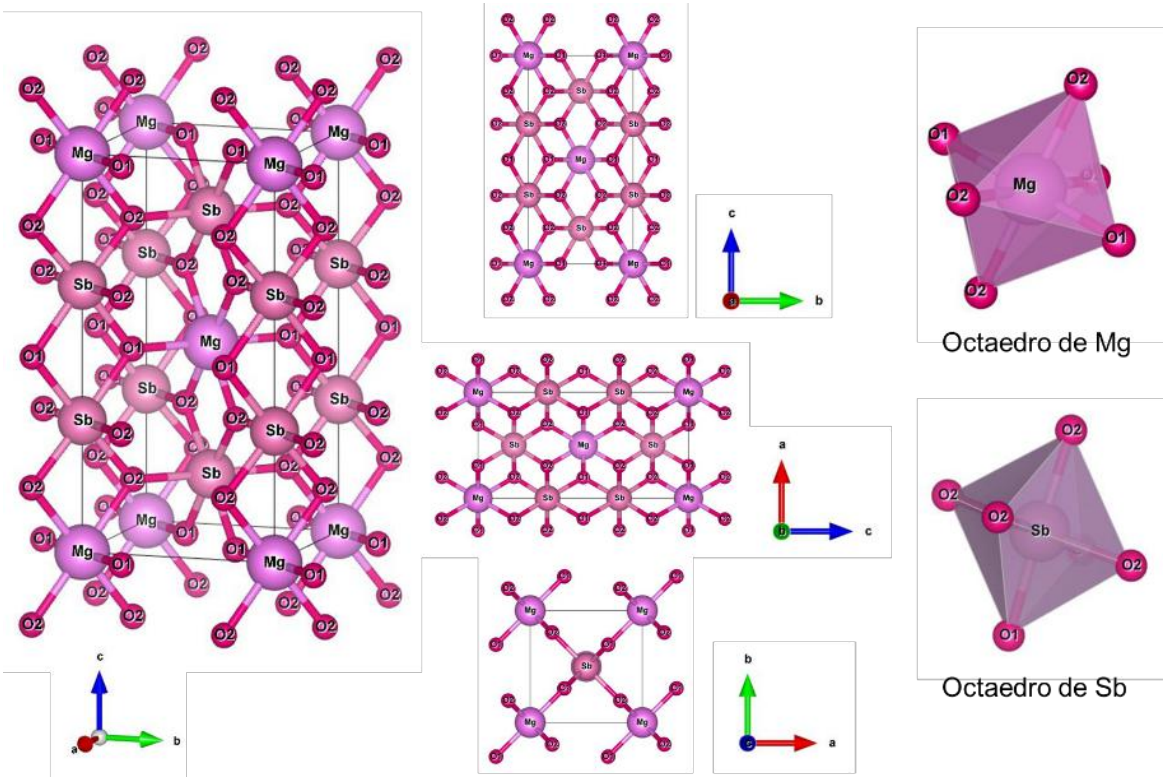


Figura 1. Estructura tipo trirutilo del $MgSb_2O_6$ vista desde diferentes secciones.

Por otro lado, el mecanismo de sensado de gases (en este caso C_3H_8) para el óxido semiconductor con estructura tipo trirutilo $MgSb_2O_6$ se basa en la oxidación del gas reductor sobre especies de oxígeno adsorbidas ($\mathbf{O_2^-, O^-}$ y $\mathbf{O^{2-}}$) [28–30]. Esta oxidación es promovida por la actividad catalítica del ion pentavalente ($\mathbf{Sb^{5+}}$), generando portadores de carga ($\mathbf{e^-}$) que disminuyen la resistencia eléctrica del material [29]. Si empleamos un diagrama de bandas como el que se muestra en la **Figura 2** se puede explicar de manera práctica la respuesta quimiorresistiva del $MgSb_2O_6$, donde la adsorción de las especies de oxígeno induce una curvatura ascendente de la banda de conducción, formando una barrera de potencial o capa de agotamiento superficial ancha que incrementa la resistencia eléctrica [21]. Posteriormente, la constante oxidación del C_3H_8 libera electrones, causando un decremento en la barrera de potencial y aplanamiento de la banda de conducción y de valencia, lo cual, se ve reflejado en la disminución de la resistencia eléctrica [12,21,30].

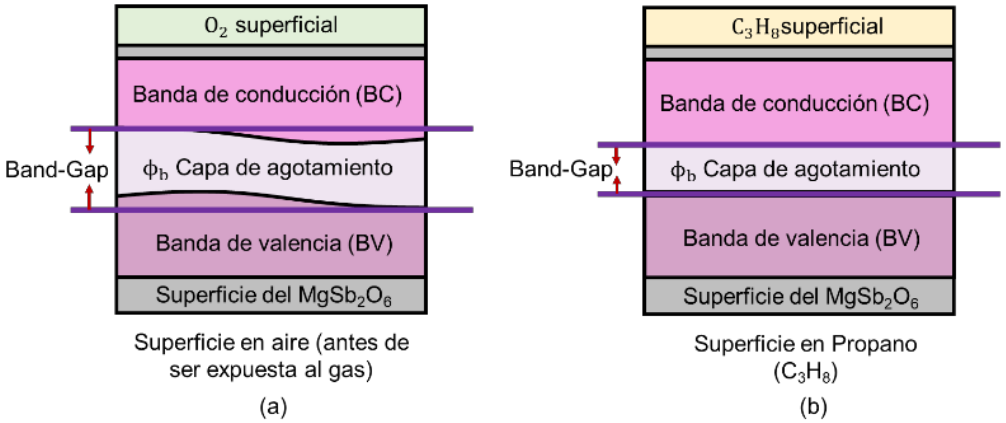


Figura 2. (a) Capa de agotamiento formada por la captura de electrones, (b) Reducción de la capa de agotamiento por la liberación de electrones.

Asimismo, como el propano actúa como gas reductor durante la reacción superficial el mecanismo de sensado propuesto es el que se muestra en la **Ecuación 1** [30]:

$$\mathbf{C_3H_8 + O^- \rightarrow CO_2 + H_2O + e^-} \qquad \text{Ec 1}$$

En pocas palabras, este mecanismo confirma que un semiconductor tipo n como el $MgSb_2O_6$, que se encuentra reaccionando con C_3H_8, incrementa su conductividad eléctrica debido a la reducción de la barrera de potencial y el aumento en la producción de portadores de carga [30].

PARTE EXPERIMENTAL

Síntesis.

La obtención del óxido semiconductor $MgSb_2O_6$ se llevó a cabo mediante el método de solución asistida con microondas. Tomando en cuenta una relación molar 2:1 y que los reactivos utilizados son de la marca Sigma Aldrich con una pureza del 99%, una solución con 1.28 g nitrato de magnesio hexahidratado ($Mg(NO_3)_2 \cdot 6H_2O$) disuelta en 5 ml de etanol (C_2H_6O) fue preparada. También, se preparó una solución con 2.28 g de tricloruro de antimonio ($SbCl_3$) disuelta en 5 ml de C_2H_6O. Simultáneamente, se preparó una tercera solución con 1 ml de etilendiamina ($C_2H_8N_2$) como agente complejante en 5 ml de C_2H_6O. Cada una de la soluciones fue agitada sobre planchas magnéticas durante 15 minutos. Luego las soluciones que contenía al nitrato y al cloruro fueron depositadas gota a gota dentro de la solución de etilendiamina. Posteriormente, la solución final se dejó en agitación vigorosa por 24 h. Al finalizar el tiempo de agitación, la solución final fue sometida a un proceso de radiación con microondas dentro de un microondas doméstico de la marca General Electric, modelo ST0912C01352. En este proceso la solución fue expuesta a una energía de 210 kJ en tiempos de aplicación de 15–30 s para evitar salpicaduras (ver **Figura 3**). Después de múltiples ciclos de exposición la solución se convirtió en un polvo de color blanco, lo cual, quiere decir que el solvente fue eliminado por completo. Finalmente, los polvos del material precursor fueron sometidos a un secado y a un calcinado a 200 y 700°C, respectivamente, dentro de una mufla de la marca Novatech.

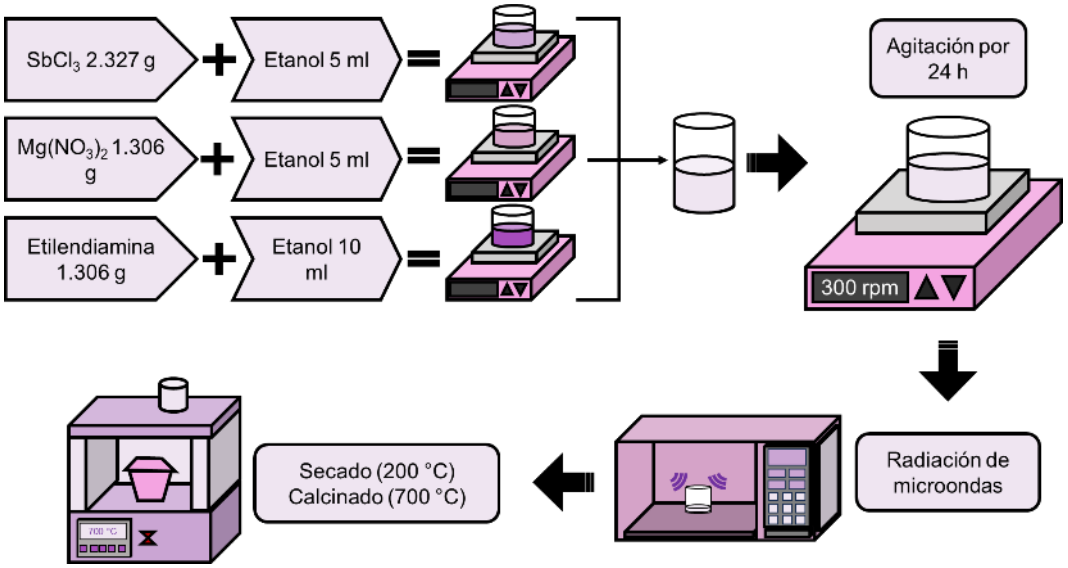


Figura 3. Diagrama de flujo que muestra el procedimiento experimental llevado a cabo para la obtención de los polvos del óxido semiconductor $MgSb_2O_6$.

Caracterización estructural, microestructural y óptica.

La fase cristalina de los polvos de $MgSb_2O_6$ calcinados a 700°C fueron analizados por difracción de rayos X para sólidos cristalinos (XRD, Panalytical Empyrean), usando una fuente de radiación $\mathbf{Cuk\alpha}$

($\boldsymbol{\lambda = 1.5406}$ Å). Para esto, se realizó un barrido en $\boldsymbol{2\theta}$ en un intervalo de 10°–90°, un tamaño de paso de 0.026° y una velocidad de 30 s/paso. Posteriormente, con los datos experimentales del difractograma se estimó el tamaño de cristalito ($\mathbf{D}$) mediante la ecuación de Debye–Scherrer [31]:

$$\mathbf{D} = \frac{\mathbf{0.9\lambda}}{\boldsymbol{\beta \cos \theta}} \qquad \text{Ec 2}$$

Donde $\boldsymbol{\lambda}$ es la longitud de onda de la fuente de radiación utilizada ($\mathbf{Cuk\alpha = 1.5406}$ Å), $\boldsymbol{\beta}$ es el ancho del pico a la mitad de la altura máxima (FWHM) y $\boldsymbol{\theta}$ es el ángulo de Bragg.

Las características microestructurales del $MgSb_2O_6$ fueron estudiadas utilizando un microscopio electrónico de barrido (SEM, JEOL JSM–6390LV), operando con un voltaje de aceleración de 10 kV en alto vacío. La morfología y tamaños de nanopartículas fueron observadas mediante microscopía electrónica de transmisión (TEM, JEOL JEM–ARM200F) usando el modo imagen. Para ello, 0.1 g de los polvos de $MgSb_2O_6$ fueron disueltos en 1 ml de etanol y dispersos dentro de una tina ultrasónica por 5 minutos. Luego de esto, la solución se depositó gota por gota sobre una rejilla de cobre recubierta por una membrana de carbón/Formvar 300–mesh de la marca Ted Pella.

Las pruebas ópticas realizadas para estimar el band–gap de los polvos de $MgSb_2O_6$, se llevaron a cabo en un espectrofotómetro (UV-VIS-NIR, UV–3600 Plus), empleando una esfera de integración para reflectancia difusa. El espectro de reflectancia en función de la longitud de onda se obtuvo en un rango de 200–800 nm.

Preparación de películas gruesas.

Para efectuar las pruebas de sensado de gases del $MgSb_2O_6$, se diseñó un dispositivo que consta de una pequeña base cerámica de 1 cm de largo por 1 cm de ancho, con una pequeña cavidad de forma circular en el centro. Alrededor de la cavidad se instalaron 4 milicolumnas cerámicas con 4 alambres de platino de alta pureza con un espesor de 6 mm, mismos que actuaron como electrodos durante las pruebas. Después, se diluyeron 0.4 g de los polvos de $MgSb_2O_6$ en 2 ml de etanol dentro de una tina ultrasónica por 5 minutos. Subsecuentemente, la mezcla fue depositada gota por gota sobre la cavidad circular de la base cerámica, hasta obtener una película de ~470 µm de espesor y ~300 µm de diámetro (ver **Figura 4**).

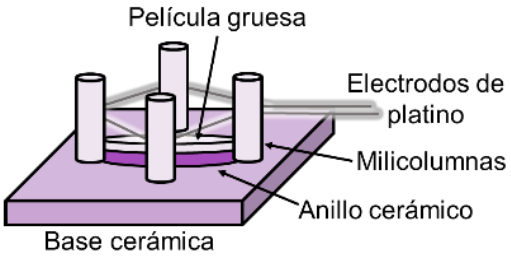


Figura 4. Diagrama esquemático que representa el dispositivo empleado para las pruebas de sensado de gases en C_3H_8.

Posterior a ello, el dispositivo fue colocado dentro del tubo de cuarzo de un horno tubular programable (Lindberg/blue). Durante las pruebas de sensado, se inyectaron flujos de aire–C_3H_8 controlados mediante dos reguladores de flujo másico de 2600 cm^3/min y 10 cm^3/min (Brooks Instruments, GF100CXXC-SH452.6L y GF100CXXC-48 SH40010C), respectivamente. Los cambios en la resistencia eléctrica de la película gruesa fueron registrados a través de un multímetro (Agilent 4663B) y monitoreados con el software LabView 8.6 (National Instruments). La **Figura 5** muestra un diagrama del equipo utilizado para los experimentos. Asimismo, la respuesta eléctrica o sensibilidad ($\boldsymbol{S}$) del material fue estimada utilizando la **Ecuación 3** [30]:

$$\mathbf{S} = \frac{\mathbf{R_G} - \mathbf{R_A}}{\mathbf{R_A}} \qquad \text{Ec 3}$$

Donde $\mathbf{R_G}$ es la resistencia del material en presencia de un gas de prueba, y $\mathbf{R_A}$ es la resistencia del material en presencia de aire.

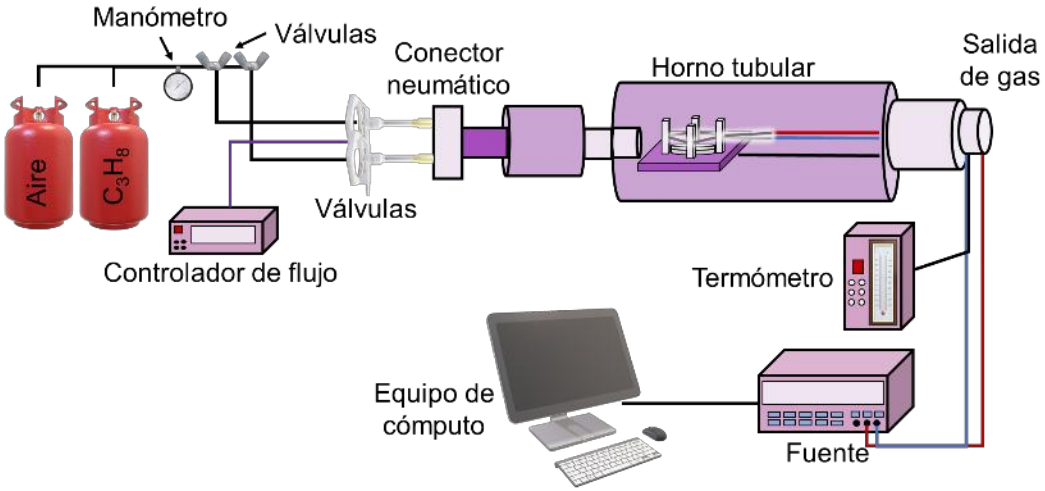


Figura 5. Sistema de sensado de gases utilizado para los experimentos dinámicos en flujos de aire–C_3H_8 sobre la película gruesa de $MgSb_2O_6$.

RESULTADOS

Análisis por DRX.

Los datos de la muestra $MgSb_2O_6$ calcinada a 700 °C, exhiben un patrón de difracción (**Figura 6**), el cual, fue comparado con la ficha No. 88–1725 de la base de datos JCPDF, donde se confirmó la fase cristalina de los polvos del óxido semiconductor $MgSb_2O_6$. Tomando en cuenta la información del PDF de la base de datos, el óxido cristalizó en una estructura tetragonal tipo trirutilo que tiene las reflexiones características en los planos (110), (103) y (113), mostrando un alto ordenamiento estructural con los parámetros de red de a= 4.65 Å; c= 9.23 Å y el grupo espacial de $P4_2/mnm$ [32]. Además, según esta ficha de datos el $MgSb_2O_6$ pertenece a la familia de los antimoniatos con estequiometria ASb_2O_6 donde A se sustituyó por el catión Mg^{2+}. La temperatura del calcinado (700 °C), se ve reflejada en los picos de difracción presentados, ya que, son estrechos y de alta intensidad, confirmando una buena pureza y alto grado de cristalinidad [33]. Para cuantificar el tamaño de los dominios cristalinos, se aplicó la ecuación de Debye–Scherrer a todo el conjunto de planos reflejados en el difractograma (22 planos en total), obteniéndose un valor promedio de ~45.52 nm, lo que corrobora la presencia de cristalitos en la nanoescala [33].

Por otra parte, en el mismo difractograma se identificó una pequeña porción del óxido de magnesio (MgO), que pudo corroborarse al ser comparada con el PDF No. 87–0652 de la base de datos JCPDF. Los resultados mostrados en la **Figura 6**, son consistentes con los reportados anteriormente por los autores de las referencias [34,35], ya que, en estos trabajos se describe la síntesis del compuesto $MgSb_2O_6$ utilizando otros métodos químicos.

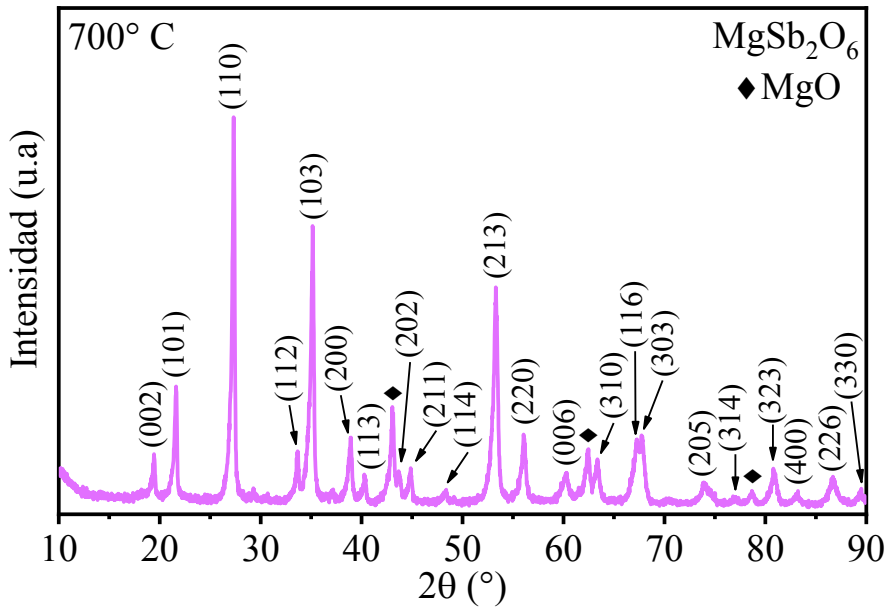


Figura 6. Difractograma de polvos del óxido $MgSb_2O_6$ calcinado a 700 °C en aire.

Los resultados presentados anteriormente (**Figura 6**) fueron comparados con los trabajos de otros autores que han obtenido compuestos tipo trirutilo similares ($CoSb_2O_6$, $CuSb_2O_6$, $NiSb_2O_6$) [36,37], o el mismo compuesto presentado en este trabajo ($MgSb_2O_6$) [34,35]. En esta comparación, encontramos que las temperaturas de calcinado utilizadas por los autores citados previamente, son más altas (800 y 900 °C) en comparación con la temperatura empleada para este trabajo (700 °C). Lo anterior se puede atribuir al método de síntesis utilizado, ya que, permitió la obtención del óxido $MgSb_2O_6$ a temperaturas más bajas y con buena cristalinidad. Por ejemplo, el $MgSb_2O_6$ obtenido en la referencia [34] se obtuvo a una temperatura de calcinado de 800 °C empleando el método de solución asistida con microondas. Por otra parte, el autor Arunkumar N. [35] obtuvo la fase cristalina del $MgSb_2O_6$ a 900 °C utilizando el método de solución por combustión. Finalmente, el grupo de investigación de Larcher [37], obtuvo las fases cristalinas de los compuestos tipo trirutilo $CoSb_2O_6$, $CuSb_2O_6$ y $NiSb_2O_6$ a 800 °C por medió del proceso de reacción en estado sólido.

Análisis por SEM.

En la micrografía mostrada en la **Figura 7** (a) se puede observar una superficie laminar con abundante porosidad (200x). Asimismo, la magnificación realizada a 2000x (zona delimitada), fue posible observar una gran cantidad de aglomerados unidos por efecto de la temperatura de calcinado (700 °C). Por otra parte, la **Figura 7** (b) muestra una imagen captada a 5000x, donde se identificaron partículas aglomeradas que crecieron sobre las láminas de mayor tamaño. El tamaño de partícula promedio de estos aglomerados fue de ~0.88 µm. En la **Figura 7** (c) a 10,000x y (d) a 25,000x, se puede observar el crecimiento de microbarras de diferentes longitudes. El crecimiento de las microbarras se origina sobre una microbase conformada por las partículas de la superficie. Estas microbarras crecen en direcciones aleatorias y poseen tamaños de ~0.77 µm. La superficie irregular constituida por laminas y partículas aglomeradas se debe principalmente a la eliminación del agente complejante utilizado en el proceso de síntesis, al someter el material precursor al calcinado a 700 °C.

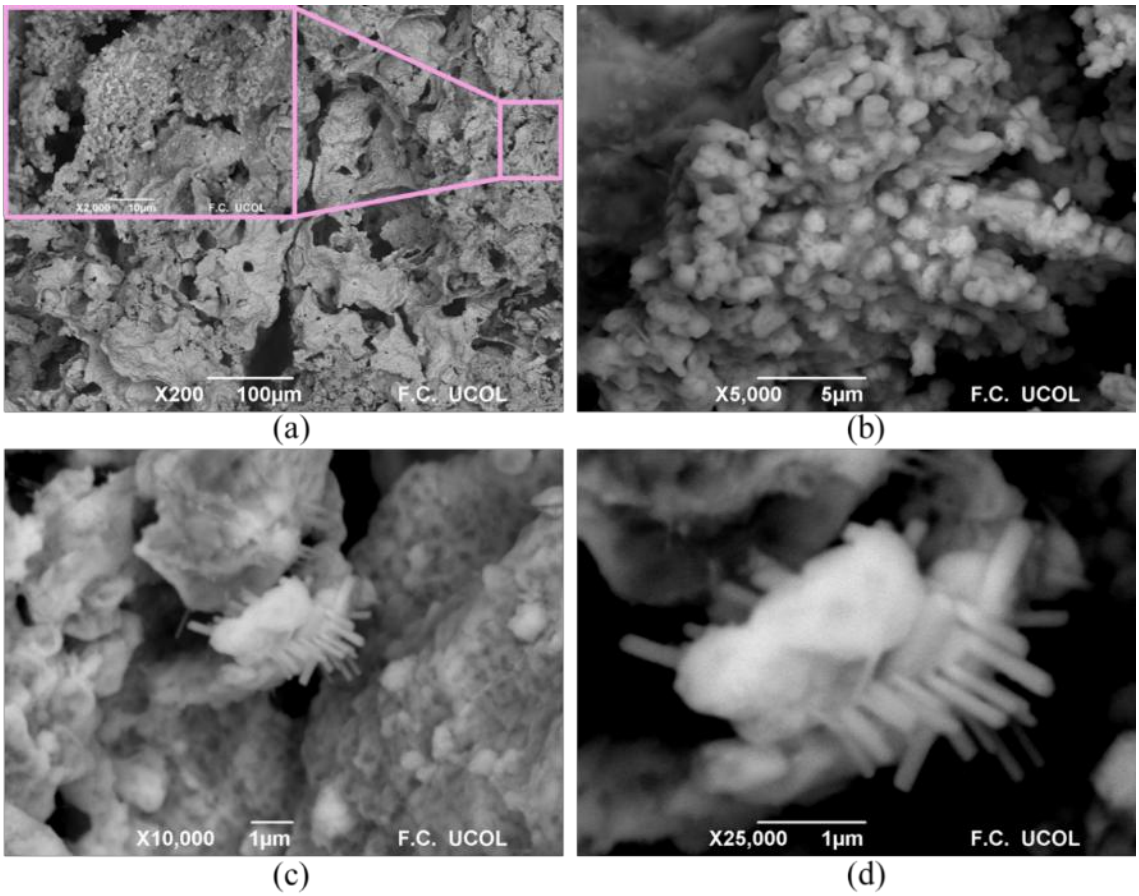


Figura 7. Microestructura de los polvos de $MgSb_2O_6$ calcinados a 700 °C en aire: (a) microestructura laminar, (b) partículas aglomeradas, (c) y (d) microbarras.

Finalmente, las microestructuras presentadas anteriormente (**Figura 7**), se pueden atribuir al efecto de la etilendiamina y al tiempo de calcinado que se llevó a cabo durante la síntesis coloidal. Cuando se somete el material precursor a la rampa de calentamiento del calcinado a 700 °C el agente complejante forma una especie de red, la cual, se encarga de capturar los iones ($\mathbf{Mg^{2+}}$ y $\mathbf{Sb^{5+}}$) [38]. Después de que el agente quelante es eliminado a la temperatura de 200 °C, las partículas metálicas formadas se convierten en núcleos que posteriormente experimentan un crecimiento [39]. Por lo tanto, al final del tratamiento térmico de calcinado las partículas de $MgSb_2O_6$ se unen y se aglomeran formando la microestructura final mostrada en la **Figura 7** [40].

De manera similar, las morfologías presentadas en la **Figura 7** son consistentes con las reportadas en las referencias [34,41], donde se utilizó el mismo método de síntesis (solución coloidal asistida con microondas) y la etilendiamina como agente quelante. Por lo anterior, el mecanismo de crecimiento de las partículas de $MgSb_2O_6$ cumple con los principios de cristalización propuestos por LaMer y Dinegar [42]. Este mecanismo de crecimiento por reacción química está descrito por los siguientes postulados [42]: La concentración de los reactivos utilizados en la solución precursora incrementa de manera gradual. La concentración de los reactivos tiene un límite de saturación y, por tanto, se propicia la aparición de núcleos. Los núcleos formados crecen dando origen a la morfología del compuesto.

Análisis por TEM.

Para realizar un estudio más detallado de la microestrcutura del $MgSb_2O_6$ calcinado a 700 °C, se estudiaron las morfologías presentadas en la **Figura 8** (a y b), donde debido a la pobre transmisión de los electrones es posible observar algunas zonas oscuras. No obstante, se observó la nucleación

de diferentes nanopartículas, las cuales, tienen morfologías irregulares con tamaños promedio de ~23.1 nm. Cabe destacar que, el crecimiento de estas nanopartículas es lo que da origen a la microestructura mostrada en la **Figura 7** luego de someter el material al tratamiento térmico de calcinado a 700 °C. Adicional a ello, se identificó el crecimiento de algunas nanobarras de ~13 nm de largo.

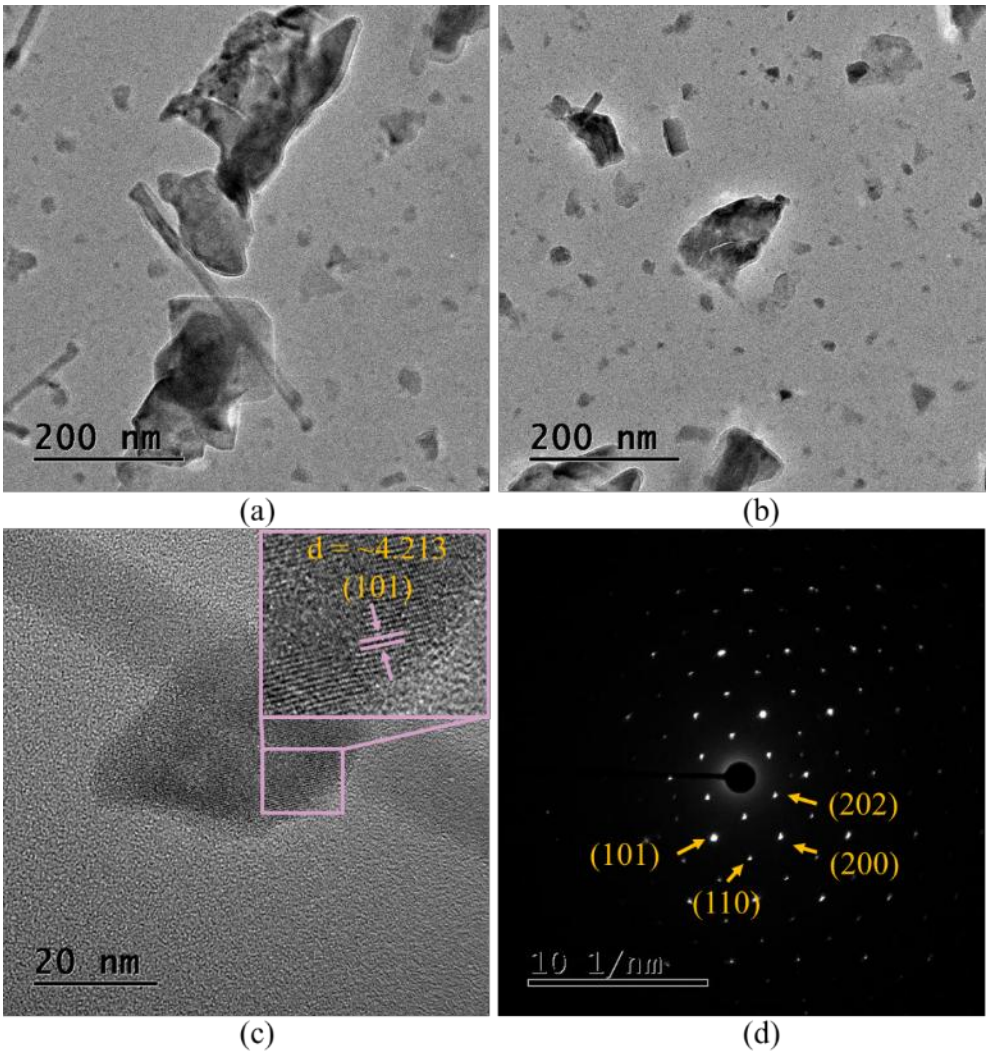


Figura 8. Nanoestructura de los polvos de $MgSb_2O_6$ calcinados a 700 °C en aire: (a), (b) y (c) imágenes de alta resolución, (d) patrón de difracción de electrones.

Por otra parte, con los planos cristalinos mostrados en la **Figura 8** (c) se estimó la distancia interplanar (**d**) con un valor de ~4.213 Å. Asimismo, con el patrón de difracción de área selecta (DAS) (**Figura 8** (d)), se indexaron 4 planos cristalinos que coinciden correctamente con la fase Byströmite del PDF #88–1725 [32].

En la literatura, se han reportado resultados similares, por ejemplo, en la referencia [41] sintetizan el $MgSb_2O_6$ por medio de un proceso de química húmeda empleando 5 ml de etilendiamina, donde los autores reportaron la presencia de nanobarras bien definidos sobre la superficie del material y, además, obtuvieron buenos resultados al hacer pruebas de sensado de gases. Por otro lado, en la referencia [34] obtuvieron el $MgSb_2O_6$ a través de una síntesis química asistida con microondas utilizando 4 ml del agente quelante etilendiamina. Los resultados de estos autores consisten en la formación de nanobarras, además de su estudio como sensor de gases en CO y C_3H_8. En ambas referencias [34,42] se hace hincapié en que la concentración de etilendiamina es la que proporciona

este tipo de morfologías específicas y que, a su vez, la respuesta eléctrica en presencia de gases tóxicos incrementa debido al aumento en el área superficial. No obstante, a pesar de lo mencionado anteriormente en este trabajo se redujo significativamente la concentración del agente quelante y se obtuvieron características nanoestructurales (nanobarras) muy similares, por lo que, se espera que al momento de realizar las pruebas de sensado el $MgSb_2O_6$ sintetizado tenga propiedades eléctricas similares o mejores.

*Análisis por RD–UV–*VIS.

El análisis óptico del óxido $MgSb_2O_6$ calcinado a 700 °C consistió en determinar el ancho de banda prohibida con ayuda de un espectro de reflectancia difusa (RD–UV–Vis). Dicho espectro se obtuvo en un intervalo de 200–800 nm debido a que en la literatura se ha reportado que ese es el intervalo asociado a los óxidos semiconductores tipo trirutilo [34,35,41]. La región de absorbancia del $MgSb_2O_6$ corresponde al intervalo que va de los 200–400 nm aproximadamente. Por otro lado, el ancho de banda prohibida presentado en la **Figura 9** se calculó utilizando la ecuación de Tauc, donde el valor del ancho de banda prohibido para el $MgSb_2O_6$ calcinado a 700 °C fue de ~3.84 eV.

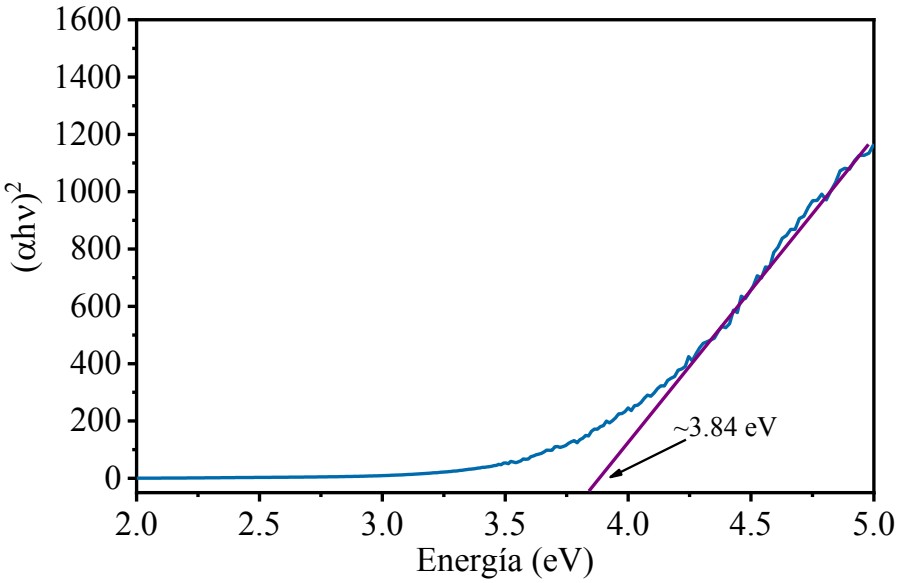


Figura 9. Espectro de RD-UV-Vis utilizado para determinar el band gap del óxido $MgSb_2O_6$ calcinado a 700 °C.

Cabe destacar que, los resultados presentados en la **Figura 9** son consistentes con lo reportado en la literatura. Por ejemplo, en la referencia [42] se registraron valores de banda prohibida que se encuentran en un intervalo de 3.30–4.05 eV para el caso del óxido $MgSb_2O_6$. Adicionalmente, los autores de las referencias [43,44] determinaron que el ancho de banda prohibida para los compuestos tipo trirutilo $ZnSb_2O_6$ y $MgTa_2O_6$ es de 3.3 eV y 4.34 eV, respectivamente. Por lo anterior, el valor que se determinó en este trabajo (3.84 eV) para el $MgSb_2O_6$ se encuentra dentro de lo reportado [35,43,44]. Finalmente, el valor obtenido se asocia principalmente al método de síntesis empleado para la obtención del $MgSb_2O_6$, a la microestructura y al tipo de catión incorporado a la red cristalina trirutilo [34,36,45].

Análisis de propiedades de sensado.

Con la finalidad de estudiar la sensibilidad y la respuesta eléctrica del $MgSb_2O_6$ en atmósferas dinámicas, se utilizaron películas gruesas, las cuales, fueron sometidas a flujos de C_3H_8 en función del tiempo. Las pruebas, fueron realizadas a temperaturas de 300 y 350 °C, respectivamente. Durante la prueba, la superficie de las películas gruesas se estabilizó en 1500 cm^3/min de aire extraseco (21% de O_2, 79 % de N_2) por 2 min. Luego, sin retirar el aire del sistema de medición, un flujo dinámico de 560 ppm de C_3H_8 fue inyectado por otros 2 min, donde se registraron de manera

instantánea los cambios en la resistencia eléctrica. Posteriormente, la concentración de C_3H_8 fue retirada y fue posible observar que las películas gruesas mostraban nuevamente los valores iniciales de resistencia eléctrica que tenían cuando fueron estabilizadas en el flujo de aire extraseco (reversibilidad del proceso). Después de 2 min, se inyectó gas C_3H_8 nuevamente (sin retirar el aire estabilizador) y se registraron los cambios en la resistencia eléctrica del material. Este proceso se repitió múltiples ocasiones hasta obtener los ciclos de respuesta dinámica, los cuales, se presentan en la **Figura 10** (a–d).

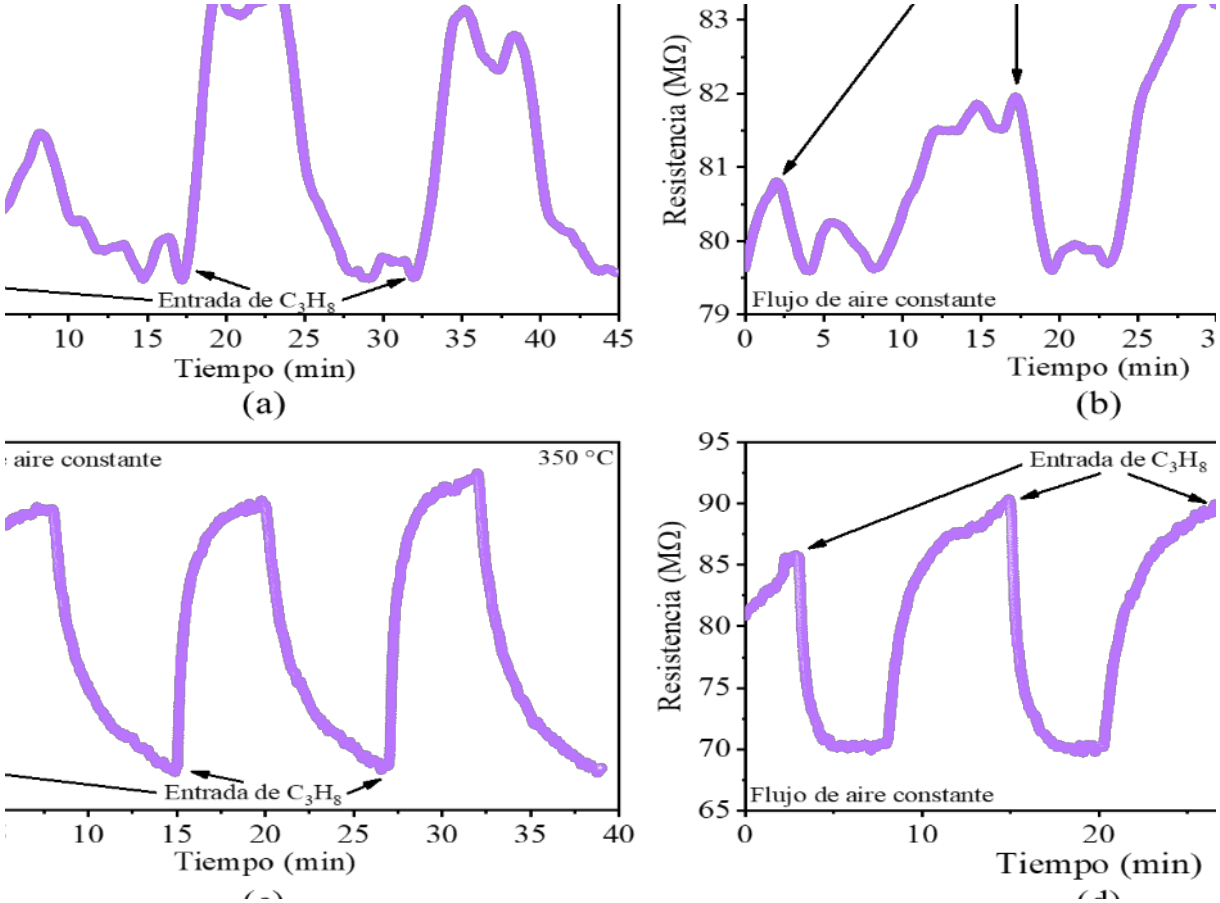


Figura 10. Respuesta dinámica de las películas gruesas fabricadas con los polvos de $MgSb_2O_6$ calcinados a 700 °C en aire, en función del tiempo, (a y c) cambios en el % de sensibilidad, (b y d) cambios en la resistencia eléctrica.

Según lo mostrado en los resultados de la **Figura 10** (a y b), cuando entra el flujo de C_3H_8 (560 ppm) durante la prueba por 2 minutos, el incremento del porcentaje de sensibilidad ocurrió de manera instantánea, mientras que, la resistencia eléctrica disminuyó. Aunque los cambios no fueron significativos, la carencia de sensibilidad y cambios en la resistencia eléctrica se debe principalmente a la temperatura de trabajo, ya que, la película gruesa de $MgSb_2O_6$ no presentó una buena estabilidad térmica. Sin embargo, a esa temperatura el material si presenta reproducibilidad por el número de ciclos de respuesta. A esta temperatura de trabajo (300 °C), los valores registrados para el porcentaje de sensibilidad (**Figura 10** a) se encontraron en un rango de 0.11–2.32 % con un promedio de 2.21 %, respectivamente. Por otra parte, los valores de resistencia eléctrica (**Figura 10** b) para el gas de prueba se encontraron en un rango de 82.12–79.61 kΩ con un promedio de 2.51 kΩ, en cambio los valores de resistencia eléctrica registrados para el aire extraseco fueron de 79.65–82.22 kΩ con un promedio de 2.57 kΩ. Adicionalmente, se calcularon los tiempos de respuesta y recuperación utilizando los valores de resistencia eléctrica de la gráfica presentada en la **Figura 10** b. Para ello, se consideró el 90 % de los valores de resistencia cuando la película está expuesta a C_3H_8 y el 10 % de los valores de resistencia cuando la película se estabiliza con aire extraseco [45].

Por lo tanto, el tiempo de respuesta calculado fue de ~40.87 s, a diferencia del tiempo de recuperación que se calculó en ~45.85 s, respectivamente.

Por otro lado, en la **Figura 10** c y d se muestran los resultados de las pruebas dinámicas a 400 °C. A diferencia de las pruebas a 300 °C, las pruebas a 350 °C mostraron un incremento significativo en la sensibilidad y un decremento mayor en la resistencia eléctrica. Además, se puede observar que durante esta prueba si hubo una buena estabilidad térmica y buena reproducibilidad al momento de inyectar el C_3H_8 y el aire extraseco. También, considerando las curvas mostradas en los gráficos se puede identificar que es un comportamiento típico de un óxido semiconductor tipo n, lo cual, coincide con el tipo de semiconductor del $MgSb_2O_6$ [35]. Los valores de sensibilidad (**Figura 10** c) registrados a 350 °C fueron de 1.27–23.98 % con un promedio de 22.71 %, respectivamente. En cambio, los valores de resistencia eléctrica (**Figura 10** d) en presencia del gas de prueba se encontraron en un intervalo de 85.09–66.51 kΩ con un promedio de 18.58 kΩ, mientras que, los valores de resistencia eléctrica cuando la película está en presencia de aire extraseco fueron de 62.78–80.95 kΩ con un promedio de 18.17 kΩ. Ahora bien, considerando los mismos parámetros utilizados para calcular el tiempo de respuesta y de recuperación de las pruebas a 300 °C, en las pruebas a 350 °C se obtuvo un tiempo de respuesta de ~42.86 s y un tiempo de recuperación de ~47.60 s. Los parámetros calculados para el sensor del óxido $MgSb_2O_6$ pueden corroborarse en la **Tabla 1**.

Tabla 1. Valores obtenidos para el óxido $MgSb_2O_6$ en C_3H_8 (560 ppm) a 300 y 350 °C.

Temperatura °C	ΔR_{Prom} (kΩ)	T_{Res} (s)	T_{Rec} (s)	$Sensibilidad_{Prom}$ (%)
300	2.51	40.87	41.85	2.21
350	18.58	42.86	47.60	22.71

CONCLUSIONES

El análisis estructural, microestructural, óptico, así como las pruebas dinámicas en C_3H_8, revelaron que la síntesis de solución asistida con microondas permitió obtener el $MgSb_2O_6$, a 700°C en escala nanométrica, lo cual, se vio reflejado en la alta sensibilidad, estabilidad térmica, además de tiempos de respuesta y de recuperación cortos.

BIBLIOGRAFÍA

1. [1] J. Lelieveld, J. S. Evans, M. Fnais, D. Giannadaki y A. Pozzer, “The contribution of outdoor air pollution sources to premature mortality on a global scale”, Nature, Vol. 525, (2015) 367–371.
2. [2] Y. S. Kashtan, M. Nicholson, C. Finnegan, Z. Ouyang, E. D. Lebel, D. R. Michanowicz y R. B. Jackson, “Gas and propane combustion from stoves emits benzene and increases indoor air pollution”, Environmental Science & Technology, Vol. 57, (2023) 9653–9663.
3. [3] J. B. Heywood, “Pollutant formation and control in spark-ignition engines”, Energy and Combustion Science, Pergamon Press, Oxford, Reino Unido, 1979, pp. 229–258.
4. [4] A. J. Cohen, M. Brauer, R. Burnett, H. R. Anderson, J. Frostad, K. Estep, et al., “Estimates and 25-year trends of the global burden of disease attributable to ambient air pollution: an analysis of data from the Global Burden of Diseases Study 2015”, The Lancet, Vol. 389, (2017) 1907–1918.
5. D. R. Lide (Ed.), “Thermophysical properties of hydrocarbons,” J. Phys. Chem. Ref. Data, Vol. 27, (1998). 1–195.
6. *G. Korotcenkov, “Metal oxide nanostructures for gas sensing”, Mater. Sci. Eng. B, Vol. 229, (2018) 206–217.
7. *Z. Ziuzina, P. Leek, A. A. Subramaniam, et al., “Selectivity in chemiresistive gas sensors: strategies and challenges”, Chem. Rev., Vol. 125, (2025) 11234–11278.
8. N. Goel, K. Kunal, A. Kushwaha, M. Kuma, Metal oxide semiconductors for gas sensing: A comprehensive review of materials, mechanisms, and performance, Prog. Mater. Sci., Vol. 5, (2022) 1–22.

9. A. Guillén-Bonilla, V. M. Rodríguez-Betancourtt, A. Blanco-Alonso y H. Guillén-Bonilla, “Propane gas sensing performance of $MgSb_2O_6$ trirutile-type oxide synthesized by microwave-assisted colloidal method”, Sensors, Vol. 24, (2016) 2147–2162.
10. A. Guillén-Bonilla, V. M. Rodríguez-Betancourtt, M. Flores-Martínez, O. Blanco-Alonso, J. Reyes-Gómez, L. Gildo-Ortiz y H. Guillén-Bonilla, “Structural, morphological and gas sensing properties of $CoSb_2O_6$ trirutile-type oxide”, Coatings, Vol. 15, (2025) 952–968.
11. N. Yamazoe y K. Shimizu, “Humidity effect on semiconductor gas sensors”, Sensors and Actuators B: Chemical, Vol. 10, (1993) 379–385.
12. G. Korotcenkov, “Metal oxides for solid-state gas sensors: What determines our choice?”, Materials Science and Engineering B, Vol. 139, (2007) 1–23.
13. Z. L. Wang, “Zinc oxide nanostructures: growth, properties and applications”, Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 16, (2004) R829–R858.
14. C. Wagner, “Theoretical analysis of the response of semiconductor gas sensors”, Sensors and Actuators B: Chemical, Vol. 18–19, (1994) 40–45.
15. N. Barsan y U. Weimar, “Conduction model of metal oxide gas sensors”, Journal of Electroceramics, Vol. 7, (2001)143–167.
16. C. J. Brinker y G. W. Scherer, “Sol–gel science: The physics and chemistry of sol–gel processing”, Academic Press, San Diego, CA, (1990) 1–908.
17. K. Byrappa y T. Adschiri, “Hydrothermal technology for nanotechnology”, Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials, Vol. 53, (2007) 117–166.
18. H. Guillén-Bonilla, M. Flores-Martínez, V. M. Rodríguez-Betancourtt, A. Guillen-Bonilla, J. Reyes-Gómez, L. Gildo-Ortiz, M. de la L. Olvera-Amador, J. Santoyo-Salazar, “Microwave-assisted colloidal synthesis and gas sensing properties of trirutile-type $MgSb_2O_6$”, Sensors, Vol. 24, (2016) 2147–2162.
19. S. Komarneni, R. Roy y Q. H. Li, “Microwave-hydrothermal synthesis of ceramic powders”, Materials Research Bulletin, Vol. 27, (1992) 1393–1405.
20. G. Korotcenkov, “The role of morphology and crystallite size of metal oxides in response of conductometric-type gas sensors”, Materials Science and Engineering R, Vol. 61, (2008).1–39.
21. N. Barsan, D. Koziej y U. Weimar, “Metal oxide-based gas sensor research: How to?”, Sensors and Actuators B: Chemical, Vol. 121, (2007) 18–35.
22. R. D. Shannon y C. T. Prewitt, “Effective ionic radii in oxides and fluorides”, Acta Crystallographica Section B, Vol. 25, (1969) 925–946.
23. A. F. Wells, “Structural Inorganic Chemistry”, 5th ed., Oxford University Press, Oxford, (1984) 594–600.
24. H. D. Megaw, “Crystal structures of double oxides of the type AB_2O_6”, Acta Crystallographica, Vol. 5, (1952) 739–744.
25. A. W. Sleight, J. L. Gillson y P. E. Bierstedt, “High-temperature crystal chemistry of trirutile-type oxides”, Solid State Communications, Vol. 17, (1975) 27–30.
26. A. Guillén-Bonilla, V. M. Rodríguez-Betancourtt y H. Guillén-Bonilla, “Structural and morphological characterization of $MgSb_2O_6$ trirutile-type oxide for gas sensing applications”, Materials Research Bulletin, Vol. 124, (2020) 110756–110764.
27. G. Blasse, “Crystal chemistry and some magnetic properties of mixed metal oxides with trirutile structure”, Journal of Inorganic and Nuclear Chemistry, Vol. 27, 1965, pp. 993–1003.
28. N. Yamazoe y N. Miura, “Environmental gas sensing”, Sensors and Actuators B: Chemical, Vol. 20, (1994) 95–102.
29. N. Barsan y U. Weimar, “Conduction model of metal oxide gas sensors”, Journal of Electroceramics, Vol. 7, (2001) 143–167.
30. A. Guillén-Bonilla, V. M. Rodríguez-Betancourtt y H. Guillén-Bonilla, “Gas sensing mechanism of trirutile-type $MgSb_2O_6$ exposed to reducing gases”, Sensors, Vol. 24, (2024) 2147–2162.
31. B. D. Cullity y S. R. Stock, “Elements of X-Ray Diffraction”, 3rd ed., Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, (2001) 167–171.
32. B. Mason y C. J. Vitaliano, “Bystromite, magnesium antimonate, a new mineral”, American Mineralogist, Vol. 37, (1952) 53–57.
33. D. E. Sands, “Introduction to Crystallography”, Dover Publications Inc., New York, (1993) 1–486.
34. H. Guillén-Bonilla, M. Flores-Martínez, V. M. Rodríguez-Betancourtt, A. Guillén-Bonilla, J. Reyes-Gómez, L. Gildo-Ortiz, M. L. Olvera-Amador y J. Santoyo-Salazar, “A novel gas sensor

based on $MgSb_2O_6$ nanorods to indicate variations in carbon monoxide and propane concentrations", Sensors, Vol. 16, (2016) 1–12.
35. A. Nagarajan y S. Naraginti, "Facile synthesis of N-$MgSb_2O_6$ trirutile antimonate and its enhanced photocatalytic performance", International Journal of Environmental Analytical Chemistry, Vol. 102, (2022) 7938–7952.
36. J. A. Ramírez-Ortega, H. Guillén-Bonilla, A. Guillén-Bonilla, V. M. Rodríguez-Betancourtt, A. Sánchez-Martínez, J. T. Guillén-Bonilla, L. Gildo-Ortiz, E. Huízar-Padilla y J. Reyes-Gómez, "Synthesis of the oxide $NiSb_2O_6$ and its electrical characterization in toxic atmospheres for its application as a gas sensor", Materials Science in Semiconductor Processing, Vol. 33, (2022) 18268–18283.
37. D. Larcher, A. S. Prakash, L. Laffont, M. Womes, J. C. Jumas, J. Olivier-Fourcade, M. S. Hegde y J.-M. Tarascon, "Reactivity of antimony oxides and MSb_2O_6 (M = Cu, Ni, Co), trirutile-type phases with metallic lithium", Journal of The Electrochemical Society, Vol. 153, (2006) 1778–1787.
38. A. Guillén-Bonilla, "Síntesis y caracterización de micro y nanopartículas de óxido semiconductor $CoSb_2O_6$ para su potencial aplicación como sensor de gases medioambiental", Sc. D. Dissertation, Universidad de Guadalajara, Guadalajara, México, (2014) 10–29.
39. W. Y. Jung y S. S. Hong, "Synthesis of $LaCoO_3$ nanoparticles by microwave process and their photocatalytic activity under visible light irradiation", Journal of Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 19, (2013) 157–160.
40. N. Masson, R. Piedrahita y M. Hannigan, "Approach for quantification of metal oxide type semiconductor gas sensors used for ambient air quality monitoring", Sensors and Actuators B: Chemical, Vol. 208, (2015) 339–345.
41. H. Guillén-Bonilla, J. T. Guillén-Bonilla, V. M. Rodríguez-Betancourtt, J. A. Ramírez-Ortega, J. P. Morán-Lázaro y A. Guillén-Bonilla, "Synthesis and sensing response of magnesium antimoniate oxide ($MgSb_2O_6$) in the presence of propane atmospheres at different operating voltages", Sensors, Vol. 24, (2024) 1–16.
42. V. K. LaMer y R. H. Dinegar, "Theory, production and mechanism of formation of monodispersed hydrosols", Journal of the American Chemical Society, Vol. 72, (1950) 4847–4854.
43. W. Liu, P. Lin, H. Jin, H. Xue, Y. Zhang y Z. Li, "Nanocrystalline $ZnSb_2O_6$: Hydrothermal synthesis, electronic structure and photocatalytic activity", Journal of Molecular Catalysis A: Chemical, Vol. 349, (2011) 80–85.
44. D. V. Mlotswa, V. R. Orante-Barrón, B. M. Mothudi, S. J. Mofokeng, G. N. Ngubeni, D. Poelman y L. L. Noto, "Thermally stimulated luminescence properties of $MgTa_2O_6$ prepared by solid-state chemical reaction", Journal of Luminescence, Vol. 252, (2022) 119375.
45. A. Guillén-Bonilla, V. M. Rodríguez-Betancourtt, J. T. Guillén-Bonilla, A. Sánchez-Martínez, L. Gildo-Ortiz, J. Santoyo-Zalazar, J. P. Morán-Lázaro, H. Guillén-Bonilla y O. Blanco-Alonso, "A novel CO and C_3H_8 sensor made of $CuSb_2O_6$ nanoparticles", Ceramics International, Vol. 43, (2017) 1–11.

DIAGNÓSTICO POBLACIONAL DEL ENCINO (*Quercus*) EN LA ZONA DE RESERVA JOYA LA BARRETA

Gabriela Selene Ortiz Burgos[1], Rocío Zárate Hernández [2], Mónica Rodríguez Palacio[2], Jhoana Díaz Larrea[2], Laura Núñez García[2], Andrés Sánchez Morales[2], Eloísa Pacheco Almánzar[2] y Roberto Tenorio Mendoza [2]

[1] Facultad de Estudios Superiores Zaragoza, UNAM, [2] Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa.

gsob@ciencias.unam.mx

RESUMEN

El análisis de las características de las poblaciones es una herramienta muy importante para poder comprender su dinámica y poder visualizar los problemas a los que se enfrentan los organismos. Uno de los grupos vegetales más importantes son los encinos, género *Quercus* altamente diverso y que en México se encuentran cerca de 170 especies, de las aproximadamente 450 registradas en el mundo, a pesar de lo anterior poco se conoce de la dinámica poblacional de esta especie. El presente trabajo busca aportar información acerca de algunos aspectos poblacionales en encinos (*Quercus* sp.) del Parque Ecológico Joya la Barreta, Querétaro. Se registró el número de individuos de *Quercus* mediante nueve transectos de 30 m, registrándose un total de 91 individuos cuyo perímetro a la altura del pecho (PAP) se encontró entre los 16 y 469 cm. De acuerdo con la regla de Sturges se estimaron 8 clases tamaño, donde en las primeras dos acumulan un alto número de individuos que se encuentran un rango entre los 16 y 125 cm. Un análisis comparativo del PAP entre transectos mostró la existencia de diferencias significativas entre estos ($P<0.01$), mostrando una heterogeneidad entre los individuos de la población de encinos. De acuerdo con la información recabada, podemos concluir a esta población de *Quercus* en el Parque Ecológico Joya la Barreta, como una población dinámica, lo que implica que predominan los individuos jóvenes, lo que caracteriza a una población que puede mantenerse a largo plazo. La importancia de estos estudios es contribuir al conocimiento de la dinámica poblacional de las especies, escasa para este caso, pero además proporciona información que puede ser utilizada en la conservación y manejo de los bosques de encinos los cuales se encuentran bajo una intensa presión antropogénica, debida a las grandes variaciones ambientales resultado del cambio climático actual y como en este caso por la influencia de las actividades recreativas a las que se ve sometido este sistema.

INTRODUCCIÓN

El análisis de las características de las poblaciones es una herramienta muy importante para la comprensión de su dinámica y poder visualizar los problemas a los que se enfrentan los organismos. Uno de los grupos vegetales más importantes en México son los bosques constituidos por encinos, género *Quercus* el cual presenta una alta diversidad de especies y que en México se encuentran cerca de 170, de las aproximadamente 450 registradas en el mundo. Los encinos, son un grupo que posee una amplia distribución a nivel mundial en el hemisferio norte, donde México se destaca debido a que es uno de los países con mayor número de especies endémicas (109 aproximadamente; Valencia, 2004), aspecto que es difícil de determinar debido a que puede presentar un alto grado de hibridación entre las especies. Por lo que el estudio del género y su alto número de especies ha adquirido gran relevancia debida a su importancia ecológica por la gran diversidad faunística que sostiene (por ejemplo, aves, reptiles y anfibios) y económica debido a la resistencia de su madera. Además de esto, debe reconocerse la gran variedad de funciones del ecosistema que estos ambientes proveen como son las de regulación, abastecimiento y culturales, las cuales se encuentran amenazadas por las actividades humanas y principalmente por la fragmentación de los sistemas y el cambio de uso de suelo en la zona. No obstante, lo anterior poco se conoce de la dinámica poblacional de estos bosques en el Parque Ecológico la Joya la Barreta el cuál es el último reducto de bosque de encino en el estado de Querétaro. Debido a lo anterior el

presente trabajo busca realizar una aportación para el conocimiento de algunos aspectos poblacionales relevantes del bosque de encino (*Quercus* sp.) que se localiza en el Parque Ecológico Joya la Barreta, Querétaro, México.

PARTE EXPERIMENTAL

El área de estudio se encuentra al noroeste del estado de Querétaro se encuentra el municipio de Santiago de Querétaro, donde se encuentra El Parque Ecológico la Joya-la Barreta que posee una superficie de 245 ha, establecido hacia el noreste de la Delegación Municipal de Santa Rosa Jáuregui, casi en los límites con el estado de Guanajuato, presenta un gradiente altitudinal que va de los 2,100 a los 2,600 msnm, con un clima tipo BS1kw(w) semiseco templado, temperatura media anual de 18 °C y precipitación media anual de 555 mm (Martínez Pardo Salas et al., 2021). Se estableció con el objeto de conservar y restaurar uno de los últimos reductos de bosque de encino de la región para el mantenimiento de múltiples servicios ambientales como: protección de ecosistemas de montaña, infiltración de agua, generación de oxígeno, regulación del clima y protección de un refugio importante de flora, fauna y ecoturístico. Además, de ofrecer alternativas de esparcimiento, recreación y educación ambiental.

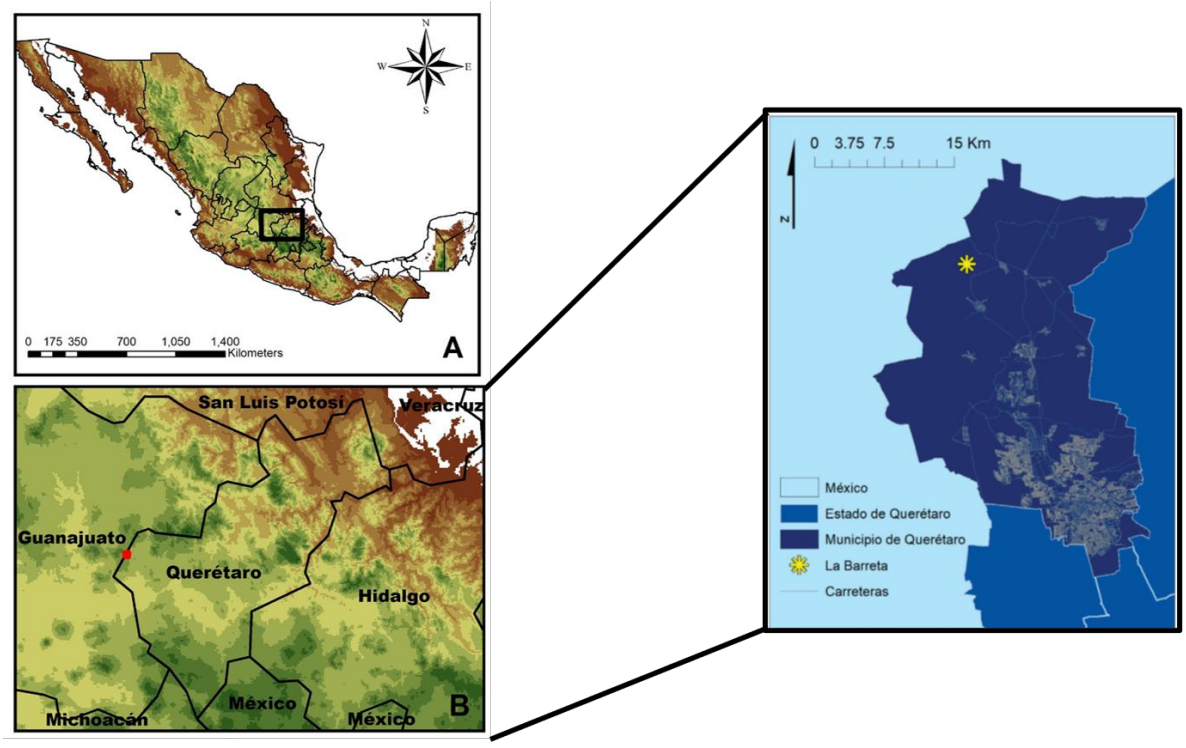


Figura 1. Localización de la comunidad de La Joya - La Barreta a nivel de municipio y estado. (Modificado de Martínez Pardo Salas et al., 2021 y Tepos-Ramírez et al.2021).

Para el efecto se establecieron 9 transectos en el área del bosque de encino, para así registrar el número de individuos, el Perímetro (P) a la altura del pecho en centímetros (PAP), para posteriormente realizar el cálculo del Diámetro ($D=P/\pi$) a la altura del pecho (DAP). Se realizó un análisis descriptivo e inferencial del PAP y del DAP mediante el paquete estadístico NCSS, estableciéndose el número de clases de tamaño mediante la regla de Sturges. Para determinar el estadístico de prueba se evaluaron los supuestos de normalidad (Prueba de Omnibus) y homocedasticidad (Prueba de Levene).

RESULTADOS

De acuerdo con el muestreo, de los nueve transectos se registró un total de 91 individuos del género *Quercus*, de los cuales mostraron un perímetro a la altura del pecho (PAP) se encontró en un intervalo entre los 16 y 469 cm, mientras que el DAP se encontró entre los 5.09 149.29 cm. Donde el promedio del PAP fue de 104.92 cm mientras que el DAP fue 33.4 cm (Tabla 1).

Tabla 1. Estadística descriptiva del perímetro y diámetro a la altura del pecho de *Quercus* en El Parque Ecológico la Joya-la Barreta.

	N	*Media*	*Desviación estandar*	*Error estandar*	*Mínimo*	*Máximo*	*Recorrido*
Perímetro	91	104.92	84.65	8.87	16	469	453
Diámetro	91	33.40	26.94	2.82	5.093	149.287	144.194

De acuerdo con la regla de Sturges se estimaron 8 clases tamaños, los histogramas realizados para el DAP y el PAP, concuerdan en que en ambos se puede observar que en las primeras dos clases de acumulan un alto número de individuos de tamaño pequeño o juveniles, para el resto de las clases de tamaño se encontraron muy pocos individuos (Figura 2).

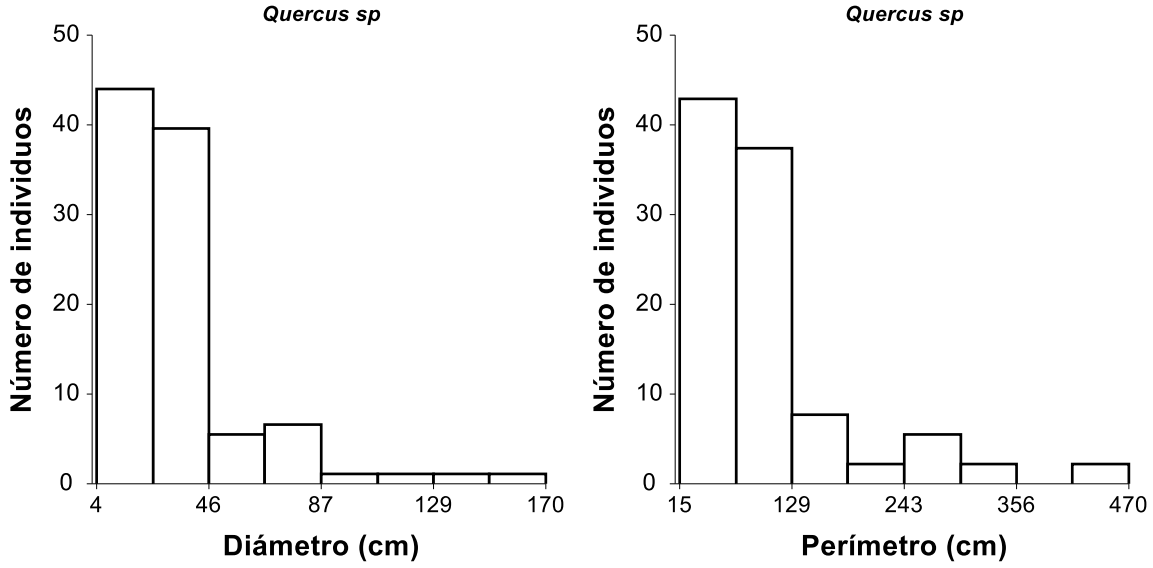


Figura 2. Histogramas de la distribución del DAP y PAP del Quercus sp en El Parque Ecológico la Joya-la Barreta.

Para el análisis inferencial debido a que no se cumplieron con los supuestos de normalidad ($p<0.05$) y homocedasticidad ($p<0.05$), se utilizó una prueba de Kruskal-Wallis para determinar si existía diferencias entre transectos, encontrándose que para ambos parámetros analizados se encontraron diferencias significativas ($p = 0.002$), debido a lo anterior se aplicaron pruebas de comparaciones múltiples no paramétricas determinándose que todos los grupos resultaron ser diferentes entre ellos tanto para el DAP como para PAP.

CONCLUSIONES

De acuerdo con la información recabada, podemos concluir a esta población de *Quercus* en el Parque Ecológico Joya la Barreta, como una población dinámica, lo que implica que predominan los

individuos jóvenes, aspecto que caracteriza a una población que puede mantenerse a largo plazo debido a que se puede permitir un reemplazo y aumento en el número de individuos dentro de este sistema. Las diferencias entre transectos pueden deberse a cambios sutiles en las variaciones ambientales que pueden verse influidas por la pendiente y su cercanía a las zonas más transitadas en el parque. Resaltamos la importancia de la realización de estos estudios ya que al conocer la dinámica poblacional de las especies nos permite proveer de información debido a la escasez de la misma para esta zona protegida y la cual puede ser utilizada para la conservación y manejo de los bosques de encinos los cuales se encuentran bajo una intensa presión antropogénica, debida a las grandes variaciones ambientales resultado del cambio climático actual y como en este caso por la influencia de las actividades recreativas a las que se ve sometido el Parque Ecológico La Joya- La Barreta.

BIBLIOGRAFÍA

1. S., Martínez Pardo Salas, S., F. Aguilar-Galván & L. Hernández-Sandoval. “Plantas silvestres comestibles de la Barreta, Querétaro, México y su papel en la cultura alimentaria local”. Etnobiología, Vol.19, 1, 2021, pp: 41-62.
2. S., Valencia. “Diversidad del género *Quercus* (Fagaceae) en México” 2004. Bol. Soc. Bot. México, 75, 2004, pp. 33-53.
3. M. Tepos-Ramírez, R. Pineda-López & H. Domínguez-Vega. “Herpetofaunistic diversity in the ecological park "La Joya–La Barreta", Querétaro, México: a comparison between two sampling methods and three vegetation types”. Revista Latinoamericana de Herpetología Vol. 04, 02, 2021, pp. 116-125.

EVALUACIÓN DE LAS PROPIEDADES NUTRICIONALES Y DE ÁCIDOS GRASOS DEL JUMIL (*Edessa* Spp.)

Tito Emilio Ariza Ortega[1], José Alberto Ariza Ortega[2*], Esther Ramírez Moreno[2], Zuli Guadalupe Calderón Ramos[2], Araceli Ortiz Polo[2], Quinatzin Yadira Zafra Rojas[2], José Arias Rico[3]

[1]Instituto Mexicano del Seguro Social, [2]Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, [3]Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo.
alberto190375@hotmail.com

RESUMEN

Los jumiles (*Edessa* spp.) son insectos comestibles de consumo tradicional en México; sin embargo, existen pocos estudios que describan de manera integral sus propiedades nutricionales y su perfil de ácidos grasos. Por lo tanto, el objetivo del trabajo fue evaluar la composición nutricional y el perfil de ácidos grasos del jumil. Los jumiles fueron adquiridos en el estado de Tlaxcala en la forma en que son consumidos por la población local. El análisis químico proximal se realizó mediante métodos convencionales, mientras que el aceite se extrajo utilizando un sistema Soxhlet, seguido de la metilación de los ácidos grasos y su análisis mediante cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas. Las proteínas y los lípidos fueron los predominantes, con 32.00% y 39.00%, respectivamente. El aceite presentó un contenido de ácidos grasos insaturados (99.27%), siendo el ácido γ-linolénico el componente mayoritario (77.00%). El jumil constituye una fuente relevante de proteínas y ácidos grasos poliinsaturados, considerados deseables en la alimentación. No obstante, su composición puede variar en función de su dieta y de factores ambientales, por lo que resulta necesario promover su conservación, manejo sustentable y consumo a partir de sistemas de crianza controlados.

INTRODUCCIÓN

Los alimentos pueden clasificarse según su composición en macronutrientes y micronutrientes, los cuales determinan su valor nutricional y su impacto fisiológico en el organismo humano[1]. La calidad nutricional de los alimentos está influenciada por factores ambientales, como el estrés biótico y abiótico, que modifican la síntesis de metabolitos y compuestos bioactivos[2].

En este contexto, la seguridad alimentaria representa un desafío global, especialmente en poblaciones con acceso limitado a fuentes convencionales de proteína y lípidos, lo que puede derivar en deficiencias nutricionales[3].

Los insectos comestibles han sido propuestos como una alternativa sostenible debido a su alto contenido de proteínas, lípidos y compuestos funcionales, además de su bajo impacto ambiental[4]. Sin embargo, aún existe información limitada sobre la composición química de diversas especies, como el jumil (*Edessa* spp.)[5].

Los jumiles pertenecen a la familia Pentatomidae y forman parte de la tradición alimentaria en México, donde son consumidos en diversas preparaciones culinarias[6,7]. A pesar de su relevancia cultural, su caracterización nutricional sigue siendo insuficiente. Por lo tanto, el objetivo de este trabajo fue evaluar las propiedades nutricionales y de ácidos grasos del jumil (*Edessa* spp).

TEORÍA

El valor nutricional de los alimentos está determinado no solo por su contenido de macronutrientes, sino también por la calidad de sus componentes lipídicos. Los ácidos grasos insaturados, particularmente los poliinsaturados, desempeñan un papel esencial en la salud humana, participando en procesos antiinflamatorios, regulación metabólica y función cardiovascular. En insectos

comestibles, el perfil lipídico puede variar en función de su dieta, hábitat y condiciones ambientales, lo que influye directamente en la proporción de ácidos grasos saturados e insaturados. En particular, el ácido γ-linolénico es un ácido graso esencial con potencial terapéutico, asociado con efectos antiinflamatorios y beneficios en enfermedades metabólicas. Por ello, la caracterización del perfil de ácidos grasos en insectos como el jumil permite evaluar su potencial como alimento funcional.

PARTE EXPERIMENTAL

Muestra

Para este trabajo, se adquirieron 500 g de jumiles secos en diciembre tal como se consume en las ciudades del estado de Tlaxcala, México. Posteriormente, la muestra de estudio se homogeneizó hasta alcanzar un tamaño de partícula de 250 µm.

Extracción de aceite

Extracción por Soxhlet

La muestra homogeneizada de jumil seco (1 g) se colocó en un dedal de extracción. El dedal se depositó dentro del extractor Soxhlet. A continuación se vertió hexano como disolvente en un matraz de fondo redondo conectado al extractor y al matraz, junto con el refrigerante. El matraz de fondo redondo con hexano se calentó (60 °C) y este disolvente se volatilizó. El condensado de hexano se vertió en el extractor que contenía el portadedal y durante la extracción, el extractor se llenó gradualmente con disolvente condensado. Cuando el disolvente alcanzaba un nivel de rebose se crea un sifón que contiene los analitos del portadedal y los descarga de nuevo en el matraz de fondo redondo reiniciando el ciclo. El proceso tuvo una duración de 4 h[8]. La mezcla de disolvente y aceite se separó mediante un evaporador rotatorio al vacío a una temperatura de 50 °C y una velocidad de rotación media (Büchi, Baño Calefactor B-490, México), acoplado a una bomba de vacío (Büchi, Vacuum Rump V-700, México).

Análisis instrumental

Cromatografía de gases (GC) acoplada a espectrómetro de masas (SM)

El contenido de ácidos grasos se calculó como el porcentaje total de ésteres metílicos de ácidos grasos (FAMEs). Para esta determinación, se utilizó un cromatógrafo de gases (GC HP-7890 USA) equipado con un espectrómetro de masas 5973N. Se empleó una columna con las siguientes especificaciones: DB-5ms, columna GC J&W Agilent J&W Ultra Inert, de 30 m de longitud × 0.25 mm de diámetro interior × película de 0.25 µm (5 % fenil) metilpolisiloxano. Los FAMEs se extrajeron según la metodología IUPAC[9]. El volumen de inyección fue de 2 µL (con un radio de división de 20:2). La temperatura del horno fue de 100 °C (con 4 min de retención) y se incrementó a 250 °C a una velocidad de 3 °C min^{-1} (con 10 min de retención). El sistema de inyección y el detector se mantuvieron a 230 y 250 °C, respectivamente. El gas portador fue N_2 con un flujo de 1.2 mL min^{-1}. La comparación de los ácidos grasos se realizó con el estándar de 37 componentes de ácidos grasos (Food Industry FAMEs Mix, Restek). Cada análisis se realizó por duplicado.

Análisis estadístico

Los resultados se obtuvieron mediante estadística descriptiva (media ± desviación estándar) utilizando el programa estadístico IBM SPSS Statistics versión 22.

RESULTADOS

En la Tabla 1 se observa que el contenido de proteína (39.25%) y lípidos (39.00%) en el jumil fue similar con lo reportado para insectos comestibles, los cuales presentan valores elevados de proteína (30–60%) y lípidos (10–50%), dependiendo de la especie y condiciones de alimentación[4]. En este sentido, los resultados obtenidos se ubican en un parámetro superior, lo que sugiere que *Edessa* spp. es una fuente particularmente rica en macronutrientes.

Al comparar con el estudio de López-Morales et al.[5], quienes evaluaron jumiles y chicatanas, se observó una tendencia similar en cuanto al alto contenido proteico; sin embargo, el presente estudio reportó un contenido lipídico ligeramente mayor. Esta diferencia puede atribuirse a factores como la

dieta del insecto, el estado fisiológico o el método de procesamiento, tal como lo señalaron Šola et al.[2], quienes destacaron que el estrés ambiental y las condiciones ecológicas influyen significativamente en la composición química de los organismos.
El contenido de cenizas en el jumil (*Edessa spp.*) fue mayor al reportado para otras especies del género[4]. Este resultado sugiere un aporte mineral relevante, el cual puede variar en función de la dieta del insecto[2].

Tabla 1. Resultados del análisis químico proximal y actividad de agua realizado en jumil seco,

Parámetros	Valores
Humedad (%)	2.78 ± 0.32
Proteína (%)	39.25 ± 0.33
Lípidos (%)	39.00 ± 0.15
Ceniza (%)	6.00 ± 0.02
Carbohidratos (%)	24.81 ± 0.00
Actividad de agua	0.02 ± 0.00

Los resultados son promedios de tres repeticiones ± DE.

Por otra parte, el contenido de carbohidratos (24.81%) es relativamente elevado en comparación con algunos insectos reportados en la literatura, lo que podría asociarse con la presencia de quitina y otros polisacáridos estructurales. Este aspecto es relevante, ya que dichos compuestos pueden tener efectos prebióticos y funcionales, contribuyendo a la salud intestinal[4,5].

El bajo contenido de humedad (2.78%) y la actividad de agua (0.02) indican una alta estabilidad del jumil, lo cual fue similar con lo esperado en alimentos deshidratados y representa una ventaja en términos de conservación y almacenamiento[8,9]. Según Hussain et al.[3], este tipo de características son clave para mejorar la seguridad alimentaria en contextos de acceso limitado a alimentos frescos.

Por lo anterior, el jumil puede considerarse un alimento altamente energético, con potencial como suplemento proteico y lipídico.

El perfil lipídico del jumil (Tablas 2 y 3) mostró una predominancia de ácidos grasos insaturados (99.27%), lo cual supera significativamente lo reportado en otros insectos comestibles. De acuerdo con Li et al.[4], los insectos suelen presentar entre 60–80% de ácidos grasos insaturados, lo que indica que *Edessa* spp. posee un perfil excepcionalmente rico en este tipo de lípidos.

Tabla 2. Ácidos grasos saturados en jumil.

Número	Nombre	Fórmula	Valores
1	Butanoico	$C_{4:0}$	0.06 ± 0.00
2	Caproico	$C_{6:0}$	0.02 ± 0.00
3	Caprílico	$C_{8:0}$	0.02 ± 0.00
4	Cáprico	$C_{10:0}$	0.02 ± 0.00
5	Undecanoico	$C_{11:0}$	0.03 ± 0.00
6	Láurico	$C_{12:0}$	0.02 ± 0.00
7	Tridecanoico	$C_{13:0}$	0.10 ± 0.00
8	Mirístico	$C_{14:0}$	0.02 ± 0.00
9	Pentadecanoico	$C_{15:0}$	0.03 ± 0.00
10	Palmítico	$C_{16:0}$	0.02 ± 0.00
11	Esteárico	$C_{18:0}$	0.08 ± 0.00
12	Araquidónico	$C_{20:0}$	0.04 ± 0.10
13	Heneicosanoico	$C_{21:0}$	0.14 ± 0.00
14	Behénico	$C_{22:0}$	0.05 ± 0.00

15	Tricosanoico	$C_{23:0}$	0.07 ± 0.00
		Total	0.73

Los resultados son promedios de tres repeticiones ± DE.

En particular, el alto contenido de ácido γ-linolénico (77.00%) representa un hallazgo notable, ya que este ácido graso no suele encontrarse en concentraciones tan elevadas en insectos. Estudios previos han señalado la presencia predominante de ácido linoleico y oleico como los principales componentes en insectos comestibles[4,5], por lo que el predominio de γ-linolénico en este estudio podría estar relacionado con factores específicos de la dieta o metabolismo del jumil[2].

El contenido de ácido linoleico (17.45%) fue similar con lo reportado en la literatura, donde este ácido graso es considerado uno de los principales componentes de los insectos y un nutriente esencial en la dieta humana[5]. Asimismo, la presencia de ácido oleico (3.86%) fue similar con estudios previos, aunque en menor proporción, lo que sugiere una variabilidad en el perfil lipídico entre especies[4,5].

Tabla 3. Ácidos grasos insaturados en jumil.

Número	Nombre	Fórmula	Valores
1	Palmitoleico	$C_{16:1}$	0.06 ± 0.00
2	Elaídico	$C_{18:1t}$	0.05 ± 0.00
3	Oleico	$C_{18:1}$	3.86 ± 0.00
4	Linoleico	$C_{18:2}$	17.45 ± 0.00
5	γ-Linolénico	$C_{18:3}$	77.00 ± 0.00
6	Paulínico	$C_{20:1}$	0.36 ± 0.00
7	Linolénico	$C_{18:3}$	0.39 ± 0.00
8	Eicosadienoico	$C_{20:2}$	0.09 ± 0.00
		Total	99.27

Los resultados son promedios de tres repeticiones ± DE.

Por lo tanto, el jumil presenta un perfil lipídico excepcional, con alto contenido de ácidos grasos poliinsaturados, lo que lo posiciona como un alimento con potencial nutracéutico.

CONCLUSIONES

El jumil constituye una fuente relevante de proteínas y ácidos grasos poliinsaturados, considerados deseables en la alimentación. Sin embargo, su composición puede variar en función de su dieta y de factores ambientales, por lo que resulta necesario promover su conservación, manejo sustentable y consumo a partir de sistemas de crianza controlados.

BIBLIOGRAFÍA

1. Morris AL, Mohiuddin SS. Biochemistry, nutrients. StatPearls [Internet]. 2023.
2. Šola I, Poljuha D, Pavičić I, Jurinjak Tušek A, Šamec D. Climate change and plant foods. Foods. 2025;14(3):416.
3. Hussain MA, Li L, Kalu A, Wu X, Naumovski N. Sustainable food security and nutritional challenges. Sustainability. 2025;17(3):874.
4. Li M, Mao C, Li X, Jiang L, Zhang W, et al. Edible insects as a nutritional resource. Foods. 2023;12(22):4073.
5. López-Morales VA, Ariza-Ortega JA, Díaz-Reyes J, et al. Proximal chemical evaluation in insects. J Insects Food Feed. 2021;7(2):197–204.
6. Hadley D. Stink bugs of family Pentatomidae. ThoughtCo. 2025.
7. Huerta J. Jumiles, insectos comestibles de Taxco. México Desconocido. 2026.
8. AOAC. Official methods of analysis. 2019.
9. IUPAC. Standard methods for analysis of oils and fats. 2009.

OPTIMIZACIÓN DE LA SÍNTESIS BIOGÉNICA DE NANOPARTÍCULAS DE SULFURO DE COBRE CON EXTRACTO DE *Moringa Oleifera*

Neali Valencia-Espinoza[1], Fabricio G. Mendez-Landin[2], Alejandro Vega-Rios[3], Alain S. Conejo-Davila[4], Luisa F. Medina-Ganem[1], Ana V. Gutierrez-Gerrero[5], Oscar M. Rodriguez-Narvaez[1],

[1]Dirección de Investigación y Soluciones Tecnológicas, Centro de Innovación Aplicada en Tecnologías Competitivas, [2]Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingenierías Campus Guanajuato, Instituto Politécnico Nacional, [3]Centro de Investigación en Materiales Avanzados, SC, [4]MicroPrime S RL de CV, [5]Instituto Tecnológico Superior de Purísima del Rincón.
orodriguez@ciatec.mx

RESUMEN

En la última década, se han desarrollado múltiples métodos de síntesis química para la producción de nanopartículas, los cuales, a pesar de su eficiencia, han mostrado efectos adversos en el ambiente. Por ello, se han buscado métodos alternativos donde han destacado los métodos biogénicos, que emplean extractos de origen biológico como agentes reductores y estabilizantes. Sin embargo, dentro de este rubro existen incógnitas acerca de la formación de las nanopartículas, lo que, gracias a esto, hace complicado su escalamiento. Por ello, en el presente estudio se realizó la optimización de la síntesis de nanopartículas de sulfuro de cobre con extractos de hoja de Moringa oleifera (MO). Para la producción del extracto se utilizó la metodología de extracción salting-out-infusión, en la cual se utilizó una concentración de 50 y 100 g L^{-1} de MO; 7, 12.5, 15, 25 y 50 g L^{-1} de NaCl; temperaturas de 30°, 40°, 50°, 60°, 70° y 80°C durante 1 hora. Mediante los extractos resultantes se agitaron en conjunto con una solución 0.1 M de $CuSO_4*5H_2O$ durante 24 h para la síntesis de las NPs. Para la caracterización de los extractos se determinaron concentraciones de flavonoides, polifenoles, proteínas y azúcares totales, mediante diferentes metodologías como la cuantificación de flavonoides totales, método de Folin-Ciocalteu, método de Bradford, y cuantificación de azúcares totales, respectivamente. Esto con la finalidad de determinar el efecto de las biomoléculas en la formación de las NPs. Una vez obtenidas las NPs de Cu, estas se caracterizaron mediante diversas técnicas, en las que de cada una de ellas se resaltaron diversas cuestiones, como TGA, que demostró la presencia de diferentes especies de biomoléculas, las cuales se pudieron relacionar con la formación de las NPs; además, se identificaron las fases de celulosa, hemicelulosa y lignina, las cuales son compuestos lignocelulósicos presentes en abundancia en las plantas. Asimismo, el análisis de espectroscopía UV-Visible mostró plasmones entre 500 y 700 nm. En el análisis FTIR-ATR se identificaron grupos O-H, C-C, C=O, C=C, atribuidos a la presencia de compuestos biológicos en las NPs. El análisis TEM en el cual se observó que las NPs poseen diversos tamaños, formas, dispersiones y están recubiertas con material biológico. Por último, se realizó un XPS demostrando que las NP eran CuS. Por otra parte, las NPs de Cu fueron probadas como desinfectantes mediante la técnica de MIC (concentración mínima inhibitoria), en la cual se demostró que con un factor mínimo de 1:8 las NPs inhibían el crecimiento de E. coli.

INTRODUCCIÓN

Nuevas tecnologías sustentables de generación de nanopartículas han sido desarrolladas, en las que los métodos biogénicos han resaltado por el uso de extractos de componentes naturales (i.e., plantas, bacterias, algas, hongos o levaduras), para producir nanopartículas recubiertas con biomoléculas derivadas del compuesto orgánico(Medina-Ganem et al., 2026). Sin embargo, aún existen limitaciones que impiden la escalabilidad de los procesos de síntesis biogénica; la de mayor impacto es la variabilidad de los compuestos bioactivos en la fuente utilizada, esta variabilidad puede afectar directamente las características fisicoquímicas de las nanopartículas obtenidas, tales como su tamaño, morfología, estabilidad y rendimiento de síntesis. En este contexto, el presente estudio se centra en la caracterización y optimización de las biomoléculas presentes en el extracto, con el fin de establecer una relación entre su composición y el desempeño de la formación de nanopartículas. De esta manera, se busca generar conocimiento que contribuya a mejorar la

reproducibilidad del proceso y sentar bases para el futuro escalamiento de tecnologías de síntesis biogénica.

TEORÍA

Síntesis Biogénica de Nanopartículas Metálicas

Los métodos de síntesis biogénica de nanopartículas (NPs) se destacan entre los métodos de síntesis verde reportados porque utilizan compuestos naturales (i.e., microorganismos y plantas) para obtener biomoléculas (i.e., polifenoles, proteínas, aminoácidos y carbohidratos) utilizadas como agentes reductores, estabilizantes y recubrimientos para sintetizar nanopartículas (Kumari et al., 2021).

Dentro de la síntesis biogénica, esta se puede clasificar en dos: la síntesis basada en plantas y microorganismos. Para la síntesis basada en microorganismos, esta se puede dividir a su vez en dos: la intracelular y la extracelular, mientras que para la síntesis basada en plantas solo se puede realizar extracelularmente (Sanità et al., 2020). En la síntesis intracelular, se utiliza la pared celular para transportar iones metálicos, donde los iones con carga positiva interactúan con la pared de carga negativa y estos, a su vez, interactúan con las enzimas de las células que reducen estos iones a NPs metálicas. Por otra parte, la síntesis extracelular de nanopartículas utiliza las biomoléculas secretadas o extraídas del mismo organismo, las cuales poseen grupos funcionales que actúan para formar las NPs (Baig et al., 2021).

Síntesis Biogénica de Plantas

La síntesis biogénica a base de plantas utiliza extractos naturales de plantas (i.e., hojas, frutos, tallos, raíces, flores y semillas) o sustancias producidas por las plantas (i.e., látex), como agentes reductores, estabilizadores y recubrimientos, para la producción de nanopartículas. Estas se producen mediante la interacción de la sal metálica y los compuestos orgánicos presentes en el extracto (i.e., proteínas, aminoácidos, ácidos orgánicos, vitaminas y metabolitos secundarios), es decir, compuestos bioactivos (i.e., flavonoides, alcaloides, polifenoles, terpenoides, compuestos heterocíclicos y polisacáridos) (Paiva-Santos et al., 2021). Además, estos compuestos orgánicos ayudan a controlar y homogeneizar las características estructurales de estas, es decir, si son esféricas, lineales, cúbicas o amorfas, así como también su tamaño (i.e., 1 a 100 nm) sin necesidad de añadir polímeros sintéticos ni tensioactivos. Por lo tanto, los extractos de plantas pueden proporcionar un método más rentable para la síntesis de nanopartículas que a través de la vía dada por los microorganismos; esto se debe a que evita la contaminación de cultivos, procedimientos largos y velocidades de reacción lentas (Soni et al., 2021).

De los diversos métodos de síntesis biogénica para la producción de nanopartículas metálicas, el uso de extractos de plantas ha sido de gran interés para la comunidad científica, debido a que tienen una gran tolerancia a los metales (Husen & Siddiqi, 2014) y la capacidad de segregar grandes cantidades de azúcares reductores que reducen las sales metálicas a nanopartículas (Alsamhary, 2023). Asimismo, las vuelve biocompatibles (i.e., no tóxicas), estables, con mayor producción y menores costos (Antonio-Pérez et al., 2023).

Moringa oleifera

Entre las plantas más comunes para la síntesis biogénica de NPs, principalmente se han reportado plantas como *Moringa oleifera* (MO), *Allium sativum* (hierbabuena), *Camellia sinensis* (té verde) y *Azadirachta indica* (nim). Dentro de estas, la MO ha resaltado debido a que en sus hojas, raíces y vainas no maduras cuenta con una gran cantidad de polifenoles que interaccionan con las sales metálicas. Además, los extractos de MO contienen compuestos bioactivos, como flavonoides, polifenoles, proteínas y lignocelulósicos, que pueden actuar como agentes reductores y estabilizadores en la formación de nanopartículas (Cattan et al., 2022).

PARTE EXPERIMENTAL

Preparación del extracto de hoja y semilla de *Moringa oleífera*

Para preparar los extractos se se realizó mediante una solución de NaCl con una concentración de 7, 12.5, 15, 25 y 50 g L^{-1}, para posteriormente añadir la hoja de M. oleífera en concentraciones de 50 y 100 g L^{-1}. Se agitó a 30, 40, 50, 60, 70 y 80° C durante 1 hora. Una vez templado o terminada la agitación para cada uno de los extractos, los extractos fueron filtrados al vacío dos veces, una con un filtro de poro de 10 micras y otra con papel de filtro de 100 µm de poro.

Síntesis biogénica

Se preparó una solución 0.1 M de $CuSO_4*5H_2O$ y se añadió al extracto en una proporción volumétrica de 2:8 en vasos de precipitado de 50 mL. Las muestras se dejaron en agitación durante 24 h. Finalizado el tiempo, las muestras se secaron en cristalizadores a 80° C por 3 días o hasta estar secas por completo. Los materiales se clasificaron con el nombre del extracto utilizado más 0.1 (e.g., SIH 0.1 y IS 0.1).

Determinación de la concentración de flavonoides

Las muestras secas se mezclaron con metanol al 70% en una proporción de 1 mL por cada 50 mg. Las muestras se mantuvieron en agitación durante 24 h en la oscuridad a temperatura ambiente y una vez transcurrido el tiempo, se centrifugaron a 10,000 rpm durante 15 min y se recuperó el sobrenadante. Este proceso se repitió hasta obtener una solución clara sin partículas en suspensión. Para la cuantificación de flavonoides, se colocó en la placa 12.5 µL de la muestra con metanol, se añadieron 75 µL de $NaNO_2$ al 5% y se incubó durante 5 min a temperatura ambiente en ausencia de luz. Posteriormente, se añadieron 15 mL de $AlCl_3*6H_2O$ al 10% y se incubó de nuevo durante 5 min a temperatura ambiente, igualmente en ausencia de luz. Por último, se añadieron 50 mL de NaOH 1 M y 165 mL de H2O destilada estéril y se realizó la lectura de absorbancia a 510 nm. Al mismo tiempo, se leyó la curva de calibración preparada a partir de una solución madre de quercetina a 0.5 mg mL^{-1}. Los ensayos se realizaron con un total de 6 réplicas, 2 duplicados estadísticos y 3 triplicados biológicos.

Determinación de la concentración de polifenoles

Se añadieron 250 µL de metanol al 70% a las muestras secas en un tubo Eppendorff y se dejaron agitando en ausencia de luz durante 24 h. Se centrifugaron durante 15 min a 10,000 rpm y se separó el sobrenadante. Para medir la absorbancia, se añadieron 237 µL de agua destilada estéril, 45 µL de Na_2CO_3 al 15%, 3 µL de muestra con metanol y 15 µL de reactivo de Folin al 10%. Se incubó en ausencia de luz durante 5 min a temperatura ambiente y se leyeron las absorbancias a 760 nm. Del mismo modo, se llevó a cabo la lectura de la curva de calibración preparada a partir de una solución madre de ácido gálico a una concentración de 2 mg mL^{-1}.

Determinación de la concentración de proteínas

Las muestras secas se suspendieron mediante agitación en vórtex en 50 µL de agua destilada estéril. Posteriormente, se colocaron 10 µL de las muestras suspendidas en sus respectivos pocillos y se añadieron 200 µL de una solución de reactivo de Bradford preparada en una proporción volumétrica 1:4. Se incubaron en ausencia de luz durante 5 min a temperatura ambiente y se realizó la lectura de absorbancia a 595 nm. Además, se preparó una curva de calibración de una solución madre de BSA a 2 mg mL^{-1} y se realizó la lectura de absorbancia a la misma longitud de onda. Los ensayos se realizaron con un total de 6 réplicas, 2 duplicados estadísticos y 3 triplicados biológicos.

Determinación de la concentración de azúcar

Para la concentración total de azúcar, las muestras secas se pretrataron mezclándolas con etanol al 96% en una proporción de 1.5 mL por 100 mg y se incubaron a 4° C durante 15 min. A continuación, se añadieron a cada placa perforada 40 µL de la muestra pretratada, 100 µL de una solución de antrona y H2SO4 con una concentración de 2 mg/mL. La placa se incubó a 92°C durante 3 min a baño María y se dejó a temperatura ambiente durante 5 min. A continuación, se secó en un horno a 45° C durante 15 min. Por último, las muestras se midieron a una longitud de onda de 630 nm. La curva de calibración se realizó utilizando una solución madre de glucosa de 0.4 g L^{-1} y su lectura fue

llevada a cabo en la misma placa que el resto de las muestras. Los ensayos se realizaron con un total de 6 réplicas, 2 duplicados estadísticos y 3 triplicados biológicos.

Caracterización de las NPs Cu

Espectroscopia UV-visible

Se hizo la lectura de las absorbancias en el espectro UV-visible de las muestras de extracto de hoja y semilla de *Moringa oleifera* después del proceso de síntesis, así como del extracto puro; se examinó colocando 3 mL de las muestras en celdas de cuarzo para posteriormente escanear de 200 a 800 nm. Además, se realizó el mismo barrido de la solución de $CuSO_4*5H_2O$ a una concentración de 0.1 M.

Espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier (FT-IR ATR)

Se realizó un análisis por espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier de las muestras secas (extractos puros y extractos con nanopartículas), así como de la sal metálica que se utilizó como precursor, en un rango de 400 a 4000 cm^{-1}.

RESULTADOS

Cuantificación de biomoléculas

De los diversos extractos se realizó la caracterización de la concentración de proteínas, polifenoles, flavonoides y azúcares totales (Tabla 1). Como se muestra en la Tabla 1, el contenido de proteínas en los diferentes extractos tiene un valor por debajo del de las demás biomoléculas, siendo este menor al 0.1% de las biomoléculas cuantificadas. Esto puede ser debido al tiempo que se realiza la extracción; según Jung et al. (2018), la concentración de proteínas disminuye de 5 a 0.5 mg mL^{-1} al aumentar el tiempo de extracción (de 1 min a 120 min). Por eso no se obtuvo una cantidad significativa de esta biomolécula; en este trabajo se utilizaron 60 min, lo que indica una baja concentración de proteínas. Del mismo modo, la hoja de esta planta es conocida por su alto contenido en polifenoles, tal y como demostraron (Cattan et al., 2022) al comparar las concentraciones de polifenoles y flavonoides en las hojas y semillas de MO, y resultó que la hoja de MO presentaba las concentraciones más elevadas de estas biomoléculas.

Tabla 1. Concentración de biomoléculas (flavonoides, proteínas, azúcares y polifenoles) de los extractos de hoja de *Moringa oleífera*

Extracto	Temperatura (°C)	NaCl (g L^{-1})	MO (g L^{-1})	Polifenoles (mg mL^{-1})	Proteínas (mg mL^{-1})	Flavonoides (mg mL^{-1})	Azúcares reductores (mg mL^{-1})
SIH	80	50	100	2.4708	0.141	92.073	2.7952
Ext3	50	50	100	1.0566	0.99761	4.8872	1.7371
Ext17	40	12.5	50	0.3689	0.28466	1.0431	1.0514
Ext18	40	15	50	0.398	0.68633	1.6449	0.5153
Ext20	80	12.5	50	0.8867	0.05477	0.7014	0.8972
Ext22	30	7	100	1.0906	1.27411	1.8892	1.7679
Ext35	50	50	50	0.6035	0.78372	2.2308	0.8616
Ext47	70	12.5	50	0.0517	0.24372	1.1835	0.8308

Se realizó la caracterización de las nanopartículas de cobre mediante la espectroscopía UV-Vis (Figura 1), en la cual se observó un plasmón de resonancia arriba de los 600 nm, específicamente para las NPs con extracto SIH se obtuvo un pico alrededor de los 666 nm, la cual es la que tomamos como base para la síntesis de las demás NPs, la cual es comparable con lo realizado por (Alshamari et al., 2025), el cual obtuvo una señal alrededor de los 631 nm, atribuida a CuS. Por otro lado, con las NPs con extractos 3, 17, 18, 20, 22, 35 y 47 se identificaron señales en 675, 701, 703, 732, 740, 720 y 735 nm, respectivamente. De igual manera, estas señales se asemejan al trabajo realizado por (El-Hout et al., 2020), donde se muestran señales entre 675 y 700 nm correspondientes a NPs

de CuS. Esto nos indica la formación de las NPs debido al desplazamiento del plasmón en comparación con la sal precursora utilizada para realizar la síntesis.

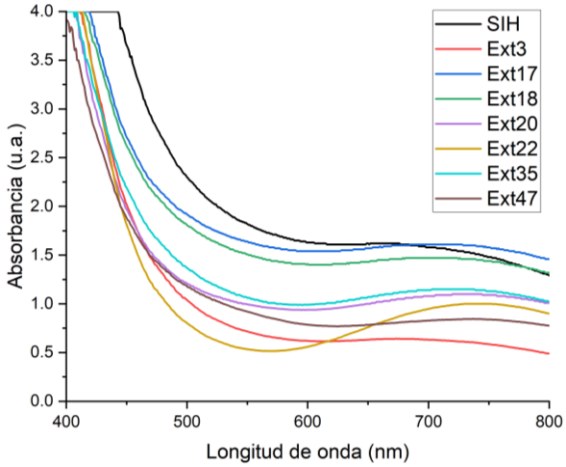


Figura 1. Gráficas de la espectroscopía UV-Visible de las NPs SIH, con extracto 3, 17, 18, 20, 22, 35 y 47

En la Figura 2 se muestra la caracterización por FT-IR ATR, en la cual se identificaron grupos funcionales en las NPs, como las señales de O-H (3300 cm^{-1}) que corresponden a agua en la muestra y azucares reductores, estiramientos de grupos C-H (2900 y 2800 cm^{-1}) que se asocian a grupos alifáticos de celulosa, hemicelulosa y lignina, de grupos C=C (1600 cm^{-1}) característica de los grupos acetilo y éster, grupos C-N (1400 cm^{-1}) atribuidos a grupos amino presentes en las proteínas, vibraciones de C-O (1230 cm^{-1}) y por último una señal relacionada con el estiramiento C-O y C-O-C (1050 cm^{-1}) enlaces etéricos presentes en la hemicelulosa y la lignina. Todas estas señales corresponden a biomoléculas presentes en el extracto, en específico, a polifenoles, proteínas y azúcares (Pasieczna-Patkowska et al., 2025). Al comparar el espectro de las NPs SIH con las demás NPs, no se muestran diferencias significativas, lo cual nos indica que se obtienen los mismos grupos funcionales sin importar la variación de temperatura, sal y hoja de *Moringa oleifera*.

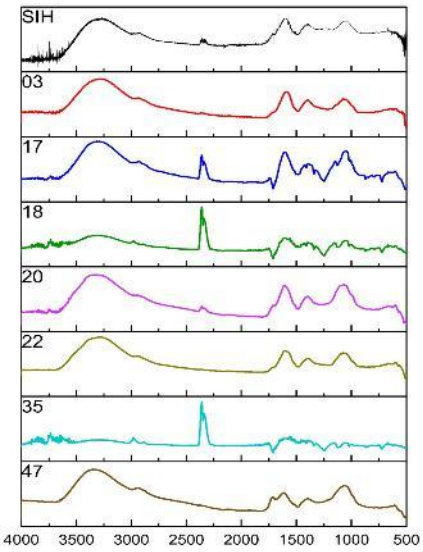


Figura 2. Gráficas de la espectroscopía FT-IR ATR de las NPs SIH, con extracto 3, 17, 18, 20, 22, 35 y 47

Las NPs 3 (Figura 3a) muestran morfologías cilíndricas o esféricas con un recubrimiento biológico, con tamaños <100 nm, y se encuentran dispersas; con las NPs 17 (Figura 3b) se obtuvieron morfologías cúbicas y rectangulares recubiertas y dispersas en una matriz orgánica, con tamaños

<50 nm. Para las NPs 18 (Figura 3c) se observan nanoestructuras esféricas, cilíndricas y amorfas, con tamaños dispersos <50 nm; de igual manera, se encuentran dispersas en una matriz orgánica, y las NPs 47 (Figura 3d) muestran morfologías amorfas con tamaños <20 nm y se encuentran aglomeradas en una matriz orgánica. Con esto, se puede decir que mediante diferentes variables (e.g., temperatura, sal y MO), se obtienen diferentes morfologías, tamaños, dispersión y recubrimiento biológico; esto se debe al tipo de extracción que se utiliza y a la importancia de las biomoléculas para su síntesis (Bhatnagar & Aoyagi, 2025).

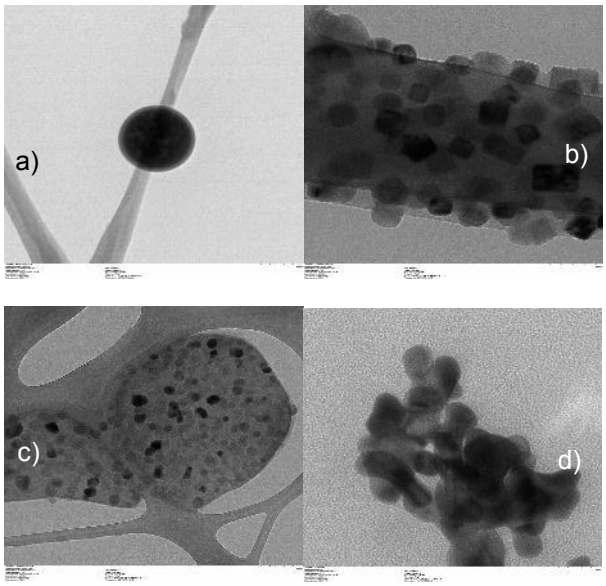


Figura 3. Gráficas de la espectroscopía FT-IR ATR de las NPs SIH, con extracto 3, 17, 18, 20, 22, 35 y 47

CONCLUSIONES

Los diferentes extractos de hoja de *Moringa oleifera* presentaron variaciones importantes en la concentración de polifenoles, flavonoides, proteínas y azúcares reductores, siendo los flavonoides y polifenoles las biomoléculas predominantes. Estas diferencias en la composición química influyeron en el proceso de síntesis biogénica de las nanopartículas de cobre, favoreciendo la formación de nanoestructuras con distintas características morfológicas. La espectroscopía UV-Visible confirmó la formación de nanopartículas mediante la aparición de bandas de absorción entre 666 y 740 nm, asociadas a nanopartículas de CuS, mientras que los análisis por FT-IR ATR evidenciaron la presencia de grupos funcionales provenientes de las biomoléculas del extracto vegetal, las cuales participaron tanto en la reducción de los precursores metálicos como en la estabilización de las nanopartículas sintetizadas. Asimismo, las imágenes de microscopía mostraron que las condiciones de extracción modificaron significativamente la morfología, tamaño, grado de dispersión y recubrimiento biológico de las nanopartículas obtenidas. En conjunto, estos resultados demuestran que la composición del extracto de *Moringa oleifera* y las condiciones de extracción constituyen factores clave para controlar las propiedades fisicoquímicas de las nanopartículas de cobre sintetizadas mediante una ruta biogénica.

BIBLIOGRAFÍA

1. Alsamhary, K. E. (2023). Moringa oleifera seed based green synthesis of copper nanoparticles: Characterization, environmental remediation and antimicrobial activity. Saudi Journal of Biological Sciences, 30(11). https://doi.org/10.1016/j.sjbs.2023.103820
2. Alshamari, Y. M. G., Alkhathlan, H. Z., Karuppiah, P., Khan, M., Danish, E. Y., Aqel, A., Adil, S. F., Shaik, M. R., & Khan, M. (2025). Structural analysis and antimicrobial assessment of bioinspired silver nanoparticles from Ferula communis. Scientific Reports. https://doi.org/10.1038/s41598-025-33436-2

3. Antonio-Pérez, A., Durán-Armenta, L. F., Pérez-Loredo, M. G., & Torres-Huerta, A. L. (2023). Biosynthesis of Copper Nanoparticles with Medicinal Plants Extracts: From Extraction Methods to Applications. In Micromachines (Vol. 14, Number 10). Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI). https://doi.org/10.3390/mi14101882
4. Baig, N., Kammakakam, I., & Falath, W. (2021). Nanomaterials: a review of synthesis methods, properties, recent progress, and challenges. Materials Advances, 2(6), 1821–1871. https://doi.org/10.1039/D0MA00807A
5. Bhatnagar, S., & Aoyagi, H. (2025). Current overview of the mechanistic pathways and influence of physicochemical parameters on the microbial synthesis and applications of metallic nanoparticles. Bioprocess and Biosystems Engineering, 48(11), 1779–1800. https://doi.org/10.1007/s00449-025-03190-w
6. Cattan, Y., Patil, D., Vaknin, Y., Rytwo, G., Lakemond, C., & Benjamin, O. (2022). Characterization of Moringa oleifera leaf and seed protein extract functionality in emulsion model system. Innovative Food Science and Emerging Technologies, 75. https://doi.org/10.1016/j.ifset.2021.102903
7. El-Hout, S. I., El-Sheikh, S. M., Gaber, A., Shawky, A., & Ahmed, A. I. (2020). Highly efficient sunlight-driven photocatalytic degradation of malachite green dye over reduced graphene oxide-supported CuS nanoparticles. Journal of Alloys and Compounds, 849. https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.156573
8. Husen, A., & Siddiqi, K. S. (2014). Phytosynthesis of nanoparticles: concept, controversy and application. Nanoscale Research Letters, 9(1), 229. https://doi.org/10.1186/1556-276X-9-229
9. Jung, Y., Jung, Y., Kwon, M., Kye, H., Abrha, Y. W., & Kang, J. W. (2018). Evaluation of Moringa oleifera seed extract by extraction time: Effect on coagulation efficiency and extract characteristic. Journal of Water and Health, 16(6), 904–913. https://doi.org/10.2166/wh.2018.078
10. Kumari, S. C., Dhand, V., & Padma, P. N. (2021). Green synthesis of metallic nanoparticles: a review. In Nanomaterials (pp. 259–281). Elsevier. https://doi.org/10.1016/B978-0-12-822401-4.00022-2
11. Medina-Ganem, L. F., Valencia-Espinoza, N., Ayoko, G. A., Bandala, E., Conejo-Davila, A. S., Vega-Rios, A., Goonetilleke, A., & Rodriguez-Narvaez, O. M. (2026). The Influence of Moringa oleifera Biomass and Extraction Methods on Biogenic Synthesis of Iron Nanoparticles for Inhibition of Microbial Pollutants. Sustainable Chemistry, 7(1), 4. https://doi.org/10.3390/suschem7010004
12. Paiva-Santos, A. C., Herdade, A. M., Guerra, C., Peixoto, D., Pereira-Silva, M., Zeinali, M., Mascarenhas-Melo, F., Paranhos, A., & Veiga, F. (2021). Plant-mediated green synthesis of metal-based nanoparticles for dermopharmaceutical and cosmetic applications. International Journal of Pharmaceutics, 597, 120311. https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2021.120311
13. Pasieczna-Patkowska, S., Cichy, M., & Flieger, J. (2025). Application of Fourier Transform Infrared (FTIR) Spectroscopy in Characterization of Green Synthesized Nanoparticles. In Molecules (Vol. 30, Number 3). Multidisciplinary Digital Publishing Institute (MDPI). https://doi.org/10.3390/molecules30030684
14. Sanità, G., Carrese, B., & Lamberti, A. (2020). Nanoparticle Surface Functionalization: How to Improve Biocompatibility and Cellular Internalization. Frontiers in Molecular Biosciences, 7. https://doi.org/10.3389/fmolb.2020.587012
15. Soni, V., Raizada, P., Singh, P., Cuong, H. N., S, R., Saini, A., Saini, R. V., Le, Q. Van, Nadda, A. K., Le, T.-T., & Nguyen, V.-H. (2021). Sustainable and green trends in using plant extracts for the synthesis of biogenic metal nanoparticles toward environmental and pharmaceutical advances: A review. Environmental Research, 202, 111622. https://doi.org/10.1016/j.envres.2021.111622

DISMINUCIÓN DE LA CONCENTRACIÓN DE COMPUESTOS FENÓLICOS EN VINAZA DE TEQUILA USADA COMO MEDIO DE CULTIVO PARA *Trichoderma Harzianum*

Ricardo Omar Fernández Henández[1], Alma Rosa Corrales Escobosa[2], Juan Manuel Peralta Hernández[3], Katarzina Dorora Wrobel[4], Kazimierz Wrobel Zasada[5], Armando Alcazar Magaña[6]

[1,2,3,4,5]Universidad de Guanajuato, [6]The University of British Columbia.
ro.fernandezhernandez@ugto.mx

RESUMEN

La vinaza tequilera (VT) es uno de los principales residuos generados durante el proceso de producción de tequila, su disposición y tratamiento representa un reto importante para la industria tequilera. Este efluente se caracteriza por presentar un pH ácido (3–4), color marrón oscuro y elevada carga de materia orgánica. Una de las principales prácticas para la gestión de este tipo de residuos es su uso en la fertiirrigación de campos, sin embargo, la disposición de la VT sin tratamiento previo ha sido relacionada con efectos ambientales severos como el deterioro del suelo por fitotoxicidad, disminución de porosidad y bloqueo de germinación por la presencia de compuestos fenólicos. Dicho lo anterior, se decidió evaluar la capacidad de *T. harzianum* para disminuir la concentración de compuestos fenólicos totales del medio al ser cultivada en VT a diferentes concentraciones (25, 50, 75 y 100 %), tanto en cultivos estáticos (CE) como en agitación (CA). Las muestras de VT fueron amablemente proporcionadas por “Tequilera Corralejo S.A.”, se realizaron alícuotas de 1 L, y se conservaron a –20 °C durante 6 meses. Para el experimento 1 L de VT fue filtrada utilizando filtros de fibra de vidrio (tamaño de poro de 1.2 µm). Las diferentes diluciones se prepararon utilizando agua milli-Q y posteriormente se esterilizaron a 120 ± 5 °C durante 15 min. Se transfirieron 50 mL a matraces Erlenmeyer estériles de 125 mL y se inocularon con una concentración inicial de 1×10^6 conidios de *T. harzianum* mL^{-1}. Cada tratamiento se realizó por duplicado y se incluyeron dos controles abióticos por cada uno. Los matraces se incubaron a 28 ± 2 °C durante 12 días y se tomaron muestras de 2 mL los días 0, 2, 3, 6, 8, 10 y 12 del experimento. Se midió el pH de las muestras y se determinó la concentración de compuestos fenólicos totales (CFT) y se midió la cantidad de biomasa obtenida al final cada uno de los tratamientos. La concentración de CFT se obtuvo mediante la reacción con el reactivo de Follin-Ciocalteu en medio básico, la cual produce una coloración azul medible a 760 nm. Se realizaron curvas de calibración empleando soluciones de concentración conocida de ácido gálico (5–50 mg L^{-1}), usando agua desionizada como blanco. Se observaron incrementos en el pH del medio para los cultivos en agitación (pH>7), no así para los cultivos estáticos, siendo más rápido este aumento en los medios con menor concentración de VT. En cuanto a la concentración de compuestos fenólicos se lograron valores máximos de remoción de hasta el 46 %, obteniendo los mejores resultados para la vinaza al 50 % en agitación. Por último, se encontró que la cantidad de biomasa obtenida incrementa proporcionalmente con la concentración de VT, siendo mayor la cantidad de biomasa obtenida en los cultivos con agitación para todas las concentraciones. Los resultados obtenidos respaldan el potencial uso de *T. harzianum* en el tratamiento y valorización de la VT, al permitir disminuir la concentración de CFT a la vez que produce biomasa utilizando este residuo como medio de cultivo.

INTRODUCCIÓN

Se conoce como vinaza tequilera (VT) al residuo líquido generado durante el proceso de destilación del tequila, el cual se caracteriza por poseer un pH ácido con valores entre 3 y 4, un color marrón oscuro, una alta carga de materia orgánica y sólidos suspendidos[1]. Se estima que por cada litro de tequilla producido se generan entre 10-12 L de VT, lo cual puede extrapolarse a una cantidad total anual aproximada de entre 2500-300 millones de litros por año[2]. En México, estos efluentes frecuentemente se disponen directamente en cuerpos acuáticos superficiales (ríos, arroyos, lagos, embalses), sistemas de alcantarillado municipales o se utilizan como enmienda del suelo o fertilizante sin un tratamiento adecuado[3,4]. Por medio de una encuesta realizada en el 2022 a micro, pequeños, medianos y grandes productores de tequila por Zurita y colaboradores el 28.6% de las

empresas participantes reconocieron no brindar ningún tratamiento a las vinazas generadas, mientras que el 52.4% solo enfrían y ajustan el pH a un valor alrededor de 7, y tan solo el 27.3% de las empresas aseguraron dar un tratamiento completo a sus efluentes, siendo las pequeñas y microempresas aquellas que normalmente no llevan a cabo ningún tratamiento, disponiendo normalmente de la VT, mediante fertiirrigación[5].

Diversos estudios han demostrado que la disposición de estos residuos sin previo tratamiento puede resultar altamente perjudicial para el ambiente. La VT es capaz de deteriorar la estructura del suelo al reducir su porosidad y generar la presencia de zonas anaeróbicas, modificando el perfil microbiológico del mismo[6]. Además, se ha reportado un aumento en la fitotoxicidad debido a la concentración de sustancias como el ácido acético, ácido láctico, glicerol y nitrógeno amoniacal, mientras que la presencia de compuestos fenólicos puede inhibir la capacidad de germinación de semillas[6]. En 2018, Rodríguez y colaboradores realizaron la identificación de 104 compuestos en diferentes muestras de VT, por medio de cromatografía de gases acoplada a espectrometría de masas (GC-MS) encontrando la presencia de 9 compuestos fenólicos, tales como, p-metilguayacol, 3-metilfenol, eugenol y 2,4-di-terc-butilfenol, entre otros[7]. Por otro lado, debido a su elevada concentración de materia orgánica y nutrientes, la VT puede favorecer la eutrofización de cuerpos acuáticos, afectando a los organismos que viven en ellos, demás, de que las alta temperatura y acidez crean un ambiente hostil para los seres vivos[8, 9]. Por último, se ha reportado que el color marrón y la turbidez de las vinazas pueden afectar la penetración de la luz, reduciendo la presencia de organismos fotosintéticos y por ende, la concentración de oxígeno disuelto[10]. Dicho lo anterior, el desarrollo e implementación de sistemas de tratamiento que permitan disminuir la carga contaminante y la toxicidad de los efluentes provenientes de la producción de tequila en nuestro país representa uno de los retos más importantes para esta industria.

En la actualidad, los modelos de bioeconomía circular pretenden integrar la recuperación biológica de recursos orgánicos y nutrientes a partir de los residuos provenientes de diversas industrias, priorizando la reutilización de los desechos y su revalorización para la obtención de subproductos con valor agregado. Los productos obtenidos pueden dividirse en material recuperado de alto valor (biomasa microbiológica, enzimas y metabolitos secundarios), material recuperado de bajo valor (compost y fertilizantes) y material recuperado para generación de energía (metano, hidrogeno, etanol, biodiesel y material combustible)[3]. En este sentido, la VT presenta un alto potencial para su reutilización mediante la aplicación en biotecnología, especialmente como medios nutritivos en fermentaciones con microorganismos, la obtención de metabolitos de interés y la generación de biomasa con alto valor para la producción de alimento para ganado y generación de biocombustibles[3, 12, 13]. En 2020, Cea Barcia y colaboradores utilizaron muestras de VT diluidas para la obtención de biomasa de levaduras y microalgas con interés en acuacultura, usando vinaza diluida (< 10 % v/v) y enriquecida con $(NH_4)_2SO_4$ como fuente de nitrógeno[14]. Díaz Vázquez y colaboradores estudiaron la factibilidad de emplear la vinaza de tequila como sustrato para el cultivo de levaduras de alto valor nutritivo con fines de uso como alimento en ganadería obteniendo resultados prometedores y disminuyendo a su vez, la demanda química de oxígeno (DQO) en un 33.3 ± 3.5 %, el contenido de nitrógeno en un 85.0 ± 8.7 % y la carga de fósforo en 54.1 ± 2.5 %[3]. Rodríguez Romero y colaboradores en 2020 evaluaron el uso de VT para la obtención de 2-feniletanol y 2-fenilacetato, mediante la fermentación con levaduras (*Wickerhamomyces anomalus*, *Candida glabrata*, *Candida utilis y Candida parapsilosis),* ambos compuestos aromáticos con importantes aplicaciones en la industria de alimentos, farmacéutica, tabacalera y cosmética, ya que proveen los aromas característicos a miel y rosas. Durante el experimento pudieron obtener concentraciones máximas de 2-fenilacetato de hasta 65 mg/L en cultivos con *C. glabrata* reduciendo a su vez la DQO de la muestra aproximadamente en un 50%[2].

Dicho lo anterior, si bien la VT presenta características interesantes para su reutilización por medio de biotecnología, la presencia de algunos compuestos como es el caso de los fenoles, pueden inhibir el crecimiento microbiano *T. harzianum* ha demostrado poder crecer en vinaza de caña de azúcar al 100 %, además de que en experimentos previos en nuestro laboratorio también lo ha hecho en vinaza tequilera al 100 % como medio de cultivo. Este hongo es considerado un agente de control biológico relevante que promueve el crecimiento de las plantas mediante el micoparasitismo de

fitopatógenos fúngicos. Además, *T. harzianum* estimula la elongación de raíces y tallos, la absorción de nutrientes y aumenta la resistencia al estrés[15, 16]. Por tales motivos, *T. harzianum* y especies afines se encuentran entre los principales biofertilizantes fúngicos formulados en un mercado global estimado en US$1660 millones para 2022[17]. Por este motivo se decidió evaluar el crecimiento de *T. harzianum* en VT al 25, 50, 75 y 100% y su efecto sobre la concentración de compuestos fenólicos durante un periodo de 12 días tanto en cultivos estáticos como en agitación. Es importante señalar que el método de Folin-Ciocalteu utilizado en este estudio mide la capacidad reductora total del medio, la cual puede ser aportada por fenoles, azúcares reductores, ácidos orgánicos y otros compuestos. Por ello, los resultados se interpretan como una estimación semicuantitativa de cambios en la reactividad química del medio, no como una cuantificación absoluta ni específica de fenoles. Estudios futuros deberán emplear técnicas cromatográficas con detectores selectivos y sensibles para identificar y monitorear concentraciones de fenoles individuales.

PARTE EXPERIMENTAL

Muestras

La muestra de VT utilizada para el experimento fue amablemente proporcionada por la Tequilera Corralejo S. A. de C. V. ubicada en el municipio de Pénjamo, Guanajuato. Se recolectaron 20 L del efluente en un bidón de polietileno, directamente de una tubería a la salida de las torres de destilación, por donde se vierte la vinaza a una serie de canaletas que permiten disminuir su temperatura mientras transportan el líquido a la zona de tratamiento. Una vez en el laboratorio se realizaron alícuotas de 1 L en bolsas de PET y se almacenaron a -20 °C hasta su uso.

Obtención de conidios

Se usó una cepa de *T. harzianum* previamente aislada e identificada en el laboratorio. Para la obtención de conidios, se sembró el hongo por estriado en placas de agar papa dextrosa y se incubo a 28 ± 2 °C durante 2 días, posteriormente se colocó la placa a temperatura ambiente y expuesta a la luz durante 3 días más para promover la aparición de conidios los cuales se poseen un color verde característico. Los conidios se recuperaron en condiciones de esterilidad, añadiendo 5 mL de agua estéril a la placa y raspando con un asa de vidrio, la suspensión se recuperó y se filtró para eliminar el micelio recuperando el filtrado en un tubo Falcon de 50 mL, el proceso se repitió nuevamente recolectando ambos filtrados en un mismo tubo, todo el material empleado fue esterilizado previamente. A continuación, la suspensión se centrifugó a 3000 x g durante 5 min, se eliminó el líquido y se realizaron dos lavados con 5 mL agua desionizada estéril repitiendo la centrifugación y eliminación del agua de lavado, por último, se resuspendieron los conidios con el agua restante en el tubo y se contaron usando una cámara de Neubauer.

Cultivo de T. harzianum

Para el experimento, se descongeló una alícuota a 4 °C y se filtró usando filtros de fibra de vidrio con tamaño de poro de 1.2 µm para eliminar sólidos suspendidos. Una vez filtrada la VT se realizaron diluciones con concentraciones de 25, 50 y 75 % usando agua desionizada para después esterilizarlas junto con una alícuota de VT al 100% en autoclave a 120 ± 5 °C durante 15 minutos. Para cada una de las 4 soluciones de VT previamente esterilizadas (25-100 %) se colocaron alícuotas de 50 mL en 8 matraces Erlenmeyer estériles de 125 mL, inoculando 4 de los matraces con una concentración inicial de 1×10^6 conidios mL^{-1} y dejando 4 sin inocular como control. Todos los matraces se incubaron a 28 ± 2 °C durante 12 días manteniendo 2 matraces inoculados con el hongo y 2 matraces control (seleccionados al azar) en condiciones estáticas mientras que los matraces restantes se agitaron a una velocidad constante de 100 rpm durante todo el experimento. Para cada uno de los matraces se tomaron muestras de 2 mL del medio en condiciones estériles los días 0, 2, 4, 6, 8, 10 y 12, las muestras se centrifugaron a 5000 × g durante 5 min y se recuperaron 1.5 mL del sobrenadante, se determinó el pH usando un medidor de pH digital YIERYI® YY-1030 y se almacenaron a -20 °C hasta su análisis.

Concentración de compuestos fenólicos totales

La determinación de CFT se realizó mediante el método de Folin-Ciocalteu, siguiendo un protocolo adaptado para placa de 96 pocillos[18]. Este ensayo se basa en la capacidad de los compuestos

fenólicos para reducir el reactivo de Folin-Ciocalteu en medio alcalino, generando un complejo coloreado azul cuya intensidad es proporcional a la concentración de fenoles presentes. Es necesario destacar que, aunque el reactivo de Folin-Ciocalteu es ampliamente utilizado para la determinación de compuestos fenólicos en muestra biológicas, este no es especifico ya puede presentar interferencias al ser reducido por compuestos como ácido ascórbico, azucares reductores, aminoácidos y proteínas, entre otros. Se añadieron 50 µL de la muestra en un pocillo y posteriormente se adicionaron 50 µL de reactivo de Folin-Ciocalteu (de Sigma Aldrich) previamente diluido 1:5 en agua desionizada, por último, se adicionaron 100 µL de NaOH 0.35 M y se dejó reaccionar la mezcla a temperatura ambiente durante 10 min para posteriormente medir su absorbancia a 760 nm, las muestras se analizaron por triplicado. La cuantificación de CFT se realizó mediante la ecuación de regresión lineal obtenida para una curva de calibración de 6 puntos utilizando soluciones de concentración conocida de ácido gálico (AG) en un rango de 5-50 mg L^{-1} y agua desionizada como blanco. En caso de ser necesario, se realizaron diluciones de las muestras con agua desionizada para que los valores de absorbancia obtenidos se encontraran dentro del intervalo de calibración.

Medición de biomasa

Se evaluó de igual manera la cantidad de biomasa fúngica obtenida en cada uno de los tratamientos realizados, para lo cual se recuperó la totalidad del contenido de los matraces al día 12 en un tubo Falcon de 50 mL previamente pesado, se centrifugo el contenido a 3000 x g durante 5 min y se descartó el sobrenadante teniendo cuidado de no perder el hongo, posteriormente se realizaron dos lavados empleando 20 mL de agua desionizada, se eliminó la mayor cantidad de líquido posible y se llevaron los tubos a congelar a -20 °C durante 24 h, para finalmente liofilizar y pesar nuevamente los tubos para calcular la biomasa por diferencia.

Análisis estadístico

El análisis estadístico se realizó utilizando el software Minitab® 19, diferencias significativas entre tratamientos fueron evaluadas mediante pruebas ANOVA y la prueba post-hoc de Tukey, ambos con un α=0.05.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La NOM-001-SEMARNAT-2021 establece los límites permisibles de valores de pH entre 6-9 para las descargas de aguas residuales en cuerpos receptores propiedad de la nación[19]. Como fue mencionado anteriormente, la VT se caracteriza por poseer un pH ácido con valores entre 3-4, lo cual se puede atribuir principalmente a la presencia de ácidos orgánicos procedentes del proceso de fabricación del tequila. Por otro lado, la variación de pH en el medio de cultivo puede ser tomado como un indicador de la actividad metabólica de hongo sobre la VT. Dicho lo anterior, en la Figura 1 se presenta la variación de pH en el medio de cultivo para las 4 concentraciones de VT empleadas durante el experimento, tanto en cultivos estáticos como en agitación. Mientras que el valor de pH en los tratamientos control, tanto estático como en agitación, se mantiene estable alrededor del valor inicial promedio de 3.7 ± 0.1 se observó un incremento para todos los medios inoculados con *T. harzianum* en cultivo con agitación desde el día 2 del experimento, no así para los cultivos estáticos. El aumento de pH en los cultivos en VT al 25, 50 y 75 % con agitación se estabilizó entre los días 6 y 8 del experimento alcanzando valores de 7.6 ± 0.1, 7.8 ± 0.1 y 7.9 ± 0.1 respectivamente, mientras que para la VT al 100 % el pH permaneció estable entre los días 2 y 10 del experimento con un incremento al día 12, alcanzando un valor de 4.4 ± 0.1, cabe destacar que en el caso de la VT al 75 % se observó que el pH se mantiene estable entre los días 2 y 4 del experimento con un valor de 4.4 ± 0.1, muy parecido al observado para VT al 100 %. En el caso de los cultivos estáticos de *T. harzianum* no se observó un incremento de pH para la VT al 50, 75 y 100 %, por otro lado, el cultivo en VT al 25 % mostró un incremento alrededor del día 8 alcanzando valores de pH de 4.2 ± 0.2. Estos resultados sugieren que la agitación favorece una mayor actividad metabólica aerobia, promoviendo la degradación de compuestos acidificantes presentes en la vinaza por parte del hongo. Sin embargo, debido a que no se cuantificaron ácidos orgánicos específicos ni los metabolitos generados durante el proceso, no es posible establecer con certeza el mecanismo responsable de

este comportamiento. Así mismo, las diferencias de tiempo en el aumento de pH según la concentración de vinaza (más rápida a menor dilución) podrían reflejar diferencias en la disponibilidad de sustratos, pero también podrían deberse a propiedades fisicoquímicas de la matriz (capacidad amortiguadora, osmolaridad, presencia de inhibidores).

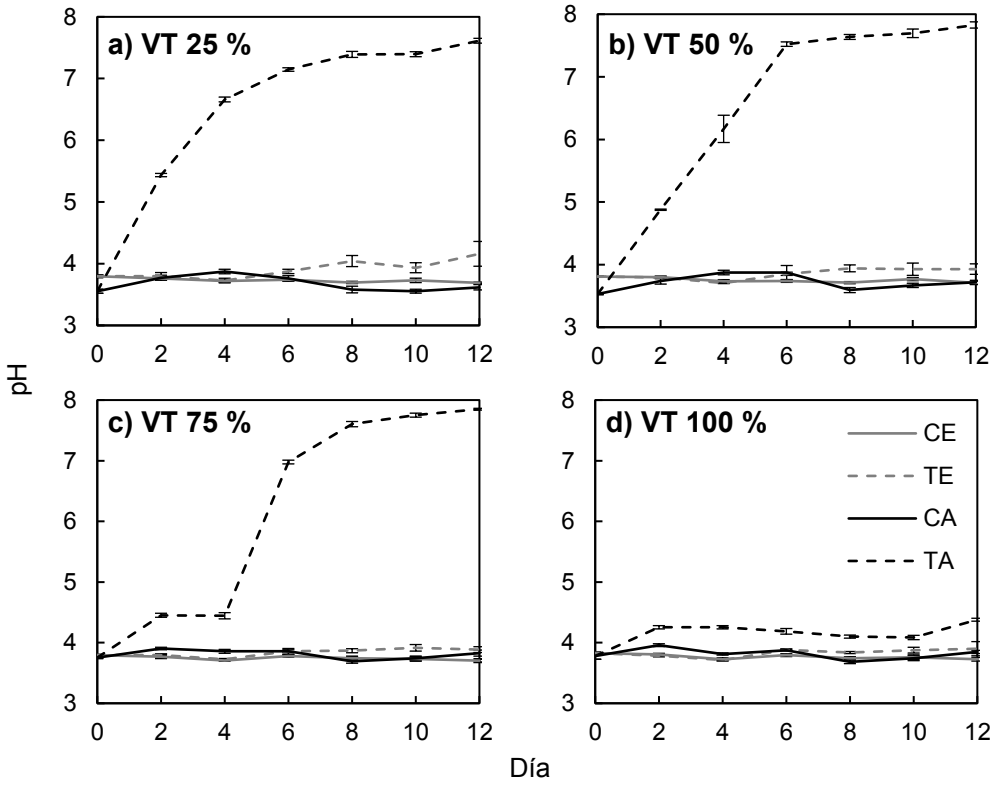


Figura 1. Variación de pH en VT con respecto al tiempo de cultivo de *T. harzianum*. **CE**: control estático; **CA**: control con agitación 100 rpm; **TE**: cultivo estático de *T. harzianum*; **TA**: cultivo en agitación a 100 rpm de *T. harzianum.* Valor medio de pH ± Desviación estándar.

La cuantificación de CFT se realizó mediante el método de Folin-Ciocalteu, usando ácido gálico como patrón de referencia. Como ha sido mencionado previamente, este método mide la capacidad reductora total del medio. Por lo tanto, los valores reportados en equivalentes de ácido gálico (g EAG L^{-1}) incluyen la contribución de fenoles totales, pero también de otras sustancias reductoras presentes en la vinaza (azúcares, ácidos orgánicos, etc.).

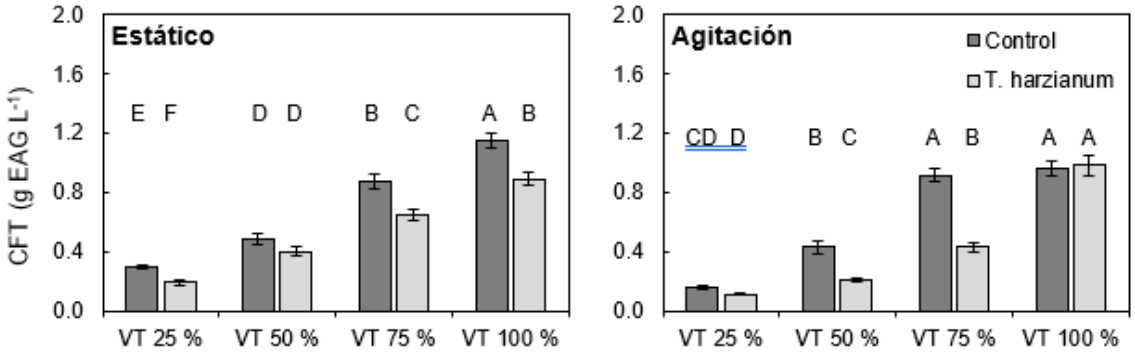


Figura 2. Comparación de la concentración de compuestos fenólicos (CFT) en VT con tratamiento control y con cultivo de *T. harzianum* en estático y agitación al día 12 del experimento. Valor medio

de concentración de CFT ± Desviación estándar. Las medias que no presentan letras iguales son estadísticamente diferentes, prueba de Tukey α=0.05

En la Figura 2 se muestra la comparación entre las concentraciones de CFT (valor absoluto en equivalentes de ácido gálico) calculadas al día 12 del experimento, para los cultivos de *T. harzianum* y los tratamientos control con y sin agitación. En los tratamientos estáticos se observaron diferencias significativas entre los cultivos de *T. harzianum* y los controles para todas las concentraciones de VT, excepto para el 50 % (prueba de Tukey, α=0.05). En cuanto a los experimentos en agitación, lo cultivos de *T. harzianum* al 25, 50 y 75 % presentaron diferencias estadísticas con respecto a su tratamiento control (prueba de Tukey, α=0.05), pero no para VT al 100 %.

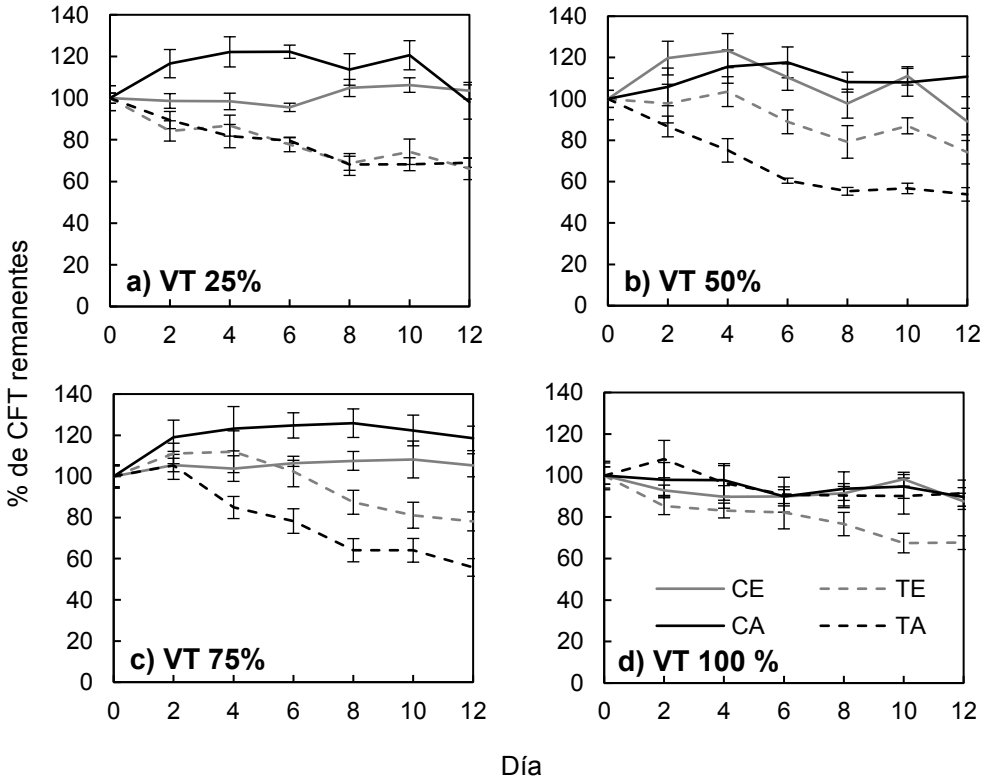


Figura 3. Variación de concentración de compuestos fenólicos totales VT expresado en % remanente con respecto al tiempo de cultivo de *T. harzianum*. **CE**: control estático; **CA**: control con agitación 100 rpm; **TE**: cultivo estático de *T. harzianum*; **TA**: cultivo en agitación a 100 rpm de *T. harzianum.* Porcentaje calculado con respecto al valor medio obtenido en el día 0; Valor medio de % ± Desviación estándar.

La Figura 3 presenta la cinética de diminución de CFT para los cultivos de *T. harzianum* en diferentes concentraciones de VT. En los tratamientos control se observó un aumento al día 2 del experimento para los tratamientos en agitación en VT al 25, 75 y 50 % y estático al 50 %, mientras que en los demás tratamientos estos los valores parecen mantenerse estables. Por otro lado, para los cultivos de *T. harzianum* tanto estáticos como en agitación se observaron disminuciones respecto al día 0. El incremento observado en los controles podría deberse a que el reactivo de Folin-Ciocalteu también reacciona con otras sustancias reductoras presentes en la vinaza, además de los compuestos fenólicos. Por otro lado, para VT al 25 % ambos cultivos (en agitación y estático) presentaron porcentajes de remoción máximos de 32 y 34 % respectivamente. En la VT al 50 y 75 % se observó un mayor porcentaje de disminución para los cultivos en agitación (46 y 34 %) con respecto a los cultivos estáticos (26 y 22 %); en todos estos experimentos después del día 8 los valores se mantuvieron estables. Por el contrario, para VT al 100 % el mayor porcentaje de disminución se logró en el cultivó estático (33 %), logrando solo un 10 % de disminución en el cultivo con agitación.

Por último, en la Figura 4 se presenta la cantidad de biomasa obtenida al día 12 del experimento. La cantidad de biomasa incremento paulatinamente con el aumento de la concentración de VT, con mejores resultados para VT al 75 % en agitación y VT al 100 % en agitación y estático, con una cantidad máxima de biomasa de 255 ± 5 mg (prueba de Tukey α=0.05). La prueba de Tukey (α=0.05) no mostró diferencias significativas entre los cultivos estáticos y en agitación para las concentraciones de VT de 25, 50 y 100. Estos resultados avalan a la VT como medio de cultivo para el crecimiento de *T. harzianum*.

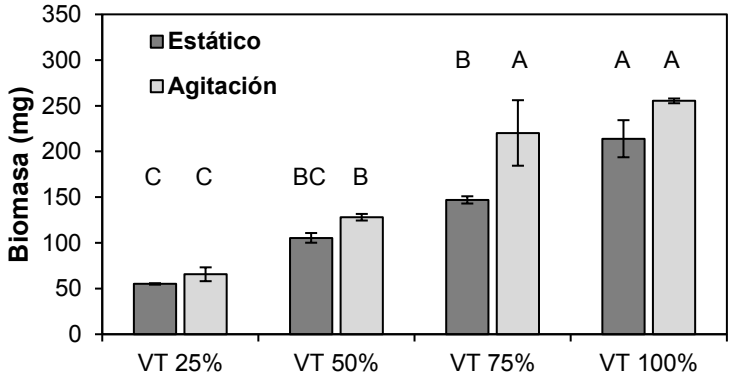


Figura 4. Comparación de la cantidad de biomasa fúngica obtenida utilizando VT en diferentes concentraciones como medio de cultivo. Valor medio de Biomasa ± Desviación estándar. Las medias que no presentan letras iguales son estadísticamente diferentes, prueba de Tukey α=0.05

Estos resultados, en conjunto con el aumento de pH y la disminución de CFT, así como con las diferencias observadas entre los cultivos estáticos y con agitación, permiten concluir que la presencia de CFT en la VT no inhibe el crecimiento de T. harzianum en ninguna de las concentraciones evaluadas.

CONCLUSIONES

T. harzianum causó un aumento el pH de la vinaza tequilera en cultivos con agitación, pasando de 3.7 a valores entre 7.6 y 7.9 en diluciones de 25, 50 y 75 %, mientras que en vinaza al 100 % el pH solo alcanzó 4.4. En cultivos estáticos no se observaron aumentos significativos de pH. Al mismo tiempo, en presencia de *T. harzianum* la concentración de CFT (medida por Folin-Ciocalteu en equivalentes de ácido gálico) disminuyó en todas las condiciones evaluadas. Se observó disminución de la capacidad reductora total (medida por Folin-Ciocalteu) en todos los cultivos con T. harzianum. En las diluciones al 25, 50 y 75 % con agitación, la disminución se estabilizó al día 8, coincidiendo con el momento en que el pH alcanzó valores cercanos a 8. En los cultivos estáticos, se observó disminución de la capacidad reductora sin aumento del pH. Los mayores porcentajes de remoción se obtuvieron en los cultivos con agitación al 50 y 75 % de vinaza, alcanzando valores de 46 y 34 %, respectivamente. Para la vinaza al 25 %, los porcentajes de remoción fueron similares en cultivo estático (34 %) y con agitación (32 %). Por el contrario, en la vinaza al 100 %, el cultivo estático presentó una mayor remoción de compuestos fenólicos (33 %) que el cultivo con agitación (10 %).
Así mismo, *T. harzianum* fue capaz de crecer en todas las concentraciones de vinaza tequilera evaluadas (25, 50, 75 y 100 %), observándose que la presencia de compuestos fenólicos no inhibió su desarrollo bajo las condiciones estudiadas. Así mismo, se observó aumentó en la biomasa conforme se incrementó la concentración de vinaza, alcanzando valores máximos de 255 ± 5 mg con 100 % de vinaza en los tratamientos estáticos y en agitación.

BIBLIOGRAFÍA

1. Ferral Pérez, H., Torres Bustillos, L. G., Méndez, H., Rodríguez Santillán, J. L., & Chairez, I. (2016). Sequential treatment of tequila industry vinasses by biopolymer-based coagulation/flocculation and catalytic ozonation. Ozone: Science & Engineering, 38(4), 279–290.
2. Rodríguez-Romero, J. d., Aceves-Lara, C. A., Silva, C. F., Gschaedler, A., Amaya-Delgado, L., & Arrizon, J. (2020). 2-Phenylethanol and 2-phenylethylacetate production by nonconventional yeasts using tequila vinasses as a substrate. Biotechnology Reports, 25, e00420.
3. Díaz Vázquez, D., Orozco Nunnelly, D. A., Yebra Montes, C., Senés Guerrero, C., & Gradilla Hernández, M. S. (2022). Using yeast cultures to valorize tequila vinasse waste: An example of a circular bioeconomy approach in the agro-industrial sector. Biomass and Bioenergy, 161, 106471.
4. López López, A., Vazquez, G., Davila Becerril, E., León García, E., & Villegas Valdez, J. (2010). Tequila vinasses: generation and full-scale treatment processes. Reviews in Environmental Science and Bio/Technology, 9(2), 109–116.
5. Zurita, F., Tejeda, A., Montoya, A., Carrillo, R., Sulbarán-Rangel, B., & Álvarez, C. (2022). Generation of tequila vinasses, characterization, current disposal practices and study cases of disposal methods. Water, 14(9), 1395.
6. Guerrero, G., & Vidal, A. (2014). Producción de biogás a partir de bagazo y vinaza del Agave angustifolia Haw generada como residuo en la elaboración del mezcal.
7. Rodríguez Félix, E., Contreras Ramos, S. M., Davila Vazquez, G., Rodríguez Campos, J., & Marino Marmolejo, E. N. (2018). Identification and quantification of volatile compounds found in vinasses from two different processes of tequila production. Energies, 11(3), 490.
8. Pruneda, R., & Luis, J. (2014). Biorremediación de vinazas de la industria tequilera y mezcalera mediante tratamiento fisicoquímico y biológico.
9. Robles González, V., Poggi Varaldo, H. M., Galíndez Mayer, J., & Ruiz Ordaz, N. (2018). Combined Treatment of Mezcal Vinasses by Ozonation and Activated Sludge. Water Environment Research, 90(11), 1985–1996.
10. Díaz Barajas, S., Moreno Andrade, I., & Garzón Zúñiga, M. (2024). Tratamiento de vinazas de mezcal: revisión de procesos evaluados. Tecnología y Ciencias del Agua, 15(2), 164–206.
11. Tejeda, A., Montoya, A., Sulbarán Rangel, B., & Zurita, F. (2023). Possible Pollution of Surface Water Bodies with Tequila Vinasses. Water, 15(21), 3773.
12. García Depraect, O., Muñoz, R., van Lier, J. B., Rene, E. R., Diaz Cruces, V. F., & León Becerril, E. (2020). Three-stage process for tequila vinasse valorization through sequential lactate, biohydrogen and methane production. Bioresource Technology, 307, 123160.
13. Martínez Castillo, L. M., Bustos Vázquez, M. G., Trujillo-Ramírez, D., Castillejos, G. R., & Castillo-Ruiz, O. (2023). Caracterización de vinazas de la industria tequilera para su uso como medios nutritivos económicos en fermentaciones con bacterias lácticas. Investigación y Desarrollo en Ciencia y Tecnología de Alimentos, 8(1), 795–801.
14. Barcia, G. E., Cervantes, R. A., Zuñiga, I. T., & Van Den Hende, S. (2020). Converting tequila vinasse diluted with tequila process water into microalgae-yeast flocs and dischargeable effluent. Bioresource Technology, 300, 122644.
15. Geng, Y., Chen, S., Lv, P., Li, Y., Li, J., Jiang, F., et al. (2025). Positive Role of Trichoderma harzianum in Increasing Plant Tolerance to Abiotic Stresses: A Review. Antioxidants, 14(7), 807.
16. Pani, S., Kumar, A., & Sharma, A. (2021). Trichoderma harzianum: an overview. Bulletin of Environmental Pharmacology and Life Sciences, 10(6), 32–39.
17. Aloo, B. N., Makumba, B. A., & Mbega, E. R. (2021). Status of biofertilizer research, commercialization, and practical applications: A global perspective. En A. Rakshit, S. Meena, V. Parihar, H. Singh, & A. Singh (Eds.), Biofertilizers (pp. 191–208)
18. Magalhaes, L. M., Santos, F., Segundo, M. A., Reis, S., & Lima, J. L. (2010). Rapid microplate high-throughput methodology for assessment of Folin-Ciocalteu reducing capacity. Talanta, 83(2), 441–447.
19. SEMARNAT. (2021). NOM-001-SEMARNAT-2021, Que establece los límites permisibles de contaminantes en las descargas de aguas residuales en cuerpos receptores propiedad de la nación.

ASOCIACIÓN DE LA VARIANTE RS1800470 DEL GEN TGFB1 CON SÍNDROME METABÓLICO EN ADOLESCENTES DEL OCCIDENTE DE MÉXICO

Karla del Rosario Contreras Flores[1], Diego Ortega Pacheco[2], Mariana Lizeth Carrillo Hernández[3] Cynthia Areli Temblador Dominguez[4], África Samantha Roa Reynoso[5], Teresa Arcelia García Cobián[6], Gabriela Camargo Hernández[7], Leonardo Hernández Hernández[8], Roberto Carlos Rosales Gómez[9], Susan Andrea Gutiérrez Rubio[10]

[1]Ciencias exactas e ingeniería; universidad de Guadalajara, [2]Universidad de Guadalajara Centro Universitario de Ciencias de la Salud, [3]Centro Universitario de Tonalá
karla.contreras5803@alumnos.udg.mx,

INTRODUCCIÓN

Las enfermedades metabólicas (obesidad, dislipidemias y síndrome metabólico) son el principal problema de salud en países como México, donde el síndrome metabólico (SM) afecta alarmantemente hasta el 40% de la población. Aunque la ciencia avanza, los factores de riesgo como el sedentarismo, malos hábitos de higiene del sueño, así como el consumo de alimentos con alto contenido energético siguen elevando la incidencia en adultos mayores de 40 años y, de forma preocupante, en niños y adolescentes de 6 a 16 años, y a esto se suman factores genéticos y epigenéticos. Por ello, mejorar su comprensión de las enfermedades metabólicas en el grupo etario de la niñez y adolescencia se requiere como una prioridad.

El SM, que desemboca en afecciones cardíacas, diabetes tipo 2 y accidentes cerebrovasculares, se debe a causas modificables (dieta, sedentarismo, falta de descanso) y no modificables (edad y genética). Fisiopatológicamente, el sistema inmune desempeña un rol clave mediante citocinas como el Factor de Crecimiento Tumoral Beta. Se ha demostrado que variantes en su gen codificador (*TGFB1*), específicamente la variante **rs1800470 (T29C)**, alteran la expresión génica; esto impide el funcionamiento correcto de la citocina y provoca periodos de inflamación crónicos estrechamente asociados al desarrollo del síndrome metabólico.

TEORÍA

El Síndrome Metabólico (SM) es un desorden clínico complejo caracterizado por la presencia simultánea de múltiples afecciones crónicas: obesidad central, triglicéridos elevados, dislipidemia aterogénica, hiperglucemia e hipertensión arterial. Este cuadro se acompaña de un estado proinflamatorio crónico que multiplica entre 2 y 3 veces el riesgo de desarrollar diabetes tipo 2, enfermedad cardiovascular (ECV) y enfermedad renal crónica (ERC), elevando la mortalidad general en un 60%. (1,2)
El aumento alarmante de casos responde a un desajuste evolutivo: nuestra genética, diseñada históricamente para el ahorro de energía, se enfrenta hoy a un medio ambiente "tóxico" urbano. Este entorno está marcado por una alimentación excesiva rica en grasas y un sedentarismo extremo derivado del desarrollo tecnológico y el transporte motorizado. (3,4)

Ante este panorama, los adolescentes se han convertido en un grupo prioritario para la salud pública. En esta etapa se consolidan los hábitos de vida y comportamientos que persistirán en la adultez, dictando su salud futura. Por ello, investigaciones como el estudio de Ferranti (2023) se han enfocado en establecer criterios específicos para diagnosticar el SM en poblaciones pediátricas y jóvenes de 12 a 19 años, mostrados en la **tabla 1**. (5)

Tabla 1. Definiciones pediátricas y adultas propuestas de SM (5)

Criterios	Adultos	Percentiles	Pediátricos
Hipertrigliceridemia	>1.65 mmol/L	Hombre 75 Mujer 85	>1.1 mmol/L
HDL bajo	Hombre: <1.04 mmol/L Mujer: <1.3 mmol/L	40	HDL <1.3 mmol/L (niños entre 15–19 años, <1.17 mmol/L)
Glucosa alta	6.1 mmol/L	NA	>6.1 mmol/
Obesidad central (circunferencia de cintura)	Hombre: >102 cm Mujer: >88 cm	Hombre 72 Mujer 53	>75 percentil por género y edad
Hipertensión	<130/<80 mmHg	NA	>90 percentil por género y edad

A nivel global, la prevalencia del SM en adultos oscila entre el 20% y el 40%. Sin embargo, en México las cifras son notablemente superiores: en 2006, la prevalencia en adultos mayores de 20 años alcanzó rangos alarmantes de entre 36.8% y 49.8%, dependiendo de los criterios diagnósticos utilizados (ATP III o FID). En contraste, un estudio de la UNAM en 2017 estimó que la prevalencia en niños y adolescentes de América Latina (incluyendo a México, Argentina y Colombia) era menor al 6.0%. (6,7)

A pesar de esa baja estimación regional, datos locales más recientes revelan una realidad mucho más grave en jóvenes mexicanos. Un estudio de 2023 en Veracruz (población de 6 a 16 años) reportó una prevalencia general del 33% en menores, más del 40% en niños en edad escolar (6 a 12 años) y un alarmante 54.6% de prevalencia en niños que ya presentan obesidad. Esto demuestra que, aunque históricamente se consideraba una afección de adultos, el SM se está disparando de forma crítica en las infancias mexicanas. (9)

Los principales componentes del SM son:

- **Hipertensión Arterial (HTA):** Es secundaria a la resistencia a la insulina, la cual promueve la retención renal de sodio y expande el volumen plasmático. Se define con cifras > 140/90 mmHg en adultos y adolescentes, mientras que en niños (6-13 años) se diagnostica con valores por debajo del percentil 90 (rango general de 90-115/60-80). (10-11)
- **Dislipidemia Aterogénica:** Se caracteriza por triglicéridos elevados, HDL ("colesterol bueno") bajo y niveles de LDL normonumerales, pero con partículas más pequeñas y densas, lo que incrementa agresivamente el riesgo cardiovascular. (10-11)
- **Obesidad central:** Causada por un balance energético positivo. Al rebasar el límite de adaptación saludable (hiperplasia), el tejido adiposo sufre hipertrofia e inflamación, secretando adipocitoquinas dañinas (leptina, resistina, TNF-A).(10-11)
- **Resistencia a la insulina (IR):** Es la incapacidad celular para aprovechar la glucosa ante niveles normales de insulina. Está determinada por la grasa intraabdominal (epiplóica), la cual es metabólicamente más activa, más lipolítica y menos sensible al efecto antilipolítico de la insulina que la grasa subcutánea.(10-11)
- **Alteraciones Protrombóticas:** Existe un estado hipercoagulable debido al aumento del PAI-1 (marcador de infarto que frena la fibrinólisis), fibrinógeno, factores VIII, von Willebrand y un exceso de micropartículas que amplifican la respuesta trombótica.(10-11)
- **Marcadores Inflamatorios:** La proteína C reactiva (PCR**)** actúa como un indicador de inflamación subclínica correlacionado con el daño endotelial. La PCR deteriora la

vasorreactividad al disminuir la producción de óxido nítrico (NO), favoreciendo la progresión de la aterosclerosis.(10-11)

Por otro lado, el Factor de Crecimiento Transformante Beta (TGF-β) es una citocina pleiotrópica (con múltiples efectos) con potentes funciones antiinflamatorias e inmunosupresoras. Es fundamental para regular la apoptosis, la angiogénesis, la cicatrización, la inmunidad y la biología tumoral. Aunque existen tres isoformas, el **TGFβ1** es la principal variante en el plasma y es producida por células inmunitarias, endoteliales, macrófagos, plaquetas y células musculares lisas vasculares (VSMC). El TGFβ1 ejerce un control regulador directo sobre las células endoteliales, las VSMC y la matriz extracelular de la pared de los vasos sanguíneos. La hipercolesterolemia (colesterol alto) inhibe la expresión de esta citocina en las células endoteliales, lo que acelera la formación de lesiones ateroscleróticas. (12)

El gen *TGFβ1* se encuentra en el cromosoma 19q13.2, contiene siete exones, y codifica la proteína precursora de TGFβ1 con 390 aminoácidos. El precursor consiste en un péptido señal, la subunidad reguladora del péptido asociado a la latencia (LAP) y la subunidad activa del TGFβ1 maduro en el C-terminal, y se expresa altamente en los huesos y la matriz ósea. (13)

Se ha demostrado que algunas variantes del gen *TGFβ1* pueden afectar su expresión y síntesis proteica. Las variantes genéticas se forman como resultado de una mutación. El tipo más común de variante genética en humanos es el cambio de un solo nucleótido, también conocido como SNV. Cada SNV es una alteración de la secuencia de ADN de un nucleótido. La variante genética también puede producirse como resultado de la adición o eliminación de la secuencia de ADN de un nucleótido. La mayoría de las variantes son benignas y no alteran la función ni la expresión génica, pero una variante polimórfica de un gen puede provocar la expresión o producción anormal de una forma anormal de la proteína. (14)

La variante rs1800470 de c.29C>T (p. Pro10Leu) es un cambio de prolina por leucina en el codón 10 de la proteína TGFβ1. Es una variante de sentido equivocado localizada en la secuencia codificante del gen *TGF-β1* y que provoca alteraciones en la secuencia de aminoácidos y la secreción de TGF-β1 por las células. Se sabe que el alelo A de esta variante está asociado con niveles elevados de TGFβ1 en sangre periférica. Según los datos del Proyecto 1000 Genomas, las frecuencias alélicas de c.+29C y c.+29T son 0,4547 y 0,5453 en el gen *TGFβ1,* respectivamente. El SNP de rs1800470 se encuentra en la región del péptido señal, que influye en la secreción de *TGFβ1* (15, 16)

El genotipo rs1800470 se ha asociado previamente con el riesgo de desarrollar enfermedad cardiovascular, incluyendo infarto cerebral, isquemia miocárdica silenciosa en pacientes con Diabetes tipo 2 (DT2) y complicaciones de cetoacidosis diabética (CAD). Se han llegado a conclusiones interesantes a partir de observaciones de la población Han en China. Yang et al. sugirieron que el género puede influir en el papel de TGFβ en CAD y la variante rs1800470 de *TGFβ1* se asoció con la gravedad de CAD. En una población mexicana, la variante rs1800470 se asoció con el riesgo de desarrollar reestenosis después del implante de stent coronario. (17, 19)

Algunos estudios han sugerido que la variante T29C (rs1800470) puede estar relacionada con la resistencia a la insulina, un factor clave para el síndrome metabólico. Por ejemplo, el estudio realizado en Ciudad de México en 2017 por la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza demostró que los portadores de la variante tenían modificaciones en la expresión de *TGF-β1* y además se observó que esto favorecía eventos intracelulares que suprimen la expresión de otros genes, como el de insulina. Además, se ha documentado que *TGF-β1* suprime factores que promueven la función óptima de las células β-pancreáticas, lo que lo hace un factor de riesgo de padecer DT2. En el estudio se demostró con una distribución equitativa de la muestra siendo de 22 individuos por genotipo (CC, CT, TT) que el alelo T actúa de forma dominante, pues basta una sola copia para modificar la expresión de *TGFB1* (21).

Otros estudios han encontrado una asociación entre la variante T29C y otros componentes del síndrome metabólico, como la HTA y la baja concentración de HDL-colesterol. Siendo en un estudio realizado en los Ángeles, Estados Unidos, se calcularon las frecuencias alélicas de SNPs en cuatro poblaciones: la población de ascendencia mexicana en Los Ángeles (AMA), cuyos datos se utilizaron para representar a la población mexicana, la población latina mestiza americana (Latina), la población europea no finlandesa (ENF) y la población africana-afroamericana (Africana), en la cual la variable T29C, el alelo A el de alto riesgo con una frecuencia alélica de 0.547 en AMA, 0.4770 Latina, 0.6061 en ENF y 0.5769 en Africana demuestran que está asociada con la (HTA) (20, 21).

PARTE EXPERIMENTAL

Objetivos:

General

Evaluar la asociación de la variante rs1800470 del gen TGB1 con síndrome metabólico en adolescentes del Occidente de México.

Objetivos específicos

1. Determinar las frecuencias alélicas y genotípicas de rs1800470 en la población de estudio (adolescentes con síndrome metabólico, controles y con 1 o 2 componentes de síndrome metabólico).
2. Realizar el cálculo del equilibrio Hardy-Weinberg para las frecuencias de los genotipos del polimorfismo rs1800470 en toda la población analizada.
3. Comparar la distribución genotípica y alélica entre casos y controles utilizando la prueba de $\chi 2$ (o Fisher cuando corresponda).

Metodología

Estudio transversal analítico.

Tamaño de muestra: el número de participantes se calculó en el programa Epi Info v7, de acuerdo con la prevalencia del alelo c.29C>T descrito en la literatura. Se tomó la frecuencia más baja que fue 46%, para un nivel de confianza del 95%, un poder estadístico de 80% y un OR de 2 y una proporción de casos y controles de 1:2 se requirieron 300 participantes.

Los participantes fueron adolescentes que acudieron a la Unidad de Investigación en Cardiología o al Instituto de Terapéutica Experimental y Clínica del Centro Universitario de Ciencias de la Salud de la Universidad de Guadalajara. Se invitó a sus padres para la participación de los menores y se invitó a los menores a participar, cuando ambos estuvieron de acuerdo en participar, se les pidió la firma de una carta de consentimiento informado donde firmaron los padres como responsables de la tutela y los hijos dando su consentimiento para participar. Los participantes del estudio fueron niños y adolescentes del rango de edad de 10 años o menos y de 18 años o menos, sin parentesco de primer grado, de ascendencia mexicana de al menos dos generaciones y que no estuvieran bajo tratamiento con corticoides, antiinflamatorios no esteroideos o inmunomoduladores, sin presentar confirmación o sospecha de enfermedad inflamatoria autoinmune aguda o crónica, infección crónica por virus de hepatitis C o VIH o estuvieran embarazadas.

Métodos de recolección y análisis estadístico

Se recolectaron datos clínicos y de laboratorio de los individuos participantes. Los datos obtenidos se codificaron con una secuencia alfanumérica de identificación de paciente y de muestras a la que solo tendrán acceso los responsables del proyecto.

Se determinó talla, peso, porcentaje de grasa corporal y de grasa visceral (impedancia, equipo Omron) IMC, circunferencia de cintura, circunferencia de cadera, ICC, presión arterial en una toma (equipo electrónico Omron). En ayuno se determinó química sanguínea con los kits de BioSystems, usando el equipo ERBA X-180 (glucosa, ácido úrico (AU), creatinina, alanina aminotransferasa (ALT), perfil de lípidos (colesterol total (CT), triglicéridos, lipoproteína de alta densidad (HDL). La

lipoproteína de muy baja densidad (LDL) y lipoproteína de muy baja densidad (VLDL) se determinaron por ecuación de perfil de lípidos.

Se obtuvieron 4 mL de sangre completa periférica de los individuos del universo de estudio mediante punción venosa para la extracción de ADN. El aislamiento de ADN se realizó por el macrométodo de precipitación con sales de Miller a partir de un tubo de sangre completa anticoagulada con EDTA. Las muestras obtenidas fueron cuantificadas y ajustadas a 100 ng/mL, así como conservadas a -20°C. Fueron almacenadas y recuperadas en una genoteca.

Se realizó PCR en tiempo real de discriminación alélica para la determinación de la variante rs1800470 del gen TGB1. Se realizó con una sonda con ID de SNP 1800470 para el gen TGFB1 y alelos [VIC/FAM): A/G de la marca TaqMan ™ Thermo Fisher Scientific (https://www.thermofisher.com/taqman/snp/assay/query?keyword=C__22272997_10).

Análisis estadístico
El análisis estadístico se realizó en el programa IBM-SPSS v20. LAs variables fueron expresadas en porcentajes y se realizó chi cuadrada de bondad de ajuste para determinar el Equilibrio Hardy-Weinberg de los genotipos en la población. La comparación de las distribuciones alélicas y genotípicas se realizó con chi cuadrada. Se consideraró una prueba estadísticamente significativa con un valor de $p<0.05$.

Consideraciones éticas
De los adolescentes que cumplieron con los criterios de selección, se invitó a ellos y a sus padres al estudio; se pidió la firma del consentimiento informado voluntario de los padres como tutores y de los adolescentes, asintiendo a su participación. El participante que desee retirarse del proyecto lo podrá hacer en cualquier momento y la información y material biológico obtenidos para el proyecto serán destruidos. La confidencialidad de los datos obtenidos se aseguró mediante la referencia de los individuos con una secuencia alfanumérica de identificación de paciente, datos y muestras, a los cuales solo tuvieron acceso los responsables del proyecto.

El único documento que tuvo la identificación y los generales del paciente fue la carta de consentimiento informado del proyecto. Para el proyecto solo se realizó la toma de sangre periférica por venopunción en el antebrazo, por lo que este estudio se considera con riesgo mínimo para la salud de los pacientes, de acuerdo con el artículo 17 del Reglamento de la Ley General de Salud en Materia de Investigación para la Salud.

Consideraciones de bioseguridad
El laboratorio donde se llevará a cabo el proyecto cuenta con instalaciones de bioseguridad 2. Los residuos peligrosos biológicos infecciosos generados por el proyecto serán dispuestos en contenedores y bolsas de acuerdo con la Norma Oficial Mexicana NOM-087-ECOL-SSA1-2002. Los reactivos que se utilizarán para el desarrollo de las técnicas se organizaron y dispondrán de acuerdo con la Norma Oficial Mexicana NOM-052-SEMARNAT-2005. Se cuenta con un diagrama ecológico de las técnicas que se describen en el presente proyecto.

Sede del estudio
Instituto de Terapéutica Experimental y Clínica, Departamento de Fisiología. CUCS-UdG

RESULTADOS

Los parámetros bioquímicos y clínicos de los participantes de este estudio fueron reportados previamente por el grupo de estudio, donde se obtuvo que la prevalencia con los criterios de Ferranti (**figura 1**) fue un 17.2% para adolescentes masculinos, un 34.1% para mujeres adolescentes y un 33.7% para los que cumplían con 1 o 2 componentes de criterio. (22)

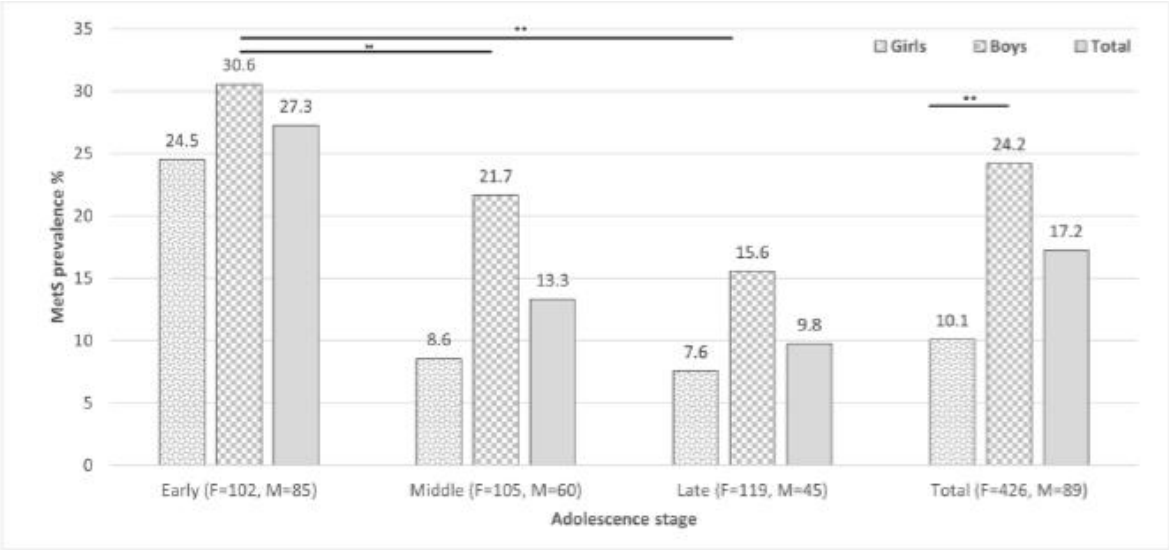


Figura 1 Prevalencia de SM dividido en grupos de mujeres y hombres por cada etapa de edad.(22)

Se analizó una población de 340 adolescentes, de los genotipos observados fueron para el Homocigoto Alelo CC (Ho 1) en total del 21.76%, del Homocigoto Alelo TT (Ho2) un 25.9% y de Heterocigotos CT (He) un 52.35%. Se calculó a través de la ecuación de equilibrio de Hardy-Weinberg el porcentaje esperado de genotipos Ho1 22.98%, Ho2 27.10% y He 49.92% (P=0.181). En la distribución de alelos de la población de ascendencia mexicana en Los Ángeles el alelo A el de alto riesgo cuenta con una frecuencia alélica de 0.547 mientras que en este estudio obtuvimos un 52% lo cual coincide con el contexto de la población Mexicana.

Se obtuvieron los porcentajes de grupos control, que cumplen con 1 o 2 componentes del SM y con SM **(tabla 2)**, tanto para los genotipos (**figura 2**) con una (P=0.729) y alelos (**figura 3**) (P=0.6714). Al hacer la comparativa entre los grupos controles (sin SM) y SM se obtuvo (P=0.841).

Tabla 2. Porcentaje de grupos fenotípicos y alélicos

Genotipo	Grupos		
	Controles % n	SM % n	1 a 2 % n
CC	20	18	17
CT	56	47	53
TT	24	35	30
Alelo C	48	42	44
Alelo T	52	58	56

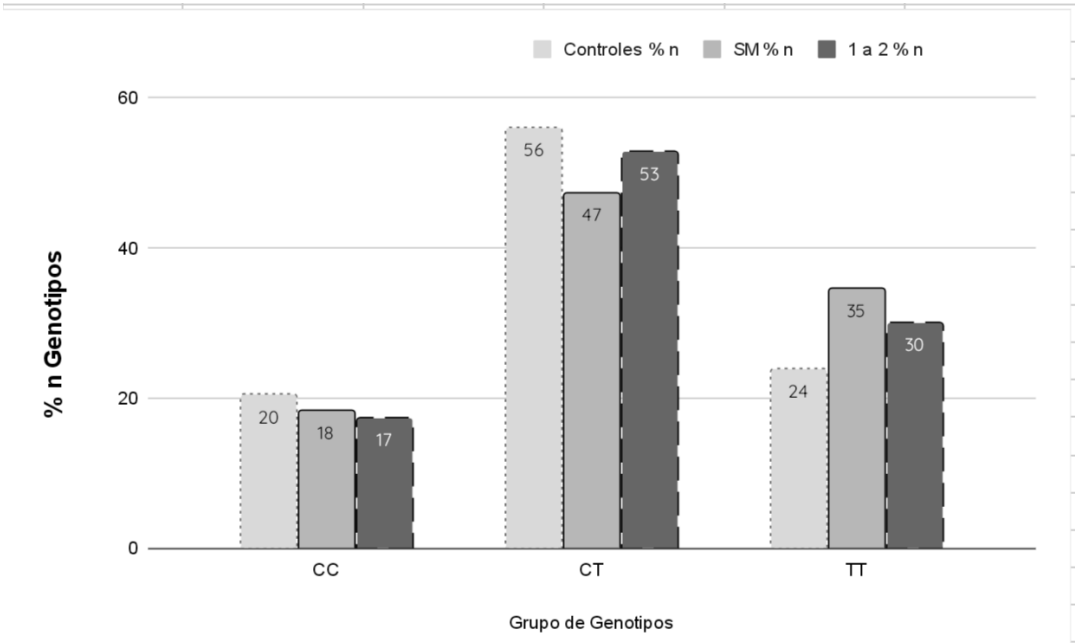


Figura 2: Representación de los porcentajes para grupos de genotipos donde se consideró una población total para: Controles 59; 1 a 2) 55 y SM) 110. El número total de genotipos fue de 224.

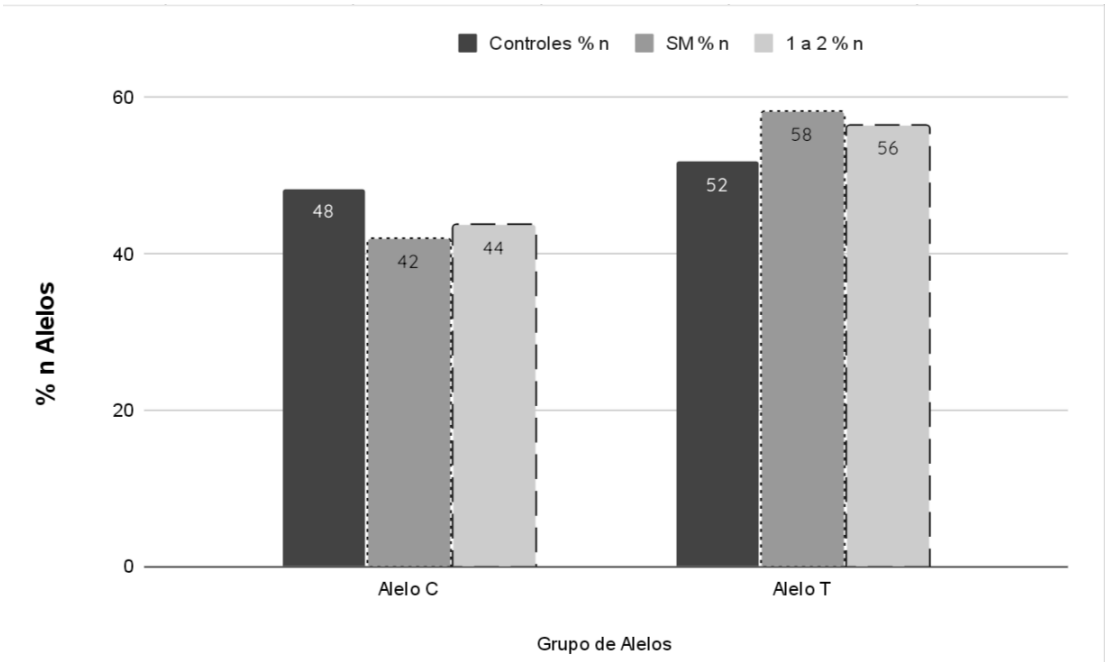


Figura 3: Representación de los porcentajes para grupos de alelos donde se consideró una población total para: Controles 118; 1 a 2) 220 y SM) 110. El número total de alelos fue de 448.

Aunque los hallazgos indican ausencia de asociación entre rs1800470 y síndrome metabólico en adolescentes del Occidente de México, es importante señalar que la falta de significancia estadística no descarta completamente un posible efecto biológico debido a que el gen *TGFB1* es una citocina que contribuye en la diferenciación de las células T reguladoras pero que también, afecta a otras líneas celulares. Además, la adolescencia es una etapa transitoria y de maduración por lo que no se

puede descartar que pueda haber fenotipos compensatorios que oculten una posible contribución del polimorfismo, particularmente si este es sutil o modulable por factores ambientales o epigenéticos.

CONCLUSIONES

En el presente estudio se evaluó la posible asociación entre la variante rs1800470 del gen *TGFB1* y el síndrome metabólico en una cohorte de 340 adolescentes del Occidente de México. Los resultados obtenidos muestran que no existe evidencia estadísticamente significativa que vincule esta variante genética con la presencia de síndrome metabólico en la población analizada. Las comparaciones entre las frecuencias genotípicas y alélicas en los grupos control, con uno o dos componentes y con diagnóstico de síndrome metabólico revelaron valores de significancia superiores al umbral establecido ($P > 0.05$), específicamente $P = 0.729$ para genotipos, $P = 0.6714$ para alelos y $P = 0.841$ en la comparación entre controles y síndrome metabólico.

La distribución genotípica observada se mantuvo en equilibrio de Hardy–Weinberg ($P = 0.181$), lo cual sugiere una adecuada representatividad poblacional, validez técnica en la genotipificación y ausencia de efectos de selección o estratificación evidente en la muestra. Las frecuencias observadas para los genotipos homocigoto del alelo 1 (21.76%), heterocigoto (52.35%) y homocigoto del alelo 2 (25.9%) fueron similares a las frecuencias esperadas teóricamente (22.98%, 49.92% y 27.10%, respectivamente), reforzando la fiabilidad de los datos genéticos generados.

En cuanto al perfil clínico de los adolescentes estudiados, se observó una prevalencia diferencial por sexo, siendo mayor en mujeres (34.1%) que en varones (17.2%) bajo los criterios de Ferranti. Además, un 33.7% de los participantes presentó uno o dos componentes del síndrome metabólico, lo que evidencia la relevancia epidemiológica del trastorno en edades tempranas dentro de esta región. Esta tendencia resalta la necesidad de estrategias preventivas dirigidas especialmente a población femenina y a adolescentes con factores tempranos de riesgo metabólico, independientemente de su carga genética para rs1800470.

En conjunto, los resultados sugieren que la variante rs1800470 del gen *TGFB1* no constituye un marcador genético de riesgo para síndrome metabólico en adolescentes del Occidente de México. No obstante, este estudio contribuye a la base de datos genética de poblaciones latinoamericanas y resalta la importancia de continuar investigando la interacción entre factores genéticos, ambientales y clínicos para comprender el desarrollo temprano de enfermedades metabólicas.

BIBLIOGRAFÍA

1. Laura X. Ramírez., Astrid M. Aguilera., Claudia M. Rubio., Angela M. Aguilar (2021) Síndrome metabólico: una revisión de criterios internacionales. Scielo. Recuperado de: http://www.scielo.org.co/scielo.php?pid=S0120-56332021000100060&script=sci_arttext#B13
2. Alberto Grima (2009) El síndrome metabólico. Sociedad Española de Cardiología. Recuperado de: https://secardiologia.es/images/publicaciones/libros/2009-sec-monografia-sindrome-metabolico.pdf
3. The metabolic syndrome 0 Journal Article J Australian Journal for General Practitioners. The Royal Australian College of General Practitioners (RACGP) V 42N 8 P 524-527D 2013 U https://www.racgp.org.au/afp/2013/august/the-metabolic-syndrome
4. Consenso Latinoamericano de la Asociación Latinoamericana de Diabetes (ALAD) (2007) Epidemiología, Diagnóstico, Control, Prevención y Tratamiento del Síndrome Metabólico en Adultos. Revista ALAD. Recuperado de: https://www.revistaalad.com/pdfs/100125-44.pdf
5. Sarah D. de Ferranti., Kimberlee G.., David S. Ludwig., Ellis J. Neufeld.., Jane W. Newburger. (2023). Prevalence of the Metabolic Syndrome in American Adolescents. NHANES III. Recuperado de: https://www.ahajournals.org/doi/pdf/10.1161/01.cir.0000145117.40114.c7
6. Pierlot, Romain, Cuevas-Romero, Estela, Rodríguez-Antolín, Jorge, Méndez-Hernández, Pablo, Martínez-Gómez, Margarita. (2017). Prevalencia de Síndrome Metabólico en niños y

adolescentes de América. TIP. Revista especializada en ciencias químico-biológicas, 20(1), 40-49. https://doi.org/10.1016/j.recqb.2016.11.004
7. María Peinado Martínez, Isaac Dager Vergara, Karol Quintero Molano, Mariana Mogollón Perez and Andrés Puello Ospina (2011) Síndrome Metabólico en Adultos: Revisión Narrativa de la Literatura. iMedPub Journals. Recuperado de: https://www.archivosdemedicina.com/medicina-de-familia/siacutendrome-metaboacutelico-en-adultos-revisioacuten-narrativa-de-la-literatura.pdf
8. Rojas Martínez R., Aguilar-Salinas C., Gómez Velasco D. (2016-2018) Trends in the prevalence of metabolic syndrome and its components in Mexican adults. Recuperado de: https://www.scielo.org.mx/pdf/spm/v63n6/0036-3634-spm-63-06-713.pdf
9. Eduardo R.., Joel Jahaziel D.., Aurora Guadalupe P.., Juan Francisco R. (2023) A Comparative Study of Metabolic Syndrome Using NCEP—ATP III and IDF Criteria in Children and Its Relationship with Biochemical Indicators in Huatusco, Veracruz, Mexico. MDPI. Recuperado de: https%3a%2f%2fpubmed.ncbi.nlm.nih.gov%2f36980032%2f/RK=2/RS=.JyksLii_DuW4dxEd03.H3i6TRc-
10. Cruz Campos, F. J. (2022). Factores de riesgo y síndrome metabólico. Psic-Obesidad, 11(44), 27–35. https://doi.org/10.22201/fesz.20075502e.2021.11.44.84419
11. Carvajal Carvajal, Carlos. (2017). Sindrome metabólico: definiciones, epidemiología, etiología, componentes y tratamiento. Medicina Legal de Costa Rica, 34(1), 175-193. Retrieved May 06, 2025, from http://www.scielo.sa.cr/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S1409-00152017000100175&lng=en&tlng=es.
12.Gómez-Bernal F, Quevedo-Abeledo JC, García-González M, Fernández-Cladera Y, González-Rivero AF, de Vera-González A, Martín-González C, González-Gay MÁ, Ferraz-Amaro (2023) . Serum Levels of Transforming Growth Factor Beta 1 in Systemic Lupus Erythematosus Patients. Biomolecules. NIH;13(1):73. doi: 10.3390/biom13010073. PMID: 36671458; PMCID: PMC9855909.
13. Ser, Ö.S., Çetinkal, G., Kiliçarslan, O. et al. Comparación de los niveles séricos de TGF-beta y los polimorfismos asociados en pacientes con ectasia coronaria y arteria coronaria normal. Egypt Heart J 73 , 32 (2021). https://doi.org/10.1186/s43044-021-00153-w
14. Malinowski D, Bochniak O, Luterek-Puszyńska K, Puszyński M, Pawlik A. (2023). Genetic Risk Factors Related to Coronary Artery Disease and Role of Transforming Growth Factor Beta 1 Polymorphisms. Genes (Basel)
NIH;14(7):1425. doi: 10.3390/genes14071425. PMID: 37510329; PMCID: PMC10379139.
15. Malinowski, D., Safranow, K. y Pawlik, A. (2023). Polimorfismos de los genes TGF-β1 y TGFβR2 en pacientes con angina inestable. Biomedicines , 11 (1), 155. https://doi.org/10.3390/biomedicines11010155
16. Liang H, Jiajue R, Qi W, Liu W, Chi Y, Jiang Y, Wang O, Li M, Xing X, Xia W. (2022). Clinical characteristics and the influence of rs1800470 in patients with Camurati-Engelmann disease. Front Endocrinol (Lausanne). NIH; 13:1041061. doi: 10.3389/fendo.2022.1041061. PMID: 36339419; PMCID: PMC9631481.
17. Fragoso, JM; Zúñiga-Ramos, J.; Arellano-González, M.; Álvarez-León, E.; Villegas-Torres, BE; Cruz-Lagunas, A.; Delgadillo-Rodríguez, H.; Peña-Duque, MA; Martínez-Ríos, MA; Vargas-Alarcón, G. El polimorfismo T29C (rs1800470) del gen del factor de crecimiento transformante-β1 (TGF-β1) se asocia con reestenosis después de la colocación de stent coronario en pacientes mexicanos. Exp. Mol. Patol. 2015, 98 , 13-17. https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0014480014001828?via%3Dihub#preview-section-references
18. Morris, DR; Moxon, JV; Biros, E.; Krishna, SM; Golledge, J. Metaanálisis de la asociación entre los polimorfismos del factor de crecimiento transformante beta y las complicaciones de la enfermedad coronaria. PLoS ONE 2012 , 7 , e37878. http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/22662243
19. Venegas María (2017). Efecto de los rs3758391 y rs1800470 asociados a dt2 sobre la expresión de los genes sirt1 y tgf-β1 en una población adulta. Zaragoza. México. Recuperado de: http://132.248.9.195/ptd2017/septiembre/0764921/0764921.pdf
20. Qingfen Chen, Beihong Zheng, Shengrong Du, Yunhong Lin, Explore the potential molecular mechanism of polycystic ovarian syndrome by protein–protein interaction network analysis,

Taiwanese Journal of Obstetrics and Gynecology, Volume 60, Issue 5, 2021, Pages 807-815, ISSN 1028-4559, https://doi.org/10.1016/j.tjog.2021.07.005.
21. García Iván (2022) Una revisión de las variantes genéticas implicadas en el desarrollo de la hipertensión en la población mexicana. Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Xochimilco, México. Recuperado de: https://repositorio.xoc.uam.mx/jspui/retrieve/0b43ef3a-35ab-4be8-9fd8-cc8159ee5e70/250722.pdf
22. Diego Ortega-Pacheco, Roberto Carlos Rosales-Gómez, Teresa Arcelia García-Cobián, Lidia Ariadna Rubio-Chávez, Angélica Adriana Gutiérrez-Rubio, José Hugo Rivera-Ramírez y Susan Andrea Gutiérrez-Rubio. (2025) Metabolic Syndrome Prevalence and Its Components in Adolescents from Western Mexico. MDPI Pediatric reports. Recuperado de: https://doi.org/10.3390/pediatric17040083

AEROGELES DE TiO_2-SiO_2 DOPADOS CON Mn MEDIANTE MÉTODO SOL-GEL COMBINADO CON UN TRATAMIENTO SOLVOTERMAL

Melissa de Jesús Rodríguez Flores[1], Amanda Rodríguez-Álvarez [1] Erika Rodríguez Sevilla[2], Daysi Elusaí Millán Ocampo[3], Carlos A. Pineda-Arellano[1]

[1] Centro de Investigaciones en Óptica A.C.[2] Centro de Investigaciones en Óptica A.C.- Unidad León, [3]SECIHTI-Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas. Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
capia@cio.mx

RESUMEN

El TiO_2 es un fotocatalizador ampliamente estudiado; sin embargo, presenta algunas limitaciones, como la alta tasa de recombinación del par electrón-hueco y la banda prohibida amplia. Para superar estas desventajas y mejorar la eficiencia de los procesos fotocatalíticos, se han propuesto diversas estrategias, entre ellas el dopaje con elementos metálicos o no metálicos y el acoplamiento con otros semiconductores. Otra alternativa efectiva consiste en aumentar el área superficial activa del material. En este contexto, los aerogeles representan una opción prometedora debido a su elevada área específica que favorece la disponibilidad de numerosos sitios activos. En el presente trabajo se estudiaron aerogeles de SiO_2-TiO_2 dopados con Mn, sintetizados mediante el método sol-gel asistido por un tratamiento solvotermal y secado a presión ambiente. Las muestras obtenidas fueron caracterizadas mediante XRD, UV-Vis, y análisis BET, con el objetivo de evaluar la influencia del dopaje con Mn y de la temperatura de calcinación sobre las características ópticas y estructurales de los aerogeles. Los materiales obtenidos presentaron áreas superficiales BET en un intervalo de 317 a 793 m/g y radios de poro de 7.49 a 5.08 nm, correspondientes a temperaturas de calcinación de 850 °C y 550 °C, respectivamente. Se observó que el incremento de la temperatura de calcinación y el porcentaje de dopaje de Mn influyen significativamente en las propiedades ópticas, estructurales y texturales, así como en el área superficial de los materiales.

INTRODUCCIÓN

El dióxido de titanio (TiO_2) es uno de los fotocatalizadores más estudiados entre los óxidos metálicos debido a su elevada actividad fotocatalítica, alta estabilidad química y térmica, resistencia a la corrosión, insolubilidad en agua, estabilidad en un amplio intervalo de pH, baja toxicidad y compatibilidad ambiental. Además, su bajo costo y amplia disponibilidad lo convierten en una alternativa atractiva para aplicaciones de remediación ambiental y de conversión de energía [1,2]. Sin embargo, el TiO_2 presenta algunas limitaciones, entre las que destacan la rápida recombinación de los pares electrón-hueco fotogenerados y su amplia energía de banda prohibida, lo que restringe su aprovechamiento de la región visible del espectro electromagnético. Para superar estas limitaciones, se han propuesto diversas estrategias, como el dopaje con elementos metálicos o no metálicos y el acoplamiento con otros semiconductores, que permiten mejorar la absorción de luz visible y favorecer la separación de cargas, incrementando así la eficiencia fotocatalítica [3]. Otra opción muy útil para aumentar la eficiencia fotocatalítica del TiO_2 es aumentar el área activa, lo que favorece una mayor interacción entre el fotocatalizador y los reactivos. En este contexto, los aerogeles representan una alternativa prometedora debido a su elevada porosidad y alta área superficial, características que pueden incrementar la adsorción de contaminantes y generar una sinergia positiva con la actividad fotocatalítica [4]. Asimismo, se ha demostrado que la incorporación de SiO_2 al TiO_2 incrementa el área superficial, mejora la capacidad de adsorción y favorece la actividad fotocatalítica del material [5]. Diversos estudios han explorado el desarrollo de aerogeles basados en SiO_2-TiO_2.Ji et al.[4] desarrollaron un fotocatalizador de aerogel de TiO_2 soportado en SiO_2, donde encontraron que la temperatura de calcinación influye significativamente en las propiedades de adsorción y en la actividad fotocatalítica del material, a mayor temperatura, se aumenta la cristalinidad y se observa mayor actividad fotocatalítica, mientras que disminuye la capacidad de adsorción. Por otra parte, Shi et al.[6] sintetizaron aerogeles compuestos de SiO_2-TiO_2-W mediante un método de secado a presión

ambiente y reportaron que el aumento de la temperatura y del tiempo durante el tratamiento solvotermal favorece una mayor cristalinidad. De manera similar, Wei et al. [7] prepararon aerogeles de SiO_2-TiO_2-C dopados con carbono, y observaron que la incorporación de este elemento promueve la formación de la fase anatasa, incrementa la cristalinidad y reduce la energía de banda prohibida. Aunque diversos estudios han demostrado que la temperatura de calcinación y el tratamiento solvotermal pueden modificar las propiedades estructurales y ópticas de los aerogeles TiO_2-SiO_2, aún existe información limitada sobre el efecto combinado de ambos procesos y sobre la influencia del dopaje con metales de transición en este tipo de materiales. En particular, el uso de manganeso como dopante en aerogeles TiO_2-SiO_2 ha sido poco explorado, a pesar de su potencial para modificar la estructura electrónica y favorecer la absorción de luz visible. Por ello, en el presente trabajo se planteó sintetizar aerogeles de TiO_2-SiO_2 mediante el método sol-gel, con secado a presión ambiente, incorporando un tratamiento solvotermal y una posterior calcinación en muestras de aerogel sin dopaje. Posteriormente, se seleccionó una temperatura de calcinación y se analizó el efecto del dopaje con Mn a 0.5 y 1.0 % at. en muestras calcinadas a 750 °C.

TEORÍA

Entre los óxidos metálicos, el TiO_2 es ampliamente reconocido como fotocatalizador semiconductor debido a su excelente fotosensibilidad, estabilidad química y respecto con el medio ambiente. El TiO_2 existe en la naturaleza en tres formas cristalinas diferentes: rutilo, anatasa (Tetragonal) y brookita (rómbica). El rutilo es la forma más estable del TiO_2, mientras que la anatasa y la brookita son fases metaestables que pueden transformarse irreversiblemente a rutilo al ser sometidas a tratamientos térmicos; sin embrago a nanoescala, la anatasa puede presentarse mayor estabilidad [1]. El TiO_2 posee una energía de banda prohibida que oscilan entre los 3.2 eV (anatasa) 3.0 eV (rutilo), lo que restringe su absorción a la región UV del espectro solar, aprovechando únicamente alrededor del 3-5% de los fotones disponibles[8]. Debido a estas limitaciones, se han propuesto estrategias como el dopaje con elementos metálicos o no metálicos, el acoplamiento con otros óxidos y el aumento de área superficial del material [9,10].

Los aerogeles son materiales sólidos altamente porosos, de baja densidad y elevada área superficial, formados por una red tridimensional abierta. Estas características permiten disponer de una mayor cantidad de sitios activos y favorecer la interacción del material con el medio[11,12]. Generalmente, los aerogeles se obtienen mediante el método sol-gel, seguido de una etapa de secado adecuada que permite conservar la estructura porosa del gel [11,13]. En le caso de los aerogeles de TiO_2-SIO_2 la incorporación de SiO_2 puede incrementar el área superficial, mejorar la capacidad de adsorción y favorecer la estabilidad estructural del material. Asimismo, el dopaje con Mn puede modificar la estructura electrónica del TiO_2, favorecer la absorción en la región visible y reducir la energía de banda prohibida, debido a la formación de niveles energéticos asociados con los diferentes estados de oxidación del manganeso[14–17]. La incorporación de SiO_2 y el dopaje con Mn constituye una estrategia prometedora para modificar las propiedades ópticas, estructurales y texturales del TiO_2, favoreciendo su absorción en la región visible y su aplicación en procesos fotocatalíticos.

PARTE EXPERIMENTAL

Metodología para la síntesis de aerogeles

El procedimiento para la síntesis de los aerogeles TiO_2-SiO_2 consistió en los siguientes pasos: inicialmente, se preparó una solución precursora combinando 7.8 mL de isopropóxido de titanio ($(C_4H_9O)_4Ti$), 7.8 mL de tetraetilo ortosilicato ($(C_2H_5O)_4Si$) (TEOS) y 24 mL de etanol absoluto (C_2H_5OH). Esta mezcla precursora se mantuvo en agitación durante 45 minutos. De manera paralela, se prepara una solución catalítica, compuesta por 2 mL de ácido acético glacial (CH_3COOH), 1 mL de agua ultrapura (grado HPLC) y 20 mL de etanol, la cual se agitó durante 45 minutos. Posteriormente, la solución catalítica se añadió gota a gota a la mezcla precursora, bajo agitación constante, durante 60 minutos. A esta mezcla se añadieron 2 mL de hidróxido de amonio (NH_4OH) y se agitó vigorosamente hasta su gelificación. Posteriormente, el gel se dejó envejecer durante 24

horas. El gel envejecido se sometió a un tratamiento solvotermal en un autoclave de acero inoxidable de 200 mL a 180 °C durante 12 horas. Finalmente, el material se lavó a 65 °C durante 72 horas, realizando cambios de solución cada 24 horas; luego, se secó a 65 °C durante 48 horas y se sometió a un tratamiento térmico en el rango de 550 °C a 850 °C, con incrementos de 100 °C entre cada temperatura de calcinación. Para la muestra dopada con Mn, se empleó la misma ruta de síntesis sol-gel, manteniendo las mismas condiciones de agitación, gelificación, envejecimiento, tratamiento solvotermal, lavado y secado. La modificación consistió en incorporar la masa correspondiente de acetato de manganeso(II) tetrahidratado ($Mn(CH_3COO)_2 \cdot 4H_2O$) a la mezcla catalítica y adicionar esta solución antes de incorporar TEOS a la mezcla precursora (figura 2). Las muestras se nombraron ST-temperaturas de calcinación o porcentajes atómicos de dopaje; por ejemplo, la muestra calcinada a 750 °C se nombró ST-750.

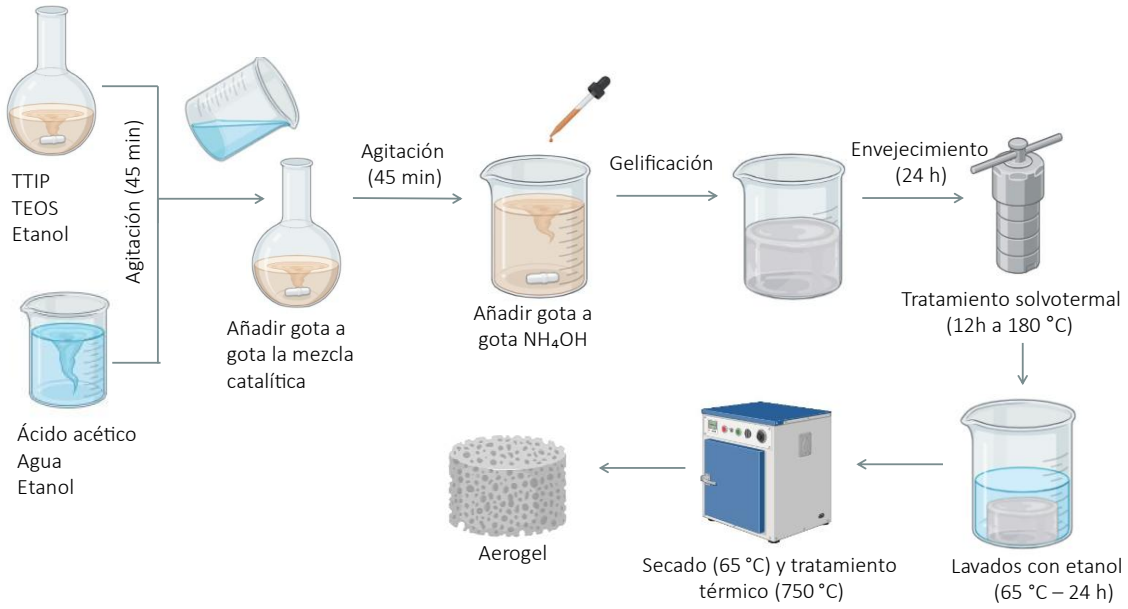


Figura 11 *Metodología la obtención de aerogeles TiO_2-SiO_2*

RESULTADOS

La Figura 2 muestra los espectros de absorción UV-Vis de los aerogeles SiO_2-TiO_2 calcinados a diferentes temperaturas (ST-550, ST-650, ST-750 y ST-850) y de las muestras dopadas con Mn a distintos porcentajes atómicos (ST-0.5 y ST-1.0). En las muestras calcinadas se observa un incremento gradual de la absorción en la región UV, acompañado de un ligero desplazamiento del borde de absorción hacia longitudes de onda mayores a medida que aumenta la temperatura de calcinación. Este comportamiento se refleja en la disminución de la energía de banda prohibida (Eg), determinada mediante la función de Kubelka–Munk (Figura 3), que pasa de 3.35 eV en la muestra sin tratamiento térmico (ST-WT) a 3.09 eV en la muestra ST-850. Por otra parte, las muestras dopadas presentan un incremento significativo de la absorción, particularmente en la región visible (400-800 nm), lo cual es más evidente en ST-1.0. Como consecuencia, se observa una reducción más pronunciada de la energía de banda prohibida, que alcanza valores de 2.82 eV para ST-0.5 y de 2.36 eV para ST-1.0. Este comportamiento puede atribuirse a la incorporación de Mn en la estructura del TiO^2, lo que favorece la formación de niveles electrónicos intermedios dentro de la banda prohibida. Estos niveles facilitan las transiciones electrónicas con menores requisitos energéticos, promoviendo la absorción de radiación de menor energía (mayor longitud de onda) y desplazando la respuesta óptica del material hacia la región visible [18]. En conjunto, los resultados indican que tanto el aumento de la temperatura de calcinación como la incorporación de Mn modifican las propiedades electrónicas del sistema SiO_2-TiO_2, disminuyendo la banda prohibida y

favoreciendo una mayor absorción de luz visible, lo cual resulta favorable para aplicaciones fotocatalíticas bajo irradiación solar [19,20] La incorporación de Mn favorece la de niveles electrónicos intermedios dentro de la banda prohibida, lo que facilita las transiciones electrónicas y extiende la absorción hacia la región visible.

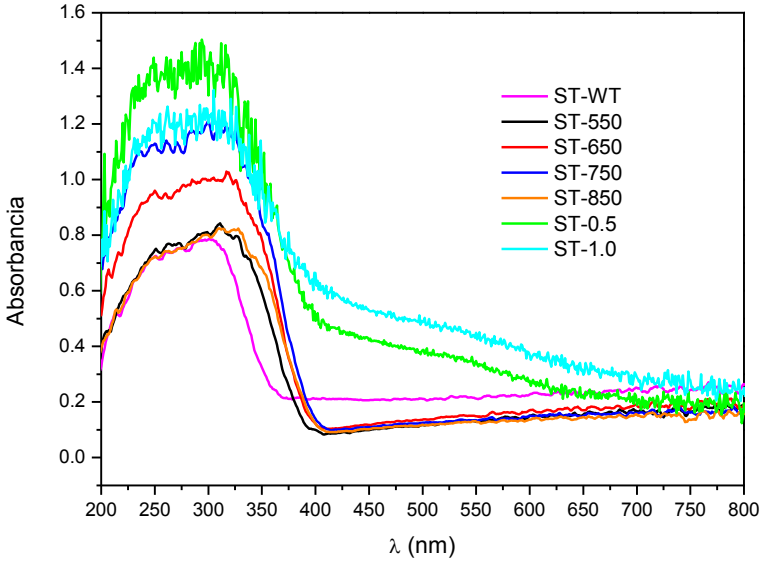


Figura 12 *Espectros de absorción UV-Vis de los aerogeles SiO_2-TiO_2 calcinados a diferentes temperaturas y dopados a diferentes porcentajes atómicos.*

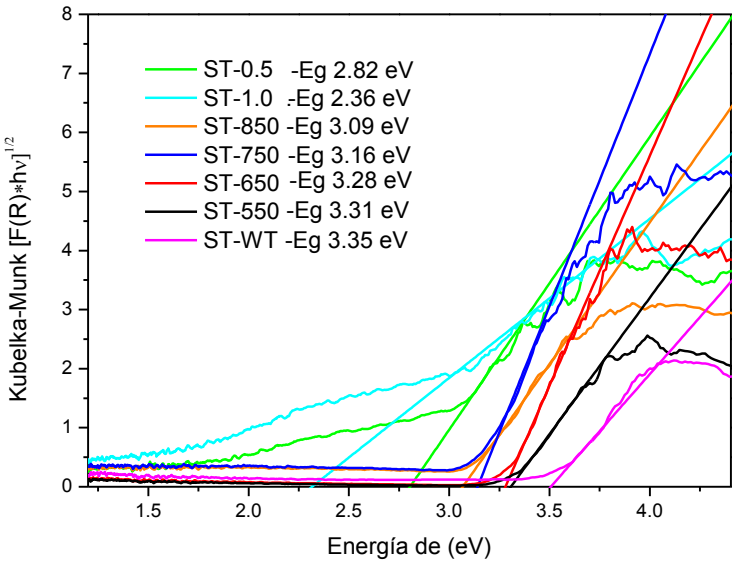


Figura 13 *Energía de banda prohibida (Eg) de los aerogeles de SiO_2-TiO_2 calcinados a diferentes temperaturas y dopados a diferentes porcentajes atómicos obtenidas a partir de la función de Kubelka–Munk.*

Los resultados de difracción de rayos X (XRD) se presentan en la Figura 4. Los difractogramas muestran que las muestras ST-WT y ST-550 no presentan reflexiones características del TiO_2 en fase anatasa, lo que indica que los aerogeles conservan una estructura predominantemente amorfa. En ambas muestras se observa una banda ancha de difracción entre 2θ = 23.7° y 30°, atribuida al SiO_2 amorfo [21]. Por otro lado, las muestras ST-650, ST-750 y ST-850 presentan señales

características de la fase anatasa, correspondientes a los planos cristalográficos (101), (004), (200), (105) y (204). Conforme aumenta la temperatura de calcinación, estos picos se vuelven más intensos y definidos, lo que evidencia un incremento en el grado de cristalinidad del material. La identificación de esta fase se realizó mediante comparación con la carta cristalográfica de anatasa (PDF 00-021-1272, ICDD). En las muestras dopadas con Mn (ST-0.5 y ST-1.0) se observa una disminución gradual de la intensidad de los picos de anatasa, acompañada de un ensanchamiento de las reflexiones, lo que sugiere una modificación de la estructura cristalina del TiO_2. Adicionalmente, aparecen nuevas señales en 2θ = 27.67°, 36.12° y 41.63°, asignadas a los planos (110), (101) y (111) de la fase rutilo, respectivamente, de acuerdo con la carta cristalográfica PDF 01-086-0148 (ICDD). La presencia de Mn favorece la transformación parcial de anatasa a rutilo, fenómeno atribuible a la incorporación de iones de Mn en la red cristalina del TiO_2. Esta incorporación genera distorsiones estructurales y reduce la estabilidad de la fase anatasa, lo que favorece la nucleación y el crecimiento de la fase rutilo. Asimismo, el incremento del contenido de Mn intensifica este efecto, favoreciendo una mayor proporción de rutilo en las muestras dopadas [22].

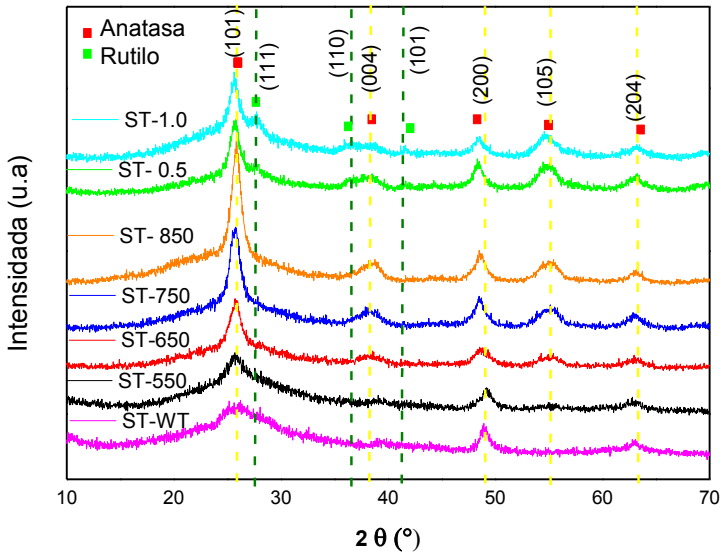


Figura 14 *Difracción de rayos X (XRD) de los aerogeles de SiO_2-TiO_2 calcinados a diferentes temperaturas y dopados a diferentes porcentajes atómicos*

La Figura 5 presenta los espectros Raman de los aerogeles SiO_2-TiO_2 calcinados a diferentes temperaturas y con distintos contenidos de Mn. Las muestras ST-WT y ST-550 no presentan modos vibracionales bien definidos, lo que evidencia una estructura predominantemente amorfa. Este comportamiento es consistente con los resultados obtenidos mediante difracción de rayos X, en los que no se detectaron reflexiones cristalinas asociadas al TiO_2. A partir de la muestra ST-650, se observa la aparición del modo vibracional Raman más intenso de la fase anatasa, alrededor de 142 cm^{-1} (Eg), lo que indica el inicio del proceso de cristalización del TiO_2. Sin embargo, la baja intensidad y el amplio ensanchamiento de esta banda sugieren una fracción cristalina limitada y un menor grado de orden estructural en comparación con las muestras tratadas a temperaturas más altas. Los espectros correspondientes a ST-750 y ST-850 presentan claramente los modos vibracionales característicos de la fase anatasa localizados aproximadamente en 142 cm^{-1} (Eg), 197 cm^{-1} (Eg), 397 cm^{-1} (B1g), 518 cm^{-1} (A1g + B1g) y 640 cm^{-1} (Eg). El incremento en la intensidad y la definición de estas bandas a medida que aumenta la temperatura de calcinación indica un aumento de la cristalinidad y del orden estructural del TiO_2, en concordancia con los resultados observados por XRD. Estos resultados confirman que la anatasa constituye la fase cristalina predominante en los materiales sometidos a tratamientos térmicos a temperaturas iguales o superiores a 750 °C [23].
En las muestras dopadas con Mn (ST-0.5 y ST-1.0) se mantienen los modos vibracionales característicos de la anatasa; sin embargo, se observa un ensanchamiento de las bandas y una

disminución relativa de su intensidad, lo que sugiere la introducción de defectos estructurales y distorsiones de red asociadas a la incorporación de Mn en la estructura del TiO_2. Adicionalmente, el análisis ampliado mostrado en la Figura 5B revela la presencia de bandas localizadas alrededor de 448 cm^{-1} (Eg) y 611 cm^{-1} (A1g), características de la fase rutilo. Estas señales son más evidentes en la muestra ST-1.0, lo que indica que el incremento del contenido de Mn favorece la transformación parcial de anatasa a rutilo. Este comportamiento coincide con los resultados de XRD y sugiere que la incorporación del dopante disminuye la estabilidad termodinámica de la fase anatasa, lo que favorece la nucleación de la fase rutilo. La coexistencia de ambas fases puede resultar beneficiosa para aplicaciones fotocatalíticas, ya que las heterouniones anatasa-rutilo favorecen la separación de cargas fotogeneradas y reducen la recombinación electrón-hueco.

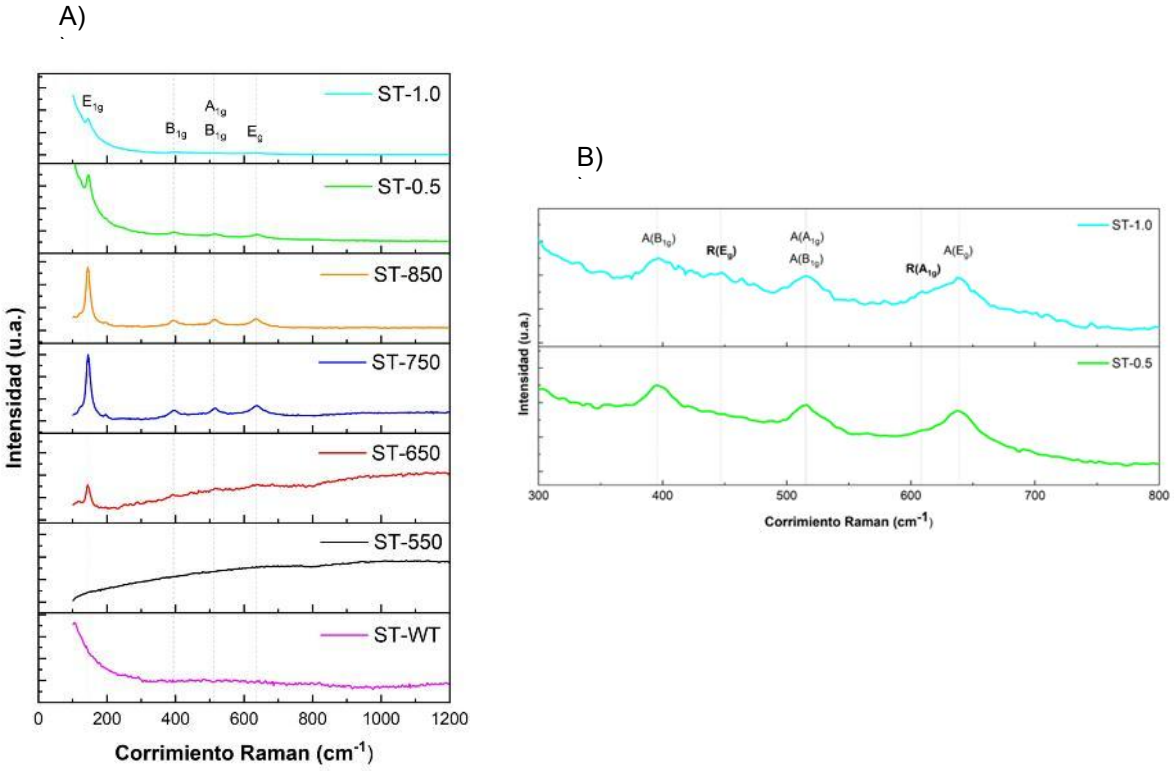


Figura 15 ***A)*** *Espectroscopía Raman de los aerogeles de SiO_2-TiO_2 calcinados a diferentes temperaturas y dopados a diferentes porcentajes atómicos* ***B)*** Aumento la *espectroscopía Raman para las muestras dopadas.*

La Tabla 1 presenta los valores del área superficial (BET) y del radio de poro de los aerogeles SiO_2-TiO_2 calcinados a diferentes temperaturas y dopados con distintos porcentajes atómicos de Mn. Se observa que el área superficial disminuye progresivamente desde 877 m^2/g en la muestra sin tratamiento térmico (ST-WT) hasta 317 m^2/g en la muestra calcinada a 850 °C (ST-850). Paralelamente, el radio de poro aumenta de 5.16 a 7.49 nm a medida que aumenta la temperatura de calcinación. El aumento de la cristalinidad del TiO_2, observado mediante XRD y Raman, favorece la unión y el crecimiento de las partículas durante la calcinación, lo que provoca el colapso de los poros más pequeños y, en consecuencia, una disminución del área superficial, como se ha reportado [24]. Como consecuencia, los poros remanentes presentan dimensiones promedio mayores, lo que explica el incremento observado en el radio de poro. Un comportamiento similar ha sido reportado para aerogeles SiO_2-TiO_2 sometidos a tratamientos térmicos, en los que la cristalización progresiva del TiO_2 conduce simultáneamente a una disminución del área BET y a un aumento del tamaño de poro [21]. En las muestras dopadas con Mn se observa una disminución adicional del área superficial, con valores de 383 y 339 m^2/g para ST-0.5 y ST-1.0, respectivamente. Asimismo, el radio de poro disminuye hasta 3.90 y 2.87 nm, respectivamente. Este comportamiento sugiere que la incorporación

de Mn modifica la red porosa del aerogel, posiblemente mediante la ocupación parcial de los poros, la formación de especies de Mn en la superficie o la generación de distorsiones estructurales que favorecen una contracción local de la matriz. La reducción simultánea del área superficial y del tamaño de poro indica que el dopante no solo afecta la estructura cristalina del TiO_2, sino también la arquitectura porosa del material. Las isotermas de adsorción-desorción de N_2 mostradas en la Figura 6 corresponden a isotermas de tipo IV(a) con bucles de histéresis H3, de acuerdo con la clasificación de la IUPAC. Este comportamiento es característico de materiales mesoporosos formados por agregados de partículas que generan poros con geometrías irregulares o en forma de rendija. La presencia de este tipo de isotermas en todas las muestras indica que la naturaleza mesoporosa del sistema SiO_2-TiO_2 se conserva tras la calcinación y el dopaje con Mn, aunque con modificaciones importantes en los parámetros texturales. Estas características son particularmente relevantes para aplicaciones fotocatalíticas, ya que la combinación de un alto área superficial y una mesoporosidad favorece la adsorción y la difusión de contaminantes hacia los sitios activos del material.

Tabla 1 *Radio de poro y áreas BET de aerogeles calcinados a diferentes temperaturas y de aerogeles dopados con 0.5 y 1.0 % atómico*.

Muestras	ST-WT	ST-550	ST-650	ST-750	ST-850	ST-0.5	ST-1.0
Área BET (m^2/g)	877	793	616	509	317	383	339
Radio de poro (nm)	5.16	5.08	5.57	6.57	7.49	3.90	2.87

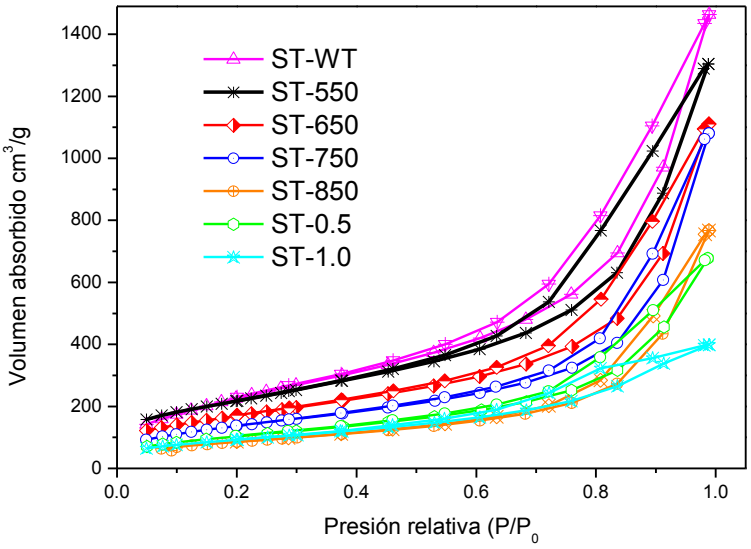


Figura 16 Isotermas de adsorción desorción de N_2 *de aerogeles calcinados a diferentes temperaturas y de aerogeles dopados con 0.5 y 1.0 % atómico*.

CONCLUSIONES

Se obtuvieron aerogeles de TiO_2-SiO_2 y aerogeles de TiO_2-SiO_2 dopados con Mn mediante el método sol-gel asistido por tratamiento solvotermal y secado a presión ambiente. Los resultados muestran que tanto la temperatura de calcinación como la incorporación de Mn modifican las propiedades ópticas, estructurales y texturales de los materiales. Los resultados XRD y Raman evidenciaron que las muestras sin tratamiento térmico y calcinadas a 550 °C presentan una estructura predominantemente amorfa, mientras que el aumento de la temperaturas favorece la formación y

cristalización de la fase anatasa, en cuanto a las muestras dopadas con Mn, se observó una disminución en la intensidad de las señales de anatasa y la aparición de señales asociadas con la fase rutilo, lo que sugiere que la incorporación de Mn promueve parcialmente la trasformación de anatasa a rutilo. En cuanto al análisis BET mostró que el área superficial disminuye con el aumento de la temperatura de calcinación, mientras que el radio de poro aumenta. En las muestras dopadas también disminuyo el área superficial y radio de poro, indica que el Mn modifica la red porosa del aerogel. En conjunto los materiales obtenidos presentan características mesoporosas, propiedades ópticas y estructurales prometedoras para futuras aplicaciones fotocatalíticas.

AGRADECIMIENTO

Los autores agradecen a la técnico María Christian Albor Cortés por su valiosa asistencia en los análisis XRD. Melissa de Jesús Rodríguez Flores agradece a la SECIHTI por la beca nacional otorgada para la realización de sus estudios de posgrado en el programa PICYT del Centro de Investigaciones en Óptica, A.C. Asimismo, se agradece el financiamiento otorgado por el proyecto Secihti CBF2023-2024-2997: “Estudio sobre materiales aislantes térmicos de frontera, como alternativa para mitigar las pérdidas energéticas en sistemas termosolares”. Para el desarrollo de este proyecto.

BIBLIOGRAFÍA

1. Suhaimi, N. H. S. *et al.* Recent updates on TiO2-based materials for various photocatalytic applications in environmental remediation and energy production. *Desalination and Water Treatment* vol. 321 Preprint at https://doi.org/10.1016/j.dwt.2024.100976 (2025).
2. Armaković, S. J., Savanović, M. M. & Armaković, S. Titanium Dioxide as the Most Used Photocatalyst for Water Purification: An Overview. *Catalysts* vol. 13 Preprint at https://doi.org/10.3390/catal13010026 (2023).
3. Amakiri, K. T., Angelis-Dimakis, A. & Canon, A. R. Recent advances, influencing factors, and future research prospects using photocatalytic process for produced water treatment. *Water Science and Technology* 85, 769–788 (2022).
4. Ji, H. *et al.* Experimental evidences and theoretical calculations on phenanthrene degradation in a solar-light-driven photocatalysis system using silica aerogel supported TiO2 nanoparticles: Insights into reactive sites and energy evolution. *Chemical Engineering Journal* 419, (2021).
5. Babyszko, A., Wanag, A., Kusiak-Nejman, E. & Morawski, A. W. Effect of Calcination Temperature of SiO2/TiO2 Photocatalysts on UV-VIS and VIS Removal Efficiency of Color Contaminants. *Catalysts* 13, (2023).
6. Shi, F. *et al.* Influences of solvothermal-assisted crystallization process on the microstructure and properties of SiO2-W0.02TiO2.06 composite aerogels synthesized via ambient pressure drying. *J. Solgel Sci. Technol.* 92, 101–115 (2019).
7. Wei, J., Zhu, P. & Chen, P. Degradation of Tetracycline on SiO2-TiO2-C Aerogel Photocatalysts under Visible Light. *Materials* 15, (2022).
8. Xu, Y. & Zangari, G. Tio2 nanotubes architectures for solar energy conversion. *Coatings* vol. 11 Preprint at https://doi.org/10.3390/coatings11080931 (2021).
9. Nam, Y., Lim, J. H., Ko, K. C. & Lee, J. Y. Photocatalytic activity of TiO2 nanoparticles: A theoretical aspect. *Journal of Materials Chemistry A* vol. 7 13833–13859 Preprint at https://doi.org/10.1039/c9ta03385h (2019).
10. Farooq, N. *et al.* Recent trends of titania (TiO2) based materials: A review on synthetic approaches and potential applications. *Journal of King Saud University - Science* vol. 36 Preprint at https://doi.org/10.1016/j.jksus.2024.103210 (2024).
11. Maleki, H. Recent advances in aerogels for environmental remediation applications: A review. *Chemical Engineering Journal* vol. 300 98–118 Preprint at https://doi.org/10.1016/j.cej.2016.04.098 (2016).
12. Synthesis of silica aerogels and their application as drug delivery system.
13. Karaaslan, M. A., Kadla, J. F. & Ko, F. K. Lignin-Based Aerogels. in *Lignin in Polymer Composites* 67–93 (Elsevier Inc., 2016). doi:10.1016/B978-0-323-35565-0.00005-9.

14. Binas, V. D., Sambani, K., Maggos, T., Katsanaki, A. & Kiriakidis, G. Synthesis and photocatalytic activity of Mn-doped TiO 2 nanostructured powders under UV and visible light. *Appl. Catal. B* 113–114, 79–86 (2012).
15. Sudrajat, H., Babel, S., Ta, A. T. & Nguyen, T. K. Mn-doped TiO2 photocatalysts: Role, chemical identity, and local structure of dopant. *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 144, (2020).
16. Alorabi, G. A. M., Abdelwahab, S. M. & Abo-Naf, S. M. Sol–gel synthesis, structure, ferromagnetism and optical properties of Mn–doped titania diluted magnetic semiconductors nanoparticles. *Egypt. J. Chem.* 65, 431–446 (2022).
17. Moreira, A. J. *et al.* Photocatalytic Degradation of Environmental Contaminants: Transformation Products and Effects on Photocatalytic Performance. *Catalysts* vol. 15 Preprint at https://doi.org/10.3390/catal15070643 (2025).
18. Cheng, Y., Luo, F., Jiang, Y., Li, F. & Wei, C. The effect of calcination temperature on the structure and activity of TiO2/SiO2 composite catalysts derived from titanium sulfate and fly ash acid sludge. *Colloids Surf. A Physicochem. Eng. Asp.* 554, 81–85 (2018).
19. He, Y., Zheng, S., Yan, S. & Yu, Y. Study on the preparation of sulfuric acid-activated Mn-TiO2 composite material for efficient photocatalytic degradation of ciprofloxacin. *J. Mol. Struct.* 1350, (2026).
20. Study on the preparation of sulfuric acid-activated Mn-TiO2 composite.
21. Cheng, S., Liu, X., Yun, S., Luo, H. & Gao, Y. SiO2/TiO2 composite aerogels: Preparation via ambient pressure drying and photocatalytic performance. *Ceram. Int.* 40, 13781–13786 (2014).
22. Xu, J. P. *et al.* Effect of manganese ions concentration on the anatase-rutile phase transformation of TiO2 films. *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 70, 511–515 (2009).
23. Moussaoui, R., Elghniji, K., ben Mosbah, M., Elaloui, E. & Moussaoui, Y. Sol–gel synthesis of highly TiO2 aerogel photocatalyst via high temperature supercritical drying. *Journal of Saudi Chemical Society* 21, 751–760 (2017).
24. Ferreira, V. R. A., Azenha, M. A., Pereira, C. M. & Silva, A. F. Crystallization of hollow TiO2 into anatase at mild conditions, for improved surface recognition in selective photocatalysis. *Appl. Catal. A Gen.* 648, (2022).

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UN MATERIAL HÍBRIDO ORGÁNICO-INORGÁNICO CON POTENCIALES PROPIEDADES ÓPTICAS NO LINEALES

Luis Gabriel Gutiérrez-Vera[1], Egla Yareth Bivián-Castro[1], Cristhian Eduardo Maciel-Flores[1], Mónica Trejo-Durán[2] y Evelia Martínez-Cano[1]

[1]Centro Universitario de los Lagos, Universidad de Guadalajara, [2]Departamento de Estudios Multidisciplinarios, División de Ingenierías, Universidad de Guanajuato,
lgabriel.gutierrez@alumnos.udg.mx

RESUMEN

Los materiales híbridos orgánicos-inorgánicos son de gran interés debido a su capacidad para combinar las propiedades deseadas del componente orgánico e inorgánico en un único compuesto. Sus aplicaciones son diversas e incluyen campos como la óptica, el magnetismo, la medicina y la conductividad eléctrica. Algunos materiales orgánicos poseen una susceptibilidad óptica no lineal (ONL) mayor que la de los materiales inorgánicos, no obstante, presentan menor estabilidad térmica y mecánica, así como un umbral menor de daño láser. Por otro lado, los compuestos inorgánicos con propiedades ONL exhiben adecuadas estabilidades térmicas y mecánicas, pero propiedades ópticas moderadas debido a una deficiencia en la deslocalización extendida de electrones π. Para solucionar estas limitaciones, se desarrollan compuestos híbridos orgánicos-inorgánicos que tienen las cualidades de los compuestos orgánicos e inorgánicos, entre ellas un mayor coeficiente no lineal y un umbral de daño láser más elevado. Para obtener el producto 3-[(5-(diclorometilsilil)pentil)oxi]cianobenceno (DCN), primero se llevó a cabo la síntesis del precursor 3-(4-penteniloxi)benzonitrilo (PBN), el cual es un éter obtenido mediante la reacción entre 3-cianofenol (0.02 mol), 5-bromo-1-penteno (0.017 mol) y carbonato de potasio anhidro (0.025 mol) en acetona (50 mL) a reflujo a 50 °C durante 24 h . Posteriormente, la mezcla de reacción se vertió en agua y la acetona fue eliminada. La fase acuosa se extrajo con éter etílico (5 mL, 4X). La fase orgánica se lavó con hidróxido de potasio acuoso (2 M, 10 mL, 7X), agua (5 mL, 4X) y salmuera saturada (5 mL, 2X), y posteriormente se secó con sulfato de sodio anhidro (1 g). Finalmente, el éter fue eliminado en un rotavapor, obteniéndose un aceite amarillo pálido. La obtención de DCN se realizó mediante una reacción de hidrosililación del PBN. Para ello, se calentó una mezcla de PBN (0.005 mol), ácido cloroplatínico en solución de tetrahidrofurano (THF) (0.122 M, 3 gotas), tolueno (5 mL) y diclorometilsilano (0.005 mol) a una temperatura de 40-50 °C durante 16 h. Posteriormente, la mezcla se dejó enfriar y el producto obtenido se disolvió en tolueno hirviendo, se filtró bajo atmósfera de N_2, se concentró y se dejó cristalizar. Los resultados generados sugieren que el proceso de obtención del compuesto precursor PBN fue satisfactorio de acuerdo al cambio físico del compuesto y los resultados análisis de FT-IR. Por otro lado, la síntesis del producto DCN muestra un cumplimiento parcial, ya que mostró un cambio físico y se logró la formación del enlace silicio–metileno entre el diclorometilsilano DCN y el precursor PBN como, sin embargo, no fue posible evitar un cierto grado de polimerización del producto, cumpliendo el objetivo de manera parcial. Los resultados obtenidos sugieren que el proceso de síntesis del compuesto precursor PBN fue satisfactorio, de acuerdo con el cambio físico observado y los resultados de los análisis de FT-IR. Por otro lado, la síntesis del producto DCN mostró un cumplimiento parcial, ya que, aunque se observó un cambio físico y se logró la formación del enlace silicio–metileno entre el diclorometilsilano y el precursor PBN, no fue posible evitar cierto grado de polimerización del producto.

INTRODUCCIÓN

Los materiales híbridos son compuestos constituidos por un componente orgánico y otro inorgánico, cuya combinación permite obtener propiedades superiores a las que presentan por separado los materiales exclusivamente orgánicos o inorgánicos. Entre los componentes inorgánicos más relevantes se encuentra el silicio, debido a su importante contribución en la generación de propiedades ópticas con potencial para diversas aplicaciones tecnológicas. La posibilidad de integrar

en un mismo material las ventajas de los compuestos inorgánicos, tales como la alta movilidad de los portadores de carga, la estabilidad mecánica y térmica, con las características de los compuestos orgánicos, como el bajo costo, la flexibilidad y la facilidad para ajustar sus propiedades ópticas y eléctricas, ha representado un desafío de investigación durante varias décadas. Los materiales orgánicos con propiedades ópticas no lineales (ONL) suelen estar constituidos por moléculas que interactúan mediante enlaces débiles, como fuerzas de Van der Waals o puentes de hidrógeno, lo que favorece una elevada susceptibilidad óptica no lineal. Sin embargo, presentan limitaciones asociadas a una menor estabilidad mecánica y térmica, así como a un umbral de daño láser relativamente bajo. Por otro lado, los materiales inorgánicos ONL exhiben una excelente estabilidad térmica y mecánica, aunque generalmente muestran respuestas ópticas no lineales moderadas debido a la limitada deslocalización de electrones π en sus estructuras. Con el propósito de superar estas limitaciones, se han desarrollado materiales híbridos orgánico-inorgánicos capaces de combinar las ventajas de ambos tipos de compuestos. Estos materiales pueden presentar coeficientes no lineales elevados, amplios rangos de transparencia óptica y mayores umbrales de daño láser, características que los convierten en candidatos atractivos para aplicaciones fotónicas avanzadas[1]. Los materiales híbridos orgánico-inorgánicos han despertado un gran interés científico debido a su capacidad para integrar en una sola estructura las propiedades más favorables de sus componentes constituyentes. El desarrollo de estos materiales ha permitido explorar una amplia variedad de morfologías, composiciones y tamaños, ampliando significativamente su campo de aplicación. Como resultado, los materiales híbridos encuentran utilidad en áreas tan diversas como la óptica, el magnetismo, la medicina y los dispositivos electrónicos[2].La óptica no lineal se ocupa del estudio de la interacción entre la radiación electromagnética intensa y la materia, en la que la polarización inducida en el material presenta una dependencia no lineal con el campo eléctrico aplicado. Entre los procesos más relevantes se encuentran la generación de segundo armónico, la mezcla de frecuencias, el efecto electroóptico (efecto Pockels), la conversión paramétrica descendente y la amplificación paramétrica. Estos fenómenos constituyen la base de numerosas aplicaciones en telecomunicaciones, fotónica, procesamiento óptico de señales y generación de nuevas frecuencias láser[3].

TEORÍA

Óptica no lineal

La investigación en ONL ha experimentado un crecimiento acelerado en las últimas décadas. Como una disciplina fundamental de la fotónica moderna, la ONL ha contribuido significativamente al desarrollo de tecnologías para la transmisión, el procesamiento y el almacenamiento de información óptica, respondiendo a la creciente demanda de capacidad de manejo de datos. Paralelamente, los fundamentos teóricos de los fenómenos no lineales se han consolidado, permitiendo una comprensión más profunda de la interacción entre la radiación electromagnética y la materia. Actualmente, gracias a la convergencia entre la investigación fundamental y el desarrollo tecnológico, los materiales con propiedades ópticas no lineales, incluyendo compuestos orgánicos, organometálicos e inorgánicos, han encontrado aplicaciones en áreas como la optoelectrónica, la nanofotónica, las telecomunicaciones y las técnicas avanzadas de bioimagen[4]. La óptica no lineal estudia los fenómenos que surgen cuando un campo electromagnético intenso interactúa con un material, provocando que su respuesta óptica deje de ser proporcional a la intensidad de la radiación incidente. En condiciones de baja intensidad, como las generadas por la luz solar o las lámparas convencionales, los materiales exhiben un comportamiento lineal que obedece al principio de superposición. Sin embargo, los láseres de alta intensidad pueden producir campos eléctricos comparables a los campos eléctricos interatómicos, induciendo una respuesta no lineal y dando lugar a fenómenos como la generación de armónicos, la mezcla de frecuencias y la amplificación paramétrica[5]. A pesar de los importantes avances alcanzados en óptica no lineal, aún persisten desafíos relacionados con las pérdidas ópticas, la eficiencia de conversión y la integración de materiales funcionales en plataformas fotónicas miniaturizadas. En este contexto, la investigación actual se orienta al desarrollo de plataformas integradas de alto rendimiento capaces de potenciar las respuestas no lineales mediante el empleo de nanoestructuras fotónicas resonantes y nuevos materiales con propiedades ópticas mejoradas. Por ello, el diseño y desarrollo de materiales innovadores con elevada respuesta óptica no lineal constituye una de las principales áreas de

investigación en fotónica y optoelectrónica. Estos materiales podrían contribuir a la fabricación de dispositivos más eficientes, compactos, versátiles y de menor costo, además de favorecer el desarrollo de nuevas tecnologías para el procesamiento y la transmisión de información óptica. Los materiales con propiedades ópticas no lineales comprenden sistemas tanto orgánicos como inorgánicos. Entre los materiales orgánicos más estudiados se encuentran diversos cromóforos y cristales moleculares, como el 4-*N*,*N*-dimetilamino-4′-*N′-metil-estilbazolio tosilato* (DAST), los cuales destacan por presentar elevados coeficientes electroópticos, rápidas velocidades de respuesta, amplio ancho de banda y una considerable susceptibilidad óptica no lineal. Estas características los convierten en candidatos atractivos para múltiples aplicaciones[5]. Las propiedades ópticas no lineales surgen de la interacción no lineal entre la radiación electromagnética y la materia, dando lugar a fenómenos capaces de modificar la frecuencia de la luz incidente. Entre estos procesos destaca la generación de segundo armónico (SHG, por sus siglas en inglés), un fenómeno de segundo orden en el que dos fotones de frecuencia ω interactúan dentro de un material no lineal para producir un nuevo fotón con frecuencia 2ω[6]. Los cristales con propiedades ópticas no lineales son componentes fundamentales en los láseres de estado sólido, ya que permiten la conversión de frecuencia y la ampliación de los rangos espectrales accesibles. Gracias a estas características, encuentran aplicaciones en áreas como la espectroscopía láser, las telecomunicaciones ópticas de larga distancia y el procesamiento de señales[7]. De acuerdo con la región espectral de aplicación, los materiales ópticos no lineales pueden clasificarse en tres grupos principales: ultravioleta (UV), visible e infrarrojo cercano (Vis-NIR) e infrarrojo medio y lejano (MF-IR)[7].

Materiales orgánicos

Los cristales orgánicos han atraído una atención considerable como materiales ópticos no lineales debido a sus diversas capacidades de autoensamblaje y a las interacciones no covalentes que favorecen una adecuada organización molecular. En comparación con muchos materiales inorgánicos, los sistemas moleculares orgánicos suelen presentar coeficientes no lineales más elevados, tiempos de respuesta más rápidos y una mayor facilidad de procesamiento. Particularmente, las moléculas orgánicas con sistemas π conjugados han sido ampliamente utilizadas como cromóforos para aplicaciones de óptica no lineal de segundo orden. La presencia de electrones π deslocalizados, junto con una eficiente transferencia intramolecular de carga entre grupos donadores y aceptores, favorece el incremento de la susceptibilidad óptica no lineal. En consecuencia, la optimización de estos parámetros constituye una estrategia fundamental en el diseño de materiales con respuestas ONL mejoradas. No obstante, el aumento de la polarizabilidad molecular suele modificar el borde de absorción de los materiales, dando lugar al denominado compromiso entre no linealidad y transparencia óptica. Este fenómeno representa uno de los principales desafíos en el desarrollo de materiales orgánicos para aplicaciones fotónicas. Por ello, gran parte de la investigación actual se centra en la ingeniería molecular de compuestos orgánicos capaces de combinar elevadas respuestas ópticas no lineales con una adecuada transparencia en la región espectral de interés[8]. La búsqueda de materiales ópticos no lineales con respuestas cada vez más eficientes ha impulsado importantes avances en el desarrollo de compuestos orgánicos. Estos materiales han despertado un gran interés debido a características como su diversidad estructural, bajas constantes dieléctricas, flexibilidad, amplia disponibilidad, facilidad de síntesis y elevados coeficientes ópticos no lineales. Además, la versatilidad estructural de los sistemas orgánicos permite modificar de manera precisa sus propiedades electrónicas y ópticas para satisfacer los requerimientos de aplicaciones específicas[9]. Entre las distintas arquitecturas moleculares estudiadas, los sistemas π-conjugados con estructura donador–π–aceptor (D–π–A), también conocidos como sistemas *push-pull*, han demostrado ser especialmente prometedores para el diseño de materiales con propiedades ópticas no lineales mejoradas. En estos sistemas, la incorporación simultánea de grupos donadores y aceptores de electrones favorece la transferencia intramolecular de carga a través del puente conjugado, incrementando la polarizabilidad y la hiperpolarizabilidad molecular, parámetros estrechamente relacionados con la respuesta de estos materiales. Por ello, el diseño racional de cromóforos D–π–A constituye una de las estrategias más utilizadas para optimizar el rendimiento ONL de los materiales orgánicos. La naturaleza de los grupos donadores y aceptores, así como su posición dentro de la estructura molecular, influyen significativamente en propiedades como la transparencia óptica, los tiempos de respuesta y la

eficiencia no lineal global del material. En consecuencia, los sistemas *push-pull* continúan siendo un área de investigación activa para el desarrollo de nuevos materiales con aplicaciones avanzadas[9].
Los cromóforos ópticos no lineales de segundo orden suelen estar constituidos por tres unidades fundamentales: un grupo donador de electrones (D), un sistema π-conjugado que actúa como puente electrónico (π) y un grupo aceptor de electrones (A), formando la denominada arquitectura donador–π–aceptor (D–π–A). La interacción entre estos tres componentes determina en gran medida las propiedades electrónicas y ópticas de la molécula, por lo que su diseño y optimización constituyen una estrategia clave para mejorar la respuesta óptica no lineal. Frecuentemente, estos grupos contienen heteroátomos como nitrógeno, oxígeno o azufre, los cuales favorecen la transferencia intramolecular de carga a lo largo del puente π-conjugado. Este fenómeno incrementa la deslocalización electrónica y contribuye al aumento de la polarizabilidad e hiperpolarizabilidad molecular, parámetros estrechamente relacionados con la eficiencia óptica no lineal. Por ello, la selección de grupos donadores adecuados requiere considerar aspectos como su capacidad de donación electrónica y estabilidad térmica, ya que estos factores influyen directamente en el rendimiento final del cromóforo[10].

Materiales inorgánicos
Los cristales ópticos no lineales capaces de generar segundo armónico (SHG) desempeñan un papel fundamental en los sistemas láser de estado sólido. Debido a esto, encuentran aplicación en campos como la medicina, la investigación científica, las telecomunicaciones y diversas industrias tecnológicas. Sin embargo, para que un cristal sea considerado un material ONL eficiente, debe cumplir una serie de requisitos estructurales y funcionales. Desde el punto de vista cristalográfico, únicamente los materiales que cristalizan en grupos espaciales no centrosimétricos (NCS) pueden exhibir efectos ópticos no lineales de segundo orden, como la generación de segundo armónico. Además, estos materiales deben presentar coeficientes SHG elevados y una birrefringencia adecuada, propiedades esenciales para satisfacer las condiciones de adaptación de fase y alcanzar una alta eficiencia en los procesos de conversión de frecuencia láser[11].

Entre los materiales inorgánicos más estudiados para aplicaciones ONL destacan aquellos que contienen grupos aniónicos planos con sistemas π conjugados, tales como los boratos $(BO_3)^{3-}$, cianuratos $(C_3N_3O_3)^{3-}$, y nitratos $(NO_3)^{1-}$. Estas unidades estructurales favorecen la aparición de estructuras no centrosimétricas, así como respuestas SHG significativas, amplias ventanas de transparencia óptica y una marcada anisotropía óptica. Ejemplos representativos incluyen $KBe_2BO_3F_2$, $Ca_3(C_3N_3O_3)_2$ y β-$Sr_3(C_3N_3O_3)_2$ materiales que exhiben elevadas birrefringencias y destacadas respuestas de segundo armónico debido a la contribución de sus grupos aniónicos π-conjugados[12]. Los cristales ópticos no lineales desempeñan un papel fundamental en la tecnología láser moderna, particularmente en aplicaciones relacionadas con las regiones espectrales del infrarrojo medio y lejano. Entre estos materiales, los yodatos han despertado un interés considerable debido a sus estructuras cristalinas no centrosimétricas, su amplia ventana de transparencia óptica, sus destacadas respuestas ópticas no lineales de segundo orden y sus elevados umbrales de daño láser. Sin embargo, el desarrollo de nuevos materiales basados en yodatos representa un desafío importante, ya que estos compuestos presentan una tendencia natural a cristalizar en fases centrosimétricas termodinámicamente más estables, lo que dificulta la obtención de estructuras macroscópicas no centrosimétricas adecuadas para aplicaciones ópticas no lineales[12]. Las arquitecturas π-conjugadas constituyen elementos fundamentales en el diseño de materiales funcionales debido a sus características electrónicas particulares. Estas estructuras se distinguen principalmente por presentar una geometría plana o cuasi plana y por la existencia de sistemas de electrones π deslocalizados distribuidos en orbitales orientados perpendicularmente al plano molecular. Como consecuencia de esta deslocalización electrónica, las unidades π-conjugadas suelen exhibir elevadas hiperpolarizabilidades y una mayor anisotropía de polarizabilidad en comparación con estructuras no conjugadas. La incorporación de grupos π-conjugados en materiales cristalinos permite aprovechar estas propiedades electrónicas para mejorar la respuesta óptica no lineal del sistema. En particular, esta estrategia ha favorecido el diseño y la síntesis de nuevos yodatos con respuestas significativas de SHG y valores adecuados de birrefringencia[12].

Materiales híbridos

Los materiales híbridos orgánico-inorgánicos combinan las ventajas de sus componentes en una sola estructura. El componente orgánico aporta flexibilidad, facilidad de procesamiento y la posibilidad de incorporar diversos grupos funcionales, mientras que el componente inorgánico proporciona resistencia mecánica, rigidez estructural y estabilidad térmica. Como resultado, estos materiales presentan propiedades complementarias que les confieren un amplio potencial para aplicaciones tecnológicas avanzadas. La clasificación de los materiales híbridos puede realizarse considerando diferentes criterios, tales como el grado de mezcla entre las fases, tiempo de reacción, el tipo de matriz empleada y el método de síntesis utilizado. Sin embargo, debido a la gran diversidad estructural y composicional de estos sistemas, actualmente no existe una clasificación universalmente aceptada[13]. La síntesis de materiales híbridos puede llevarse a cabo mediante diversas estrategias, entre las que destacan los métodos sol-gel, la polimerización *in situ*, el mezclado físico (*blending*), el autoensamblaje y los métodos hidrotermales o solvotermales. Independientemente de la ruta de preparación empleada, uno de los principales objetivos es controlar la geometría, el tamaño y la distribución espacial de las partículas o dominios presentes en el material. Para ello, es necesario ajustar cuidadosamente las condiciones de síntesis, los factores cinéticos y termodinámicos, así como las restricciones espaciales del sistema, con el fin de obtener estructuras a escala nanométrica y controlar la organización de los agregados formados[13]. La amplia diversidad estructural que pueden presentar los materiales híbridos orgánico-inorgánicos constituye una de sus principales ventajas. La presencia de grupos funcionales en el componente orgánico favorece su interacción con la fase inorgánica, permitiendo la generación de nuevas propiedades y funcionalidades que no se encuentran en los materiales individuales. Mediante una selección adecuada de los componentes orgánicos e inorgánicos, así como un control preciso de su organización molecular, es posible diseñar materiales con características específicas, tales como una mayor resistencia mecánica, estabilidad térmica mejorada y propiedades ópticas ajustables. Debido a esta versatilidad, los materiales híbridos han atraído una atención creciente en diversas áreas de investigación, ya que permiten combinar las ventajas de ambos componentes en una sola estructura funcional. En particular, ciertos compuestos orgánicos conductores resultan especialmente atractivos para la preparación de materiales híbridos, debido a su capacidad para transportar portadores de carga a través de sistemas de electrones π deslocalizados. Estas características los convierten en materiales de interés para aplicaciones relacionadas con el almacenamiento de energía, la electrónica y los dispositivos[14].

PARTE EXPERIMENTAL

Síntesis del 3-(4-penteniloxi)benzonitrilo (PBN) por reacción de Williamson.

Se realizó una mezcla de 3-cianofenol (2.48 g, 0.02 mol), 5-bromo-1-penteno (2.5 g, 0.017 mol), acetona (50 mL) y carbonato de potasio anhidro (3.55 g, 0.025 mol), se puso a reflujo por 24 h con agitación constante a una temperatura de 50 °C, el esquema de reacción se muestra en la Figura 1. La mezcla de la reacción se puso en agua, se descartó la acetona y la fase acuosa se obtuvo con éter (5 ml, 4X). La fase de éter se lavó con hidróxido de potasio acuoso (2 M, 10 ml, 7X), agua (5 ml, 4X) y salmuera saturada (5 ml, 2X) y luego se secó usando sulfato de sodio anhidro (1 gramo). La eliminación del éter debe resultar en un aceite de color amarillo pálido, que se purifica por destilación a presión reducida[15].

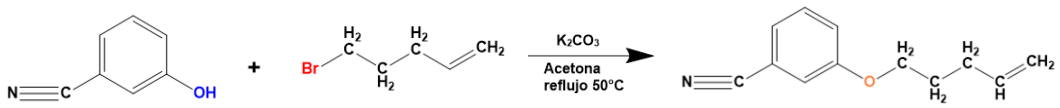


Figura 1. Esquema de reacción de 3-(4′-penteniloxi)benzonitrilo (realizado en Chemdraw).

Síntesis de 3-[(5-(diclorometilsilil)pentil)oxi] benzonitrilo (DCN) por hidrosililación.

Se calentó una mezcla de PBN (0.98 g, 0.005 mol), ácido cloroplatínico en solución de tetrahidrofurano (THF) (0.122 M, 3 gotas), tolueno (5 mL) y diclorometilsilano (0.52 mL, 0.005 mol) a una temperatura de 40-50 °C por 16 h, el esquema de reacción se muestra en la Figura 2. Terminada la reacción, la mezcla de reacción se dejó enfriar y el sólido que se obtuvo se disolvió en tolueno

hirviendo, se filtró (bajo N_2), se concentró y se dejó en atmósfera inerte hasta su cristalización[16]. El tolueno se secó sobre sulfato de sodio anhidro, se agitó vigorosamente durante 2 min y posteriormente se centrifugó para separar el agente secante.

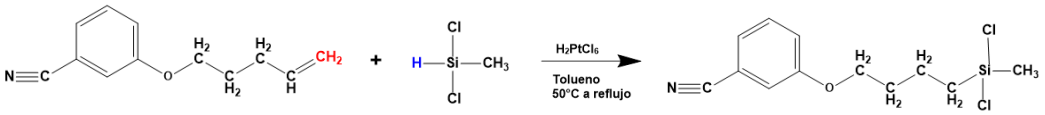


Figura 2. Esquema de reacción de 3-[(5-(diclorometilsilil)pentil)oxi]benzonitrilo (realizado en chemdraw)

RESULTADOS

Precursor PBN

El precursor PBN presenta características físicas de un líquido aceitoso de color amarillo pálido con un rendimiento de 60.40 % y una densidad de aproximada de 1.0539 g/ml. En la Figura 3 se muestra el espectro de infrarrojo medio de PBN, donde se visualizan las señales de estiramiento del grupo nitrilo (CN) (2), enlace doble del grupo vinilo (C=C) (4), grupo metileno de la cadena alifática (CH_2) (5), señales del enlace entre el carbono y el hidrógeno (C–H) del anillo aromático (1) y del enlace entre el carbono y el hidrógeno (C–H) del grupo vinílico, estas dos últimas solapadas, y más importante las señales de los enlaces éter alifático (3) a 1096 cm^{-1} y aril éter (3) a 1260 cm^{-1} que evidencian la formación del enlace entre los compuestos 3-cianofenol y 5-bromopenteno[17-18].

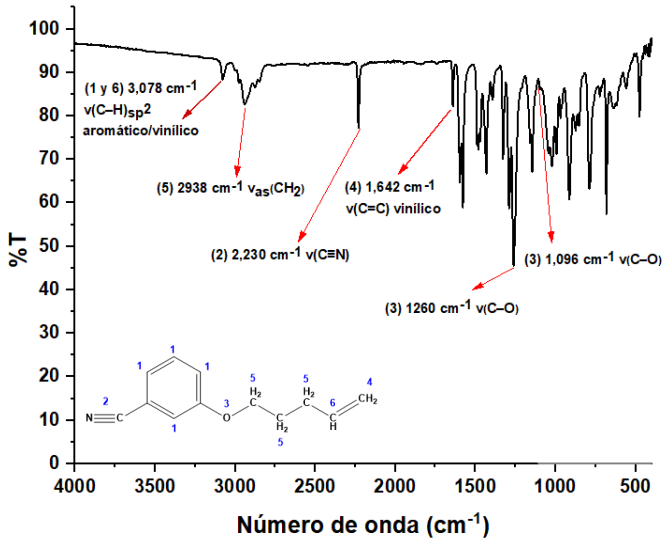


Figura 3. Espectro FT-IR de infrarrojo medio del precursor PBN (procesado en Origin y estructura molecular elaborada en ChemDraw).

Producto DCN

El producto DCN presenta características físicas de un líquido viscoso de color café claro con un rendimiento de 22.64 %. El espectro de infrarrojo medio de DCN se muestra en la Figura 4, en la cual se observan señales de heredadas de PBN como del anillo aromático (1), nitrilo (2), metilénicas (5), aril éter (3) y éter alifático que aparece solapada por la señal del enlace Si-O. Las señales nuevas son debido al estiramiento del enlace Si-Cl (8), también del movimiento de flexión del enlace Si-CH_2 (9) la cual aparece como una intensificación de la señal en 781 cm^{-1} y que sugiere la formación del enlace entre el precursor PBN y el diclorometilsilano, la señal Si-C (7) del enlace Si-CH_3 solapada con la señal aril éter (3), también se presenta la señal Si-O la cual no se numera ya que esta es generada por la polimerización indeseada de DCN por la humedad ambiental[19-22].

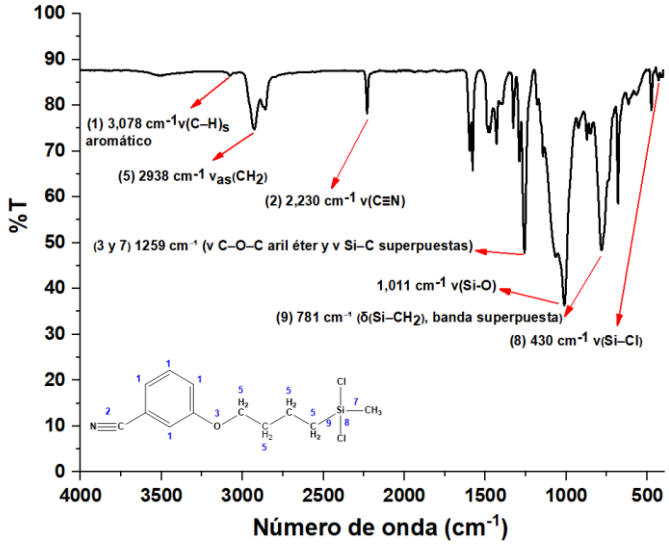


Figura 4. Espectro FT-IR del producto DCN (procesado en Origin y estructura molecular elaborada en ChemSketch).

CONCLUSIONES

Los compuestos PBN y DCN se obtuvieron como líquidos aceitosos y viscoso respectivamente, característica asociada a la unión del grupo silano a PBN. El análisis por espectroscopía IR permitió la caracterización de ambas moléculas mediante la identificación de sus grupos funcionales y tipos de enlaces. En el caso del PBN, se observaron señales correspondientes al grupo nitrilo, al anillo aromático, a la cadena alifática y principalmente al enlace aril éter y éter alifático que sugiere la formación del enlace entre los reactivos utilizados y con ello la obtención de PBN.

Para el compuesto DCN se mantienen las señales del grupo nitrilo, el anillo aromático, la cadena alifática, éter alifático y aril éter compartidas con el precursor PBN. La aparición de nuevas señales relacionadas al silicio como Si-Cl y Si-C y más importante la señal del enlace Si–CH_2 sugiere la formación del enlace entre el precursor PBN y el diclorometilsilano, adicionalmente la desaparición del del grupo vinilo, sin embargo, la señal Si–O en sugiere la polimerización parcial de DCN por humedad. En conjunto, el análisis físico y espectroscópico respalda la formación en el producto final en coexistencia con su equivalente polimerizado.

BIBLIOGRAFÍA

1. Kumari, M., Vijayan, N., Nayak, D., Vij, M., Vashishtha, P., Nimanpure, S., Gupta, G., Jewariya, M., & Pant, R. P. (2022). Synthesis growth and studies on optical, thermal and terahertz analyses of bulk size sodium acid phthalate single crystal: a metal–organic material for nonlinear optical applications. Journal of Thermal Analysis and Calorimetry, 1-9.
2. Methamem, M., Slimi, S., Jendoubi, I., Castelló, J. B. C., Zid, M. F., Mateos, X., & Bourguiba, N. F. (2023). Structural study, spectroscopic characterization, DFT calculations and electrical properties of manganese (II) organic-inorganic hybrid material $(C_8H_{14}N_2)_2[MnCl_4(H_2O)_2]Cl_2$. Journal of Molecular Structure, 1278, 134894.
3. Anwar, A., Hussain, R., Khan, M. U., Yaqoob, J., Bourass, M., & Alhokbany, N. (2023). Surface functionalization of sulflower with superhalogens Doping to achieve robustly large nonlinear optical response: interactive design computation of new NLO materials for modern Electro-Optic applications. Polycyclic Aromatic Compounds, 1-22.
4. Shi, R., Han, X., Xu, J., & Bu, X. H. (2021). Crystalline porous materials for nonlinear optics. *Small*, *17*(22), 2006416.
5. Shi, J., Feng, S., He, P., Fu, Y., & Zhang, X. (2023). Nonlinear optical properties from engineered 2D materials. *Molecules*, *28*(18), 6737.

6. Li, B., Yu, Y., Xin, M., Xu, J., Zhao, T., Kang, H., ... & Jiang, S. (2023). Second-order nonlinear optical properties of copper-based hybrid organic–inorganic perovskites induced by chiral amines. *Nanoscale*, *15*(4), 1595-1601.
7. Zhang, J. X., Ran, M. Y., Wu, X. T., Lin, H., & Zhu, Q. L. (2023). An overview of Mg-based IR nonlinear optical materials. *Inorganic Chemistry Frontiers*, *10*(18), 5244-5257.
8. Zheng, Y., Guan, J., Cheng, P., Han, W., Xu, J., & Bu, X. H. (2023). Second-order nonlinear optical organic crystals based on a “click” compound. *Journal of Materials Chemistry C*, *11*(20), 6724-6729.
9. Haq, S., Khalid, M., Braga, A. A. C., Alhokbany, N., & Chen, K. (2025). Design and evaluation of indacenothienothiophene based functional materials for second and third order nonlinear optics properties via DFT approach. *Scientific Reports*, *15*(1), 13262.
10. Feng, S., Wu, S., Zhang, W., Liu, F., & Wang, J. (2024). Organic Electro-Optic Materials with High Electro-Optic Coefficients and Strong Stability. Molecules (Basel, Switzerland), 29(13), 3188.
11. Liu, R., Wu, H., Yu, H., Hu, Z., Wang, J., & Wu, Y. (2022). Cd4InO (BO3) 3: A New Nonlinear Optical Crystal Exhibiting Strong Second Harmonic Generation Effect and Moderate Birefringence. *Crystals*, *12*(2), 266.
12. Kang, Y., Hu, C. L., Zhang, C. C., & Mao, J. G. (2026). Recent progress in iodate based nonlinear optical crystals. *Chemical Science*.
13. Cao, J., Wang, M., Zheng, L., Zhu, Y., Wang, J., Xiao, M., She, Y., & El-Aty, A. M. A. (2022). Recent progress in organic–inorganic hybrid materials as absorbents in sample pretreatment for pesticide detection. Critical Reviews in Food Science and Nutrition, 63(31), 10880-10898.
14. Nikshitha, M., Sudhakara, S. M., & Shetty, M. S. (2025). Organic-inorganic hybrids: A comprehensive review on synthesis and their potential applications. *Materials Chemistry and Physics*, *331*, 130181.
15. Trejo-Durán, M., Alvarado-Méndez, E., Estudillo-Ayala, J. M., Sukhoivanov, I., Martínez-Richa, A., Valencia-Loredo, C. E., & Castaño, V. M. (2008). Physico-chemical Characterization of 4-(4Pentenyloxy)Benzonitrile. Molecular Crystals and Liquid Crystals, 489(1), 148-474.
16. Subramaniam, G., & Gilpin, R. K. (1990). Synthesis and characterization of the liquid-crystalline side-chain polymer 4’-cyano-4-(pentyloxy)stilbene polysiloxane. Macromolecules, 23(3), 693-697.
17. Nandiyanto, A. B. D., Ragadhita, R., & Fiandini, M. (2023). Interpretation of Fourier transform infrared spectra (FTIR): A practical approach in the polymer/plastic thermal decomposition. *Indonesian Journal of Science and Technology*, *8*(1), 113-126.
18. Yang, L., & Yuan, Y. (2025). Functional group characteristics of coal treated with clean biomass surfactant via FTIR spectroscopy. *Scientific Reports*, *15*(1), 18676.
19. Al-Amin, K., Kawsar, M., Mamun, M. T. R. B., & Hossain, M. S. (2025). Fourier transform infrared spectroscopic technique for analysis of inorganic materials: a review. *Nanoscale Advances*, *7*(21), 6677-6702.
20. Wang, Y., Gong, J., Pei, X., He, L., Huang, Z., & Huang, Q. (2022). Preparation of liquid polycarbosilane containing vinyl ether group and its rapid curing through thiol-ene click reaction. *Journal of the American Ceramic Society*, *105*(12), 7122-7131.
21. Pérez-Román, B., Del Real, A. M., Rubio, J., Mazo, M. A., & Rubio-Marcos, F. (2024). Innovative strategies for nitrogen-incorporating silicon oxycarbide-based preceramic polymer synthesis. *Materials Advances*, *5*(5), 2040-2056.
22. Kapustin, R. V., Grinvald, I. I., Vorotyntsev, A. V., Petukhov, A. N., Pryakhina, V. I., & Vorotyntsev, I. V. (2022). Oxidation of chlorosilanes by atmospheric air in thin layers. *Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis*, *135*(2), 835-846.

ESTUDIO COMPARATIVO DE ELEMENTOS QUÍMICOS EN MUESTRAS DE AGUA DE LA ZONA DE LOS BITZALES, TABASCO, HÁBITAT DEL MANATÍ DEL CARIBE (*Trichechus Manatus*), 2018–2024

Noemi Monserrato Goñi Vera[1], Hermicenda Pérez Vidal[2], María Antonia Lunagómez Rocha[3], Ciro Eliseo Márquez Herrera[4]

[1,2,3] Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, [4]Universidad Nacional Autónoma de México.
232A28002@alumno.ujat.mx

RESUMEN

Los recursos hídricos enfrentan presiones crecientes por el aumento poblacional, la variabilidad climática (sequías e inundaciones) y las actividades agropecuarias en zonas ribereñas. El río Bitzal (≈31.48 km) atraviesa la zona conocida como Los Bitzales conformada por siete secciones ribereñas en Macuspana, Tabasco, la cual también forma parte del hábitat del manatí del Caribe (*Trichechus manatus*), especie en riesgo (NOM-059-SEMARNAT-2010). En 2018 ocurrió una mortandad de manatíes, lo que motivó el seguimiento de condiciones ambientales en sitios ribereños. Este estudio compara, de manera exploratoria, las concentraciones de metales en muestras de agua recolectadas a lo largo del río Bitzal en sitios asociados al evento de 2018, con un monitoreo posterior en 2024. Se analizaron 12 sitios en 2018 y 16 en 2024. Las muestras fueron cuantificadas sin filtración previa mediante espectrometría de emisión óptica con plasma acoplado inductivamente (ICP-OES, PerkinElmer Avio 500), determinando concentraciones totales que se contrastaron con los Criterios Ecológicos CE-CCA-001/89 (protección de vida acuática y fuente de abastecimiento) y con la NOM-127-SSA1-2021 como referencia sanitaria, considerando el uso directo del agua del río por la población. Las concentraciones promedio cuantificables en mg/L se obtuvieron de los siguientes elementos, en 2018: Sr (1.084) > Al (1.083) > Ba (0.093) > Mn (0.083) > Ni (0.045) > Li (0.004). En 2024: Sr (0.27) > Ba (0.027) > Al (0.009) > Ni (0.007) > Li (0.005) > Mn (0.004). En 2018 se registraron valores promedio más altos de Al y Ni, lo que se asocia con una mayor carga de material en suspensión y condiciones que incrementan el transporte de partículas en el río. En 2024, ambos elementos disminuyeron de forma notable, lo que sugiere una mejora relativa para estos parámetros. Sin embargo, aunque Ba se redujo en 2024, se mantuvo como un componente de atención desde la perspectiva ecológica, lo que indica la persistencia de presiones químicas potencialmente relevantes para el ecosistema acuático. En conjunto, los resultados presentan una variación temporal que puede influir en los usos locales del río y en la integridad del hábitat asociado, resaltando el carácter cambiante de las condiciones ambientales en Los Bitzales.

INTRODUCCIÓN

Los recursos hídricos continentales enfrentan presiones crecientes derivadas del aumento poblacional, la variabilidad climática y las actividades antropogénicas desarrolladas en zonas ribereñas, las cuales pueden modificar la calidad del agua y favorecer la incorporación de elementos potencialmente tóxicos al ambiente acuático (Ali et al., 2019; Briffa et al., 2020; Tchounwou et al., 2012). En ecosistemas tropicales, estas alteraciones representan un riesgo para la estabilidad ecológica y para las especies asociadas a dichos sistemas.

El río Bitzal, ubicado en la región de Los Bitzales en Macuspana, Tabasco, constituye un sistema ribereño de importancia ecológica por formar parte del hábitat del manatí del Caribe (*Trichechus manatus*), especie catalogada en riesgo conforme a la NOM-059-SEMARNAT-2010 (Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales, 2010; Olivera-Gómez et al., 2022; Ramírez-Jiménez et al., 2017). En 2018 se registró una contingencia ambiental relacionada con la mortandad de manatíes en esta región, lo que impulsó el seguimiento de las condiciones ambientales y la evaluación de la calidad del agua en sitios asociados al evento.

En este contexto, el presente estudio compara las concentraciones de elementos químicos en muestras de agua recolectadas en el río Bitzal durante 2018 y 2024 mediante espectrometría de emisión óptica con plasma acoplado inductivamente (ICP-OES), con el propósito de evaluar la variación temporal de la calidad química del agua y su posible implicación ambiental en un ecosistema acuático de relevancia ecológica.

MATERIALES Y MÉTODOS

El estudio se realizó en la zona de Los Bitzales, ubicada en el municipio de Macuspana, Tabasco, a lo largo del río Bitzal. Se compararon muestras de agua recolectadas en dos periodos: 2018 y 2024. Las muestras de 2018 correspondieron a sitios asociados con el evento de mortandad de manatíes registrado en la zona, mientras que en 2024 se realizó un nuevo muestreo en sitios previamente evaluados y se incorporaron puntos adicionales considerando las condiciones ambientales y características hidrológicas observadas durante la campaña.

En total se analizaron 12 muestras de agua correspondientes al año 2018 y 16 muestras del año 2024. Los sitios de muestreo fueron georreferenciados mediante coordenadas UTM y representados cartográficamente utilizando el software QGIS versión 3.34.0. (Figura 1). Las muestras fueron recolectadas de manera compuesta en recipientes de polietileno de alta densidad y posteriormente analizadas sin filtración previa, con el fin de determinar concentraciones totales de elementos químicos presentes en la matriz acuosa. (Figura 2)

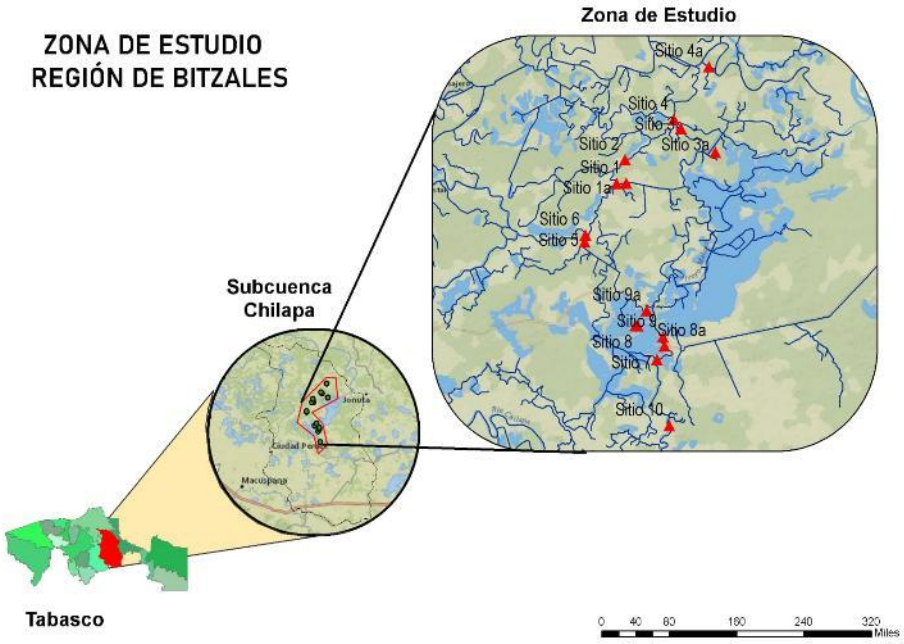


Figura 1. Macrolocalización de la zona de muestreo. País: México; Estado: Tabasco; Municipio: Macuspana



Figura 2. Toma de muestras de agua 2024

La cuantificación elemental se llevó a cabo mediante espectrometría de emisión óptica con plasma acoplado inductivamente (ICP-OES), técnica ampliamente utilizada para la determinación de metales en agua, utilizando un equipo PerkinElmer Avio 500 (Figura 3).

Los resultados fueron expresados en mg/L y se enfocaron en los elementos con concentraciones cuantificables en ambos periodos de estudio. Para la evaluación ambiental, las concentraciones obtenidas se compararon con los Criterios Ecológicos de Calidad del Agua CE-CCA-001/89, en relación con protección de vida acuática y fuente de abastecimiento, así como con la NOM-127-SSA1-2021 como referencia sanitaria para agua de uso y consumo humano.

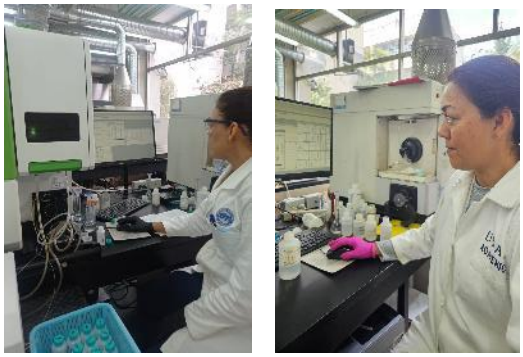


Figura 3. Análisis ICP-OES

Finalmente, se realizó una comparación temporal entre los años 2018 y 2024 mediante gráficas de barras y análisis descriptivo de la distribución de concentraciones. Para los elementos normados de mayor relevancia ambiental se elaboraron gráficas comparativas frente a los valores de referencia establecidos en CE-CCA-001/89 y NOM-127-SSA1-2021. Asimismo, se generó un gráfico tipo boxplot para evaluar la dispersión de los datos entre años y visualizar la variabilidad espacial de las concentraciones en los sitios de muestreo.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Las concentraciones cuantificables de elementos químicos en las muestras de agua del río Bitzal mostraron diferencias entre los años evaluados. En 2018, las concentraciones más altas correspondieron a Sr y Al, seguidas de Ba, Mn, Ni y Li. En 2024, Sr se mantuvo como el elemento con mayor concentración, seguido de Ba, Al, Ni, Li y Mn. La comparación temporal mostró una disminución notable de Al, Mn y Ni en 2024 respecto a 2018, mientras que Ba también presentó reducción, aunque permaneció como un elemento de interés ambiental por su presencia en ambos años de estudio (Figura 4).

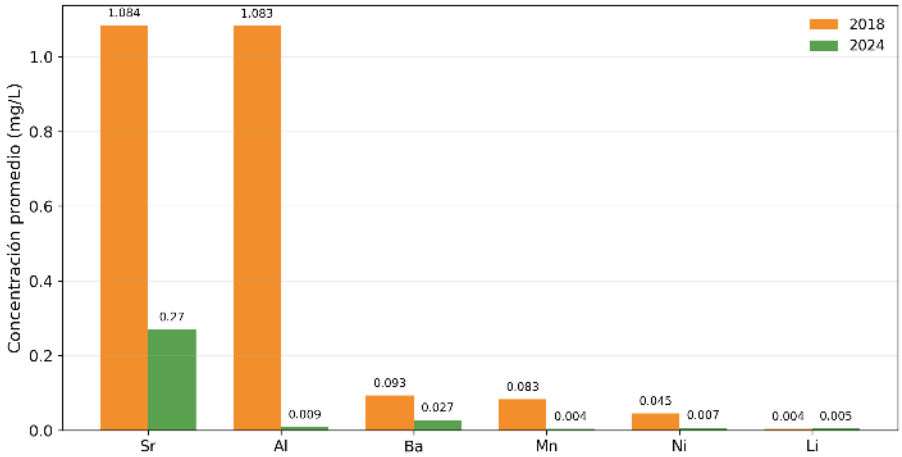


Figura 4. Comparación de concentraciones promedio de elementos químicos entre 2018 y 2024.

Al contrastar los elementos normados con los Criterios Ecológicos de Calidad del Agua CE-CCA-001/89, se observó que Al y Ni en 2018 superaron los valores de referencia considerados para calidad del agua, particularmente desde una perspectiva ecológica. En 2024, las concentraciones de estos elementos disminuyeron considerablemente, lo que sugiere una mejora relativa en la calidad química del agua para dichos parámetros. No obstante, la presencia persistente de Ba indica la necesidad de mantener su seguimiento en monitoreos posteriores, especialmente por la importancia ecológica del sistema ribereño de Los Bitzales (Figura 5).

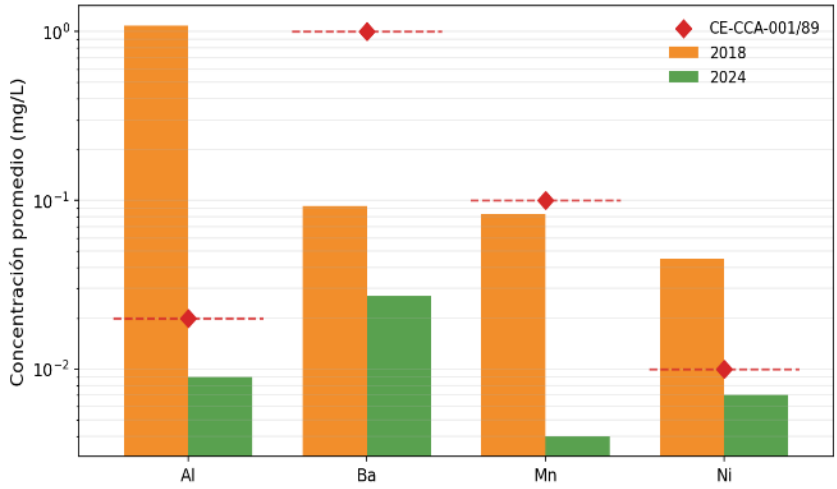


Figura 5. Comparación de concentraciones promedio con CE-CCA-001/89

Respecto a la NOM-127-SSA1-2021, utilizada como referencia sanitaria debido al uso directo del agua por la población local, las concentraciones registradas para los elementos evaluados se mantuvieron dentro de los límites permisibles establecidos para agua de uso y consumo humano.

Este resultado sugiere que, desde el enfoque sanitario de dicha norma, las concentraciones observadas no representan excedencias para los elementos considerados; sin embargo, la evaluación ecológica continúa siendo relevante debido a la sensibilidad ambiental del área de estudio y a su papel como hábitat del manatí del Caribe (*Trichechus manatus*) (Figura 6).

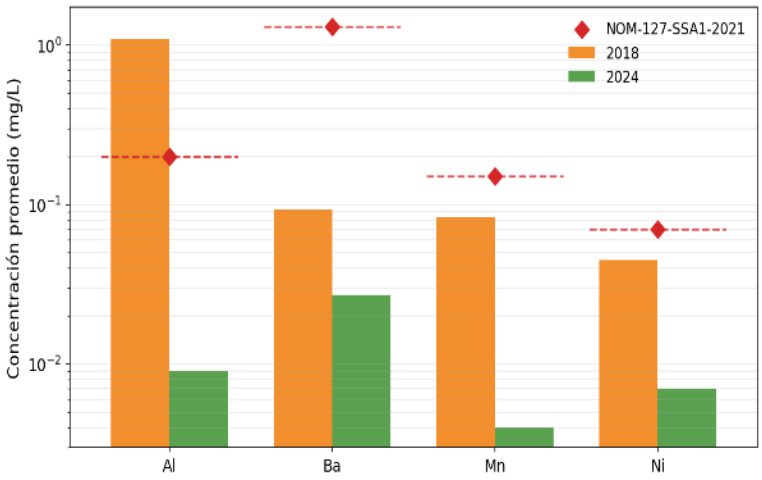


Figura 6. Comparación de concentraciones promedio con NOM-127-SSA1-2021

El análisis estadístico mediante boxplot evidenció una mayor dispersión de las concentraciones en 2018, particularmente para Al y Mn, lo que indica una mayor variabilidad espacial entre los sitios de muestreo. En contraste, los valores registrados en 2024 fueron más homogéneos y, en general, menores para la mayoría de los elementos evaluados. Este comportamiento puede relacionarse con cambios en las condiciones ambientales del sistema fluvial, así como con diferencias en el transporte de material particulado y la disponibilidad de elementos en la columna de agua (Figura 7).

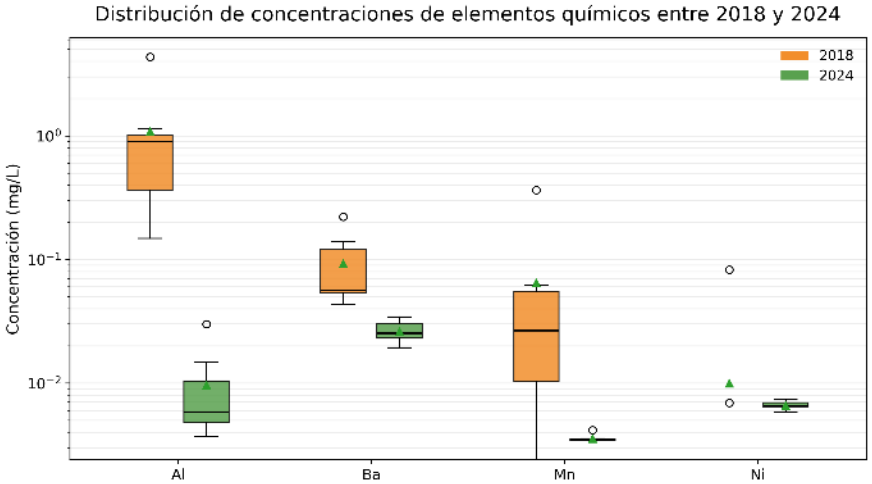


Figura 7. Diagrama de caja y bigotes – resultados generales (2018 vs 2024)

En conjunto, los resultados muestran una variación temporal en la composición química del agua del río Bitzal entre 2018 y 2024. La disminución de Al, Ni y Mn en 2024 representa un cambio favorable respecto a los valores observados en 2018; sin embargo, la persistencia de elementos como Ba resalta la importancia de continuar con el monitoreo ambiental en la región. Estos hallazgos son relevantes considerando que Los Bitzales constituye un ecosistema de importancia ecológica asociado al hábitat del manatí del Caribe y al uso local del recurso hídrico.

CONCLUSIONES

Los resultados evidencian una variación temporal en la composición química del agua del río Bitzal entre 2018 y 2024. En 2018 se registraron mayores concentraciones de Al y Ni, así como una mayor dispersión espacial de algunos elementos, lo que sugiere condiciones más heterogéneas en los sitios evaluados.

En 2024, las concentraciones de Al, Ni y Mn disminuyeron considerablemente y mostraron una distribución más homogénea entre sitios. Aunque Ba también presentó reducción, su presencia en ambos años lo mantiene como elemento de interés ambiental.

La comparación con CE-CCA-001/89 permitió identificar posibles implicaciones ecológicas, mientras que los valores contrastados con NOM-127-SSA1-2021 se mantuvieron dentro de los límites de referencia sanitaria.

Estos hallazgos resaltan la importancia de continuar el monitoreo ambiental en Los Bitzales, por tratarse de un sistema ribereño asociado al hábitat del manatí del Caribe (*Trichechus manatus*).

BIBLIOGRAFÍA

1. Ali, H., Khan, E., & Ilahi, I. (2019). Environmental chemistry and ecotoxicology of hazardous heavy metals: Environmental persistence, toxicity, and bioaccumulation. *Journal of Chemistry, 2019*, Article 6730305. https://doi.org/10.1155/2019/6730305
2. American Public Health Association, American Water Works Association, & Water Environment Federation. (2017). *Standard methods for the examination of water and wastewater* (23rd ed.). American Public Health Association.
3. Briffa, J., Sinagra, E., & Blundell, R. (2020). Heavy metal pollution in the environment and their toxicological effects on humans. *Heliyon, 6*(9), e04691. https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e04691
4. Chowdhury, S., Mazumder, M. A. J., Al-Attas, O., & Husain, T. (2016). Heavy metals in drinking water: Occurrences, implications, and future needs in developing countries. *Science of the Total Environment, 569–570*, 476–488. https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2016.06.166
5. Flores, C. M., Del-Angel, E., Frías, D. M., & Gómez, A. L. (2018). Evaluación de parámetros fisicoquímicos y metales pesados en agua y sedimento superficial de la Laguna de las Ilusiones, Tabasco, México. *Tecnología y Ciencias del Agua, 9*(2), 33–47. https://doi.org/10.24850/j-tyca-2018-02-02
6. Gutiérrez, R. L., Rubio-Arias, H., Quintana, R., Ortega, J. A., & Gutiérrez, M. (2008). Heavy metals in water of the San Pedro River in Chihuahua, Mexico and its potential health risk. *International Journal of Environmental Research and Public Health, 5*(2), 91–98. https://doi.org/10.3390/ijerph5020091
7. Musálem-Castillejos, K., Laino-Guanes, R., Bello-Mendoza, R., González-Espinoza, M., & Ramírez-Marcial, N. (2018). Water quality of the Grijalva River on the Chiapas–Tabasco border. *Ecosistemas y Recursos Agropecuarios, 5*(13), 55–64. https://doi.org/10.19136/era.a5n13.1334
8. Olivera-Gómez, L. D., Jiménez-Domínguez, D., Morales-Vela, B., & García-Herrera, J. L. (2022). Distribución espacial del manatí en la planicie costera del sur del Golfo de México. *Ecosistemas y Recursos Agropecuarios, 9*(2), e3144. https://doi.org/10.19136/era.a9n2.3144
9. Ramírez-Jiménez, H. H., Olivera-Gómez, L. D., & de la Cueva, H. (2017). Habitat use by the Antillean manatee (*Trichechus manatus*) during an extreme dry season in an urban lake in Tabasco, Mexico. *Therya, 8*(1), 19–26. https://doi.org/10.12933/therya-17-411
10. Secretaría de Desarrollo Urbano y Ecología. (1989). *Acuerdo por el que se establecen los Criterios Ecológicos de Calidad del Agua CE-CCA-001/89*. Diario Oficial de la Federación.
11. Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. (2010). *Norma Oficial Mexicana NOM-059-SEMARNAT-2010, Protección ambiental–Especies nativas de México de flora y fauna silvestres–Categorías de riesgo y especificaciones para su inclusión, exclusión o cambio–Lista de especies en riesgo*. Diario Oficial de la Federación.

12. Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales, Dirección General de Impacto y Riesgo Ambiental. (2012). *Gaceta ecológica: Separata DGIRA/030/12*. Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales.
13. Secretaría de Salud. (2022). *Norma Oficial Mexicana NOM-127-SSA1-2021, Agua para uso y consumo humano. Límites permisibles de la calidad del agua*. Diario Oficial de la Federación.
14. Tchounwou, P. B., Yedjou, C. G., Patlolla, A. K., & Sutton, D. J. (2012). Heavy metal toxicity and the environment. En A. Luch (Ed.), *Molecular, clinical and environmental toxicology* (Vol. 3, pp. 133–164). Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-7643-8340-4_6
15. United States Environmental Protection Agency. (1994). *Method 200.7: Determination of metals and trace elements in water and wastes by inductively coupled plasma-atomic emission spectrometry* (Revision 4.4). United States Environmental Protection Agency.

EVALUACIÓN DE LA RESISTENCIA ANTIMICROBIANA EN PROBIÓTICOS MÉDICOS

Alejandra Diaz de León Velázquez[1], Rubén Octavio Méndez Márquez[2], Rosalinda Gutiérrez Hernández[2]

[1]Programa Académico de Químico Farmacéutico Biólogo, Unidad Académica de Ciencias Químicas. [2]Programa Académico de Nutrición, Unidad Académica de Enfermería. Universidad Autónoma de Zacatecas "Francisco García Salinas"

42100949@uaz.edu.mx

RESUMEN

La resistencia antimicrobiana representa una problemática prioritaria de salud pública debido al incremento de microorganismos resistentes y al riesgo de diseminación de genes de resistencia entre bacterias. En este contexto, los probióticos médicos, utilizados ampliamente en el manejo de trastornos gastrointestinales y frecuentemente administrados junto con antibióticos, han sido objeto de interés científico por su posible papel como reservorios de determinantes genéticos de resistencia[1]. Se llevó a cabo una revisión bibliográfica estructurada mediante la búsqueda sistemática de literatura científica en bases de datos especializadas como PubMed, Scopus y ScienceDirect. Se incluyeron artículos originales, estudios de secuenciación genómica y revisiones científicas enfocadas en la caracterización del resistoma en cepas probióticas de uso médico. Los criterios de selección consideraron publicaciones con análisis molecular de genes de resistencia, evaluación de susceptibilidad antimicrobiana y descripción de la localización genética de dichos determinantes. El análisis cualitativo de la evidencia mostró que diversas cepas pertenecientes a los géneros *Lactobacillus, Bifidobacterium y Bacillus* presentan resistencia frente a antibióticos como tetraciclinas, macrólidos, aminoglucósidos y cloranfenicol. En la mayoría de los estudios revisados, los genes asociados a resistencia se localizaron en regiones cromosomales, lo que sugiere un carácter intrínseco con bajo potencial de transferencia horizontal. No obstante, también se documentó la presencia de elementos genéticos móviles, como plásmidos y transposones, asociados a determinantes de resistencia en ciertas cepas, lo que implica un riesgo potencial de transferencia en el entorno intestinal[1]. Asimismo, los lineamientos regulatorios internacionales enfatizan la necesidad de evaluar de manera específica la susceptibilidad antimicrobiana de cada cepa antes de su comercialización[2]. En conjunto, la evidencia analizada demuestra que, si bien los probióticos médicos comercializados cumplen generalmente con criterios de seguridad, existe variabilidad en sus perfiles de resistencia antimicrobiana. La caracterización molecular sistemática del resistoma constituye una herramienta esencial para garantizar su seguridad terapéutica y contribuir a la prevención de la diseminación de genes de resistencia en el contexto clínico.

INTRODUCCIÓN

La resistencia antimicrobiana (RAM) constituye una de las principales amenazas para la salud pública a nivel mundial debido al incremento acelerado de microorganismos resistentes y la disminución de la eficacia terapéutica de diversos antibióticos utilizados en la práctica clínica. La Organización Mundial de la Salud (OMS) ha señalado que la RAM representa un problema critico asociado al uso indiscriminado de antimicrobianos, la automedicación y la capacidad adaptativa de las bacterias para desarrollar mecanismos de supervivencia frente a diferentes agentes terapéuticos. Como consecuencia, múltiples infecciones bacterianas presentan actualmente mayores dificultades de tratamiento, incremento en los costos hospitalarios y aumento en la mortalidad asociada a enfermedades infecciosas.

Los mecanismos de resistencia bacteriana pueden desarrollarse de manera intrínseca o adquirida. Entre los principales mecanismos descritos se encuentran la modificación del sitio blanco del antibiótico, la producción de enzimas inactivadoras, la disminución de la permeabilidad celular y la expulsión activa de antimicrobianos mediante bombas de eflujo. Además, la transferencia horizontal

de genes de resistencia a través de elementos genéticos móviles, como plásmidos y transposones, favorece la diseminación de determinantes genéticos entre distintas especies bacterianas, contribuyendo significativamente a la propagación de la resistencia antimicrobiana en diferentes entornos clínicos y ambientales.

En este contexto, los probióticos médicos han adquirido gran relevancia, debido a sus beneficios potenciales sobre la microbiota intestinal y la salud humana. Los probióticos son microorganismos vivos que, administrados en cantidades adecuadas, pueden conferir beneficios al huésped, principalmente en el tratamiento y prevención de trastornos gastrointestinales. Diversas cepas bacterianas pertenecientes a géneros como *Lactobacillus, Bifidobacterium y Bacillus* son utilizadas frecuentemente como coadyuvantes terapéuticos, especialmente durante tratamientos antibióticos, diarreas asociadas a infecciones gastrointestinales y alteraciones del microbiota intestinal.

Sin embargo, el creciente uso clínico de probióticos bacterianos ha generado interés científico respecto a la posible presencia de mecanismos de resistencia anti microbiana en algunas cepas comercializadas. Diversos estudios han reportado la identificación de genes asociados a resistencia frente a tetraciclinas, macrólidos, aminoglucósidos y otros grupos antimicrobianos en bacterias probióticas de uso médico. Aunque en muchos casos dichos genes presentan localización cromosomal y bajo potencial de transferencia horizontal. También se ha documentado la presencia de elementos genéticos móviles capaces de favorecer la transferencia de determinantes de resistencia dentro del tracto gastrointestinal.

Entre los probióticos médicos de interés clínico destacan especies pertenecientes a los géneros *Bacillus*, particularmente *Bacillus clausii y Bacillus coagulans,* debido a su capacidad de formar esporas resistentes a condiciones ambientales adversas y sobrevivir al tránsito gastrointestinal. Estas características favorecen su estabilidad farmacéutica y su uso frecuente en formulaciones comerciales utilizadas como auxiliares terapéuticos en alteraciones gastrointestinales. No obstante, debido a la importancia clínica de estos en nuestro organismo, resulta fundamental evaluar preliminarmente sus propiedades de susceptibilidad antimicrobiana y analizar su posible participación como reservorios de genes de resistencia bacteriana.

Por lo anterior, la evaluación fenotípica de susceptibilidad antimicrobiana representa una herramienta relevante para el análisis preliminar de la seguridad microbiológica de probióticos médicos de uso clínico, la aplicación de técnicas como la difusión en disco permite establecer perfiles iniciales de susceptibilidad frente a antibióticos de importancia clínica y generar información útil para futuras investigaciones relacionadas con resistencia antimicrobiana en microorganismos probióticos.

TEORÍA

Resistencia antimicrobiana

La resistencia antimicrobiana (RAM) representa una de las principales problemáticas de salud pública a nivel mundial, debido al incremento de microorganismos resistentes y la disminución de la eficacia terapéutica de diversos antibióticos. Este fenómeno ocurre cuando ciertas bacterias desarrollan la capacidad de sobrevivir o multiplicarse en presencia de agentes antimicrobianos que anteriormente resultaban efectivos para inhibir su crecimiento.

Las bacterias pueden presentar mecanismos de resistencia intrínsecos o adquiridos, entre los cuales destacan la modificación del sitio blanco del antibiótico, la producción de enzimas inactivadoras, la disminución de permeabilidad celular y la expulsión activa de antimicrobianos mediante bombas de eflujo. Asimismo, la transferencia horizontal de genes de resistencia a través de elementos genéticos móviles, como plásmidos y transposones, contribuye a la diseminación de la resistencia bacteriana en distintos entornos clínicos y ambientales.

El incremento de la resistencia antimicrobiana (RAM) se encuentra asociado al uso indiscriminado de antibióticos en medicina humana, veterinaria y producción animal, así como la automedicación y

el incumplimiento de tratamientos terapéuticos. Estas prácticas favorecen la presión selectiva sobre las bacterias, promoviendo la supervivencia y proliferación de microorganismos resistentes.

Actualmente organismos internacionales como la Organización Mundial de la Salud (OMS) consideran a la resistencia antimicrobiana una amenaza crítica para la salud pública, debido al aumento de infecciones difíciles de tratar, prolongación de estancias hospitalarias y mayor riesgo de mortalidad asociado a enfermedades infecciosas.

Transferencia de genes de resistencia

La transferencia horizontal de genes constituye uno de los principales mecanismos involucrados en la diseminación de la resistencia antimicrobiana entre bacterias. Este proceso permite el intercambio de material genético mediante elementos móviles con plásmidos, transposones e integrones, favoreciendo la propagación de determinantes de resistencia en distintos entornos microbiológicos.

La presencia de genes de resistencia localizados en elementos genéticos móviles representa un riego potencial, debido a su capacidad de transferirse entre diferentes especies bacterianas, especialmente en ambientes con alta presión antibiótica, como el tracto gastrointestinal. Por ello, el estudio de microorganismos utilizados con fines terapéuticos, como los probióticos médicos, han adquirido relevancia en investigaciones relacionadas con seguridad microbiológica y resistencia antimicrobiana.

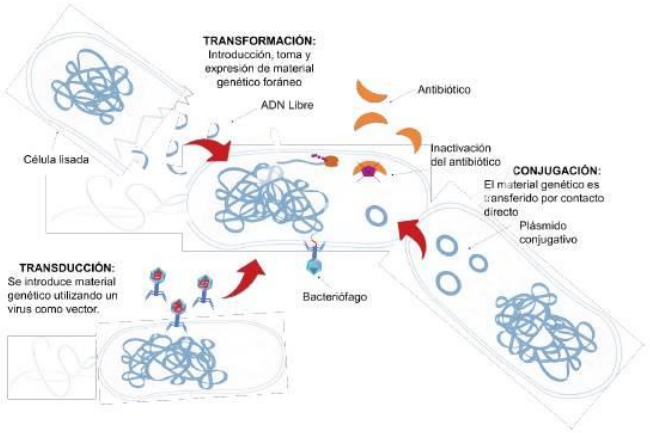


Figura 1. Mecanismos de transferencia de material genético a bacterias. Tomado de (Fernández R., 2020)

Probióticos médicos

Los probióticos son microorganismos vivos que, administrados en cantidades adecuadas, pueden conferir beneficios de la salud del huésped, principalmente mediante el mantenimiento y equilibrio del microbiota intestinal. Diversas bacterias pertenecientes a géneros como *Lactobacillus, Bifidobacterium y Bacillus* son utilizadas ampliamente como coadyuvantes terapéuticos en trastornos gastrointestinales, diarreas asociadas al uso de antibióticos y alteraciones del microbiota intestinal.

Probióticos del género *Bacillus*

Las especies bacterianas pertenecientes al género Bacillus han adquirido importancia en el desarrollo de probióticos médicos debido a su capacidad de formar esporas resistentes a condiciones ambientales adversas, lo que favorece su estabilidad farmacéutica y supervivencia durante el tránsito gastrointestinal. Entre las especies de mayor interés clínico destacan *Bacillus clausii y Bacillus coagulans*, utilizadas en formulaciones comerciales destinadas al tratamiento complementario de trastornos gastrointestinales y alteraciones asociadas al uso de antibióticos.

Bacillus clausii ha sido ampliamente utilizado como probiótico debido a su capacidad para resistir condiciones ácidas y contribuir al equilibrio del microbiota intestinal. Por otro lado, *Bacillus coagulans* destaca por su estabilidad térmica y capacidad de producir ácido láctico, características que

favorecen su aplicación en productos farmacéuticos y terapéuticos. Debido a su uso clínico frecuente, estas especies han sido objeto de interés en estudios relacionados con perfiles de susceptibilidad antimicrobiana y seguridad microbiológica.

Evaluación fenotípica de susceptibilidad antimicrobiana

La evaluación fenotípica de susceptibilidad antimicrobiana constituye una herramienta importante para el análisis preliminar de perfiles de resistencia bacteriana. Entre las metodologías más utilizadas se encuentra técnica de difusión en disco o método Kirby-Bauer, la cual permite evaluar la sensibilidad bacteriana mediante la observación de halos de inhibición generados alrededor de discos impregnados con antibióticos.

La interpretación de los resultados obtenidos se realiza con base en criterios establecidos por organismos internacionales como el Clinical and Laboratory Standards Institute (CLSI) y la European Food Safety Authority (EFSA), los cuales permiten estandarizar la evaluación microbiológica de diferentes microorganismos. En el caso de probióticos médicos, la evaluación fenotípica resulta relevante para analizar preliminarmente la susceptibilidad antimicrobiana de cepas bacterianas utilizadas con fines terapéuticos y contribuir al estudio de su seguridad microbiológica.

PARTE EXPERIMENTAL

Se seleccionaron probióticos médicos comercializados que contenían cepas pertenecientes a *Bacillus clausii y Bacillus coagulans*. Posteriormente, las muestras fueron reactivadas en agar nutritivo y agar MRS bajo condiciones de incubación a 37°C durante 24-48 horas, con la finalidad de obtener colonias aisladas para su evaluación microbiológica.

Como parte del proceso de identificación bacteriana, se utilizó la plataforma de ABIS Online (https://www.abisonline.eu/) como herramienta de apoyo para la interpretación de perfiles bioquímicos y orientación en la identificación preliminar de las cepas probióticas evaluadas. Con base en los resultados obtenidos mediante la plataforma, se consideró la aplicación de pruebas bioquímicas y fenotípicas para contribuir a la confirmación de las características metabólicas bacterianas.

Posteriormente, se preparó el inoculó bacteriano ajustándolo al estándar 0.5 de McFarland. La evaluación preliminar de susceptibilidad antimicrobiana se realizó mediante la técnica de difusión en disco en agar Mueller-Hinton utilizando multidisco para bacterias Gram positivas. Los multidiscos contenían antibióticos de importancia clínica frecuentemente empleados en pruebas de susceptibilidad antimicrobiana, entre ellos ampicilina, eritromicina, clindamicina, etc.

Finalmente, las placas se incubaron a 37°C durante 24 horas y se realizó la observación y medición preliminar de halos de inhibición como referencia inicial del comportamiento fenotípico de las cepas frente a los antibióticos evaluados.

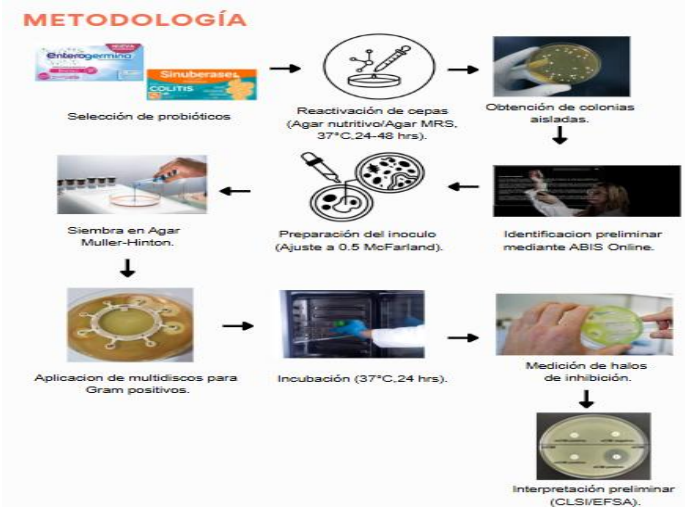


Diagrama 1. Síntesis de la metodología experimental implementada en el estudio. Fuente propia.

RESULTADOS

Los resultados obtenidos en la evaluación fenotípica demuestran que las cepas probióticas analizadas exhiben patrones variables de resistencia antimicrobiana frente a antibióticos de uso clínico habitual. Las imágenes de las cajas de Petri correspondientes a las pruebas de halos de inhibición (Figura 2) y al método de susceptibilidad en pocillo horadado en agar (Figura 3) revelan la ausencia de halos significativos o halos de diámetro reducido alrededor de múltiples discos o pocillos, lo que indica resistencia a varios agentes antimicrobianos evaluados. Esta resistencia se observó de manera preliminar ya en las pruebas iniciales de susceptibilidad (Figura 5), confirmando la robustez de los hallazgos.

El adecuado crecimiento bacteriano observado en los medios de agar convencionales (Figura 4) valida la viabilidad y la capacidad de colonización de estas cepas bajo condiciones de cultivo estándar, un requisito indispensable para su uso como probióticos médicos. Sin embargo, la coexistencia de esta buena capacidad de desarrollo con perfiles de resistencia a antibióticos relevantes representa un aspecto de doble filo. Por un lado, la resistencia puede conferir una ventaja ecológica a las cepas probióticas, permitiéndoles sobrevivir en el tracto gastrointestinal durante tratamientos antibióticos combinados, lo cual podría potenciar su efecto terapéutico protector. Por otro lado, plantea interrogantes sobre la seguridad microbiológica, ya que la transferencia horizontal de genes de resistencia desde probióticos a patógenos comensales u oportunistas podría incrementar el problema global de la resistencia antimicrobiana.

Estos hallazgos coinciden con reportes previos que han documentado resistencia intrínseca o adquirida en especies comúnmente utilizadas como probióticos (como *Lactobacillus* spp. y *Bifidobacterium* spp.) a antibióticos β-lactámicos, tetraciclinas y aminoglucósidos. La metodología fenotípica empleada (difusión en pocillo y discos) proporciona una evaluación práctica y reproducible, aunque se recomienda complementar estos resultados con estudios genotípicos (PCR para detección de genes tet, erm, bla, etc.) y ensayos de conjugación para determinar el potencial de transferencia de dichas resistencias.



Figura 2. Halos de inhibición de probióticos.

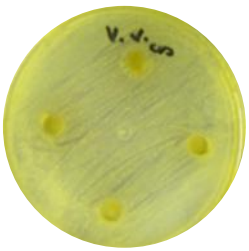


Figura 3. Susceptibilidad antimicrobiana preliminar.

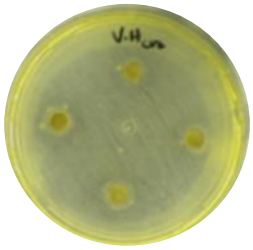


Figura 4. Crecimiento bacteriano en agar.



Figura 5. Evaluación fenotípica con multidisco.

CONCLUSIONES

Los resultados preliminares obtenidos permitieron establecer las condiciones iniciales para la evaluación fenotípica de susceptibilidad antimicrobiana en probióticos médicos pertenecientes a los géneros y especies de *Bacillus clausii y Bacillus coagulans.* Asimismo, la aplicación de técnicas microbiológicas y herramientas de identificación bacteriana contribuyó al desarrollo experimental del estudio y a la obtención de observaciones preliminares relacionadas con el comportamiento de las cepas frente a antibióticos de importancia clínica. Del mismo modo y aunque las cepas evaluadas cumplen con los criterios básicos de viabilidad y crecimiento, su perfil de resistencia antimicrobiana sugiere la necesidad de una selección más estricta de cepas probióticas destinadas a uso médico. La implementación de protocolos de cribado sistemático de resistencia, tal como recomienda la EFSA (European Food Safety Authority) y la OMS (Organización Mundial de la Salud), resulta imperativa antes de su incorporación en formulaciones terapéuticas. Futuras investigaciones deberán enfocarse en la caracterización molecular de los mecanismos de resistencia y en la evaluación de la estabilidad de estos perfiles bajo condiciones simuladas de uso clínico.

BIBLIOGRAFÍA

1. Gueimonde M, Sánchez B, de los Reyes-Gavilán CG, Margolles A. Antibiotic resistance in probiotic bacteria. Front Microbiol. 2013; 4:202.
2. EFSA Panel on Additives and Products or Substances used in Animal Feed (FEEDAP). Guidance on the assessment of bacterial susceptibility to antimicrobials of human and veterinary importance. EFSA Journal. 2012;10(6):2740.
3. Sanders ME, Akkermans LMA, Haller D, Hammerman C, Heimbach J, Hörmannsperger G, et al. Safety assessment of probiotics for human use. Gut Microbes. 2010;1(3):164-185.
4. Clinical and Laboratory Standards Institute (CLSI). Performance standards for antimicrobial susceptibility testing. CLSI supplement M100. Wayne, PA: CLSI; 2023.
5. Fernandez Rodriguez, R. E., Bolivar-Anillo, H., Hoyos Turcios, C., Carrillo Garcia, L., Serrano Hernandez, M., & ABDELLAH, E. (2020). Resistencia antibiótica: el papel del hombre, los animales y el medio ambiente. Salud Uninorte, 36(1), 298-324. https://doi.org/10.14482/sun.36.1.615

ANÁLISIS DEL DESARROLLO DE LA BIOPELÍCULA DE *Pestalotiopsis Clavispora*

Lérida Liss Flores-Villavicencio[1], José Francisco López-Pérez[1], José Pedro Castruita-Domínguez[2], Juan José Gil-Flores[1], Juan Luis Pichardo-Molina[3], Tanya E. S. Dahms[4], Julio César Villagómez-Castro[1]

[1]Departamento de Biología, DCNE campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato, [2]Departamento de Ecología Aplicada, CUCBA, Universidad de Guadalajara, [3]Centro de Investigaciones en Óptica A.C., [4]University of Regina.
llflores@ugto.mx

RESUMEN

Pestalotiopsis clavispora es un hongo fitopatógeno que pertenece a la familia *Amphisphaeriaceae*. Este grupo de hongos endófitos asexuales, se caracteriza morfologicamente por presentar conidios con cinco células provistos de apéndices apicales y basales. Las especies de este género colonizan diversos hábitats, que incluyen cuerpos de agua (lagos, ríos y océanos), así como el aire, el suelo y tejidos vegetales. *P. clavispora* causa varias enfermedades graves en el arándano (*Vaccinium corymbosum*), tales como manchas foliares, clorosis, necrosis en tallos jóvenes, muerte de ramillas terminales y cáncer; liberando conidios de color negro grisáceo al levantarse la corteza en los tallos. A nivel agrícola e industrial, las enfermedades causadas por este fitopatógeno son comunes y recurrentes en invernaderos, generando pérdidas económicas y por consiguiente un aumento en el costo de la producción. Por otra parte, la formación de biopelículas en algunos hongos fitopatógenos como *Phytophthora parasitica*, *Aspergillus fumigatus* y *Fusarium graminearum,* sugiere que dicha estructura protege a las células fúngicas de la respuesta de defensa de la planta durante el desarrollo de la enfermedad. Por lo tanto, el estudio de las biopelículas de hongos fitopatógenos, es relevante para establecer estrategias antifúngicas seguras y eficaces que garanticen la calidad del producto en las etapas de precosecha como de poscosecha. En este sentido, el objetivo del trabajo fue analizar la estructura de la biopelícula de *P. clavispora* para identificar los componentes clave que participan en su desarrollo. Para ello, se inocularon conidios en medio líquido papa-dextrosa y se incubarón a 28 ºC durante 0 – 96 h. Posteriormente, el desarrollo de la biopelícula se analizó mediante el ensayo de XTT y microscopia (contraste de fases, confocal con tinción de Blanco de Calcofluor y electrónica de barrido SEM-EDS). Los resultados indican que la adhesion del conidio a la superficie alcanza un 70 % desde la primera hora de incubación. El análisis morfológico reveló la diferenciación de conidio a micelio y la formación de un entramado micelial denso a partir de las 24 h. Por su parte, el análisis ultraestructural facilitó la observación de la matriz extracelular (MEC), elemento clave en las etapas de adhesión y diferenciación celular. La estructura de la biopelícula presenta hifas dispuestas paralelamente, lo cual le confiere estabilidad y resistencia mecanica a la estructura. Asimismo, se observó la presencia de canales de agua esenciales para el transporte de nutrientes, oxígeno y señales químicas; además con el micelio embebido en la MEC. Adicionalmente, el análisis elemental determinó la presencia de carbono, nitrógeno, oxígeno y fósforo; elementos esenciales en la estructura de proteínas, polisacáridos, ácidos nucleicos y lípidos, componentes clave de la MEC. Por lo que podemos concluir, que la secreción de estas sustancias poliméricas se sintetizan y remodelan durante el desarrollo de la biopelicula de *P. clavispora*. La comprensión profunda de la arquitectura de la biopelícula, permitirá dilucidar sus propiedades fisicoquímicas y, por consiguiente, entender los mecanismos de patógenicidad asociados a este microorganismo.

INTRODUCCIÓN

Arándano azul, un fruto con alto impacto económico en México

La agricultura es un sector clave en México, con 2.34 millones de hectareas dedicadas a la produción de cultivos y la participación de 5.6 millones de personas. Esto permite al país destacar como el 11º productor agrícola a nivel mundial (Servicio de Información Agroalimentaria y Pesquera, SIAP 2024). En este sentido, México tiene un gran potencial en la producción y exportación de frutos, un sector

que contribuye significativamente a su economía y sociedad. Destacando el creciente interes por los arándanos (blueberries), *Vaccinum spp*., cuya demanda global ha crecido exponencialmente gracias a los beneficios para la salud. Esta tendencia representa una oportunidad para el país de fortalecer su posición en el mercado internacional (Li, L. *et al*. 2016; Sater, H. M. *et al*. 2020; Varo, M. A. *et al*. 2022). Cabe resaltar, que estos frutos tienen un gran valor nutricional gracias a su bajo contenido de azúcar y a su alta concentración de antioxidantes, fibra y vitamina A (SIAP, 2020, Silva S. *et al.* 2020). Dichas características, le confieren propiedades antiinflamatorias, antialérgicas, antiulcerosas, entre otras; lo cual impulsa su demanda y su valor en el mercado nacional e internacional (Sater, H. M. *et al*. 2020; Varo, M. A. *et al*. 2022; Song, G. Q. 2015; Wang, H. *et al*., 2017; Yuan, B. Z. *et al*., 2021). En el caso del Arándano azul (*Vaccinium corymbosum*), México ocupa el 5º lugar como país productor a nivel mundial, con una producción anual de 80,133 toneladas (Fig.1) y una derrama economica importante para el país (SIAP, 2025).



Figura 1. Producción de arándano en el país (Tomado de El Panorama Agroalimentario 2025, Secretaría de Agricultura y Desarrollo Rural, Gobierno de México).

El complejo de *Pestalotiopsis*, un nuevo problema fúngico

Pestalotiopsis spp. pertenece a la familia *Amphisphaeriaceae*, son hongos endófitos asexuales y su morfología se caracteriza por presentar conidios con cinco células, apéndices apicales y basales (Yang, X. L. *et al*. 2012; Zhao, D. *et al*. 2021). Algunos de los hábitats en donde se pueden encontrar las especies de este género son lagos, ríos, océanos, aire y suelo (Wu C. *et al*. 2022). Actualmente, se han aislado e identificado 457 especies de *Pestalotiopsis,* reportadas en el Index Fungorum (2026). Estas especies de *Pestalotiopsis* causan diversas enfermedades, como el tizón foliar y de las ramillas, la necrosis foliar, las manchas foliares, la pudrición del fruto, la sequedad floral, la muerte regresiva en ramas y cáncer de tallo; ademas de problemas poscosecha de los frutos (Wu C., *et al*., 2022). En este contexto, las enfermedades causadas por *Pestalotiopsis* spp. se han convertido en una grave amenaza para la producción de diferentes cultivos, por ejemplo, la mancha foliar producida por *P. microspora*, es una de las principales enfermedades fúngicas en la producción de arándanos (*Vaccinium corymbosum* L.) ya que puede provocar la muerte de la planta (Yi-Lan, J. *et al*., 2021). Además, se ha reportado en zonas productoras de arándanos, la presencia de hasta cuatro especies de *Pestalotiopsis* que se aislaron de plantas con signos de mancha foliar y cáncer de tallo, causado por *P. clavispora* (G.F. Atk.) Steyaert, (renombrado como *Neopestalotiopsis clavispora* por Maharachchikumbura *et al*., 2014) (57,14 %), *P. trachicarpicola* (28,57 %), *P. chamaeropis* (13,19 %) y en un menor porcentaje a *P. adusta* (1,10 %) (Zheng X., *et al.* 2023).

A nivel agrícola e industrial, la enfermedad causada por este hongo fitopatógeno es común y recurrente en invernaderos, dadas las condiciones de temperatura y alta humedad relativa, siendo condiciones idóneas y propicias para el desarrollo y la propagación de este fitopatógeno (Cisternas E. *et al*. 2009); ocasionando grandes pérdidas ecónomicas y por consiguiente un incremento en el costo de la producción (Hernández-Ceja, A. *et al*. 2021).

Biopelículas de fitopatógenos

La biopelícula es una comunidad de microorganismos embebidos en una matriz extracelular (MEC) o sustancias polímericas extracelulares, capaces de adherirse a superficies abioticas y bioticas. Además, las biopelículas fúngicas se caracterizan por estructuras complejas, rodeadas por una matriz polimérica que consiste en polisacáridos, lípidos, proteínas y ácidos nucleicos extracelulares, lo que les confiere protección contra diversos factores ambientales y de estrés (Fanning S., 2012; Shay R. *et al*., 2022). Pese a que las biopelículas se han estudiado ampliamente en patógenos fúngicos de humanos, su desarrollo y estructura en patógenos de plantas, así como su papel en la patogenicidad, son poco conocidos (Shay R. *et al*., 2022). Diferentes nichos ecológicos, desde ambientes acuáticos hasta la rizosfera, presentan condiciones que modulan la formación de biopelículas y su morfología (Motaung T.E. *et al*., 2020). Sin embargo, se ha reportado que el proceso básico de formación de biopelículas parece conservarse entre los hongos (Harding *et al*., 2010). En este sentido, la comparación de biopelículas fúngicas en plantas *in vitro* e *in planta* (Harding *et al.* 2010), se lleva a cabo en un modelo de seis etapas (Harding *et al.* 2009). En general, el ciclo de vida de una biopelícula implica la adhesión a una superficie, la colonización y el crecimiento acompañado de la producción de MEC, donde las células establecen una base para la formación de una estructura tridimensional multicapa (3D), lo que conlleva a la etapa de la maduración. Dicha etapa, es esencial para la integridad estructural de la biopelícula y la resistencia a factores externos; además del soporte estructural, dado por la MEC junto con las adhesinas de superficie, modulan las interacciones célula-célula dentro de la biopelícula, contribuyendo a la arquitectura de la estructura 3D. Finalmente, la dispersión parcial, etapa en la que se generan células fúngicas asexuales, principalmente conidios que pueden reiniciar un nuevo ciclo (Fig. 2) (Gulati M y Nobile CJ., 2016; Sánchez Herrera R. *et al*., 2021, Vichi S.I., *et al.* 2025).

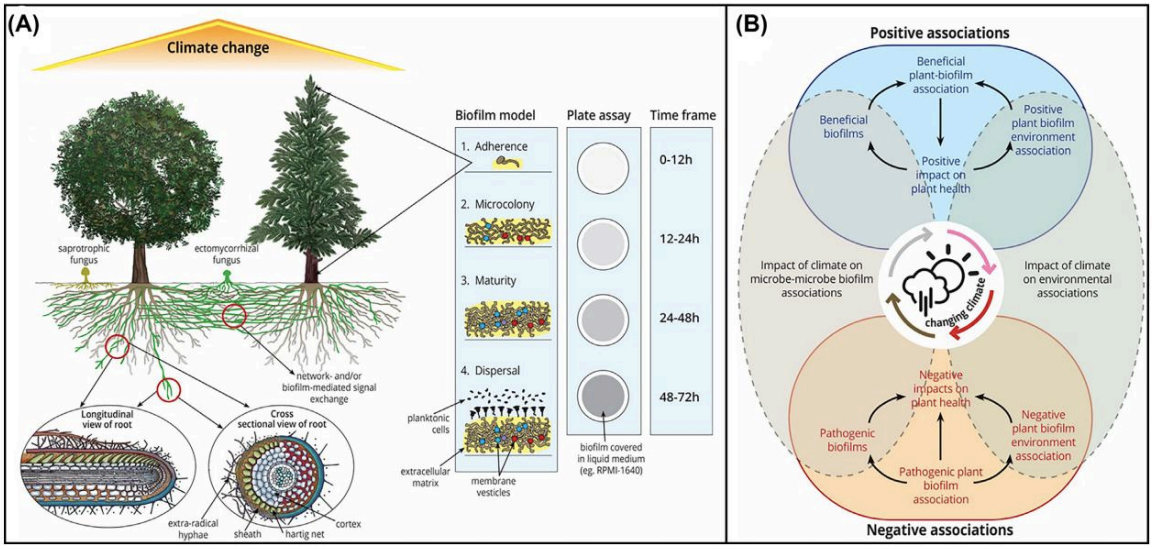


Figura 2. Modelo representativo de las biopelículas fúngicas asociadas a las plantas y su interacción compleja con el cambio climático. (A) Las biopelículas formadas en diversas superficies de las plantas, incluidas en los tejidos de las raíces, se pueden estudiar siguiendo un "modelo de biopelícula" típico (adherencia → microcolonia → madurez → dispersión) Harding et al. (2017). Aún no está claro si este modelo es válido para la formación de biopelículas en la rizosfera. La formación de biopelículas *in vitro* utilizando un simple "ensayo en placa" y en un medio de crecimiento líquido

como Roswell Park Memorial Institute (RPMI) 1640 (o caldo de dextrosa de papa/sabouraud con 2 % de glucosa) puede tardar hasta 72 h en alcanzar la madurez y la dispersión. (B) Diagrama esquemático teórico, que muestra el papel del clima y el medio ambiente en la influencia de las asociaciones de biopelículas fúngicas en beneficio o patógenas con las plantas. Es probable que estas asociaciones sean complejas y, en combinación con un clima cambiante, pueden influir positiva o negativamente en la salud de las plantas ("asociaciones positivas" y "asociaciones negativas", respectivamente) (Tomado de Motaung T.E. *et al*., 2020).

Estudios de la formación de biopelículas en algunos hongos fitopatógenos como *Phytophthora parasitica*, *Aspergillus fumigatus* y *Fusarium graminearum,* sugieren que dicha estructura protege a las células fúngicas de la respuesta de defensa de la planta durante el desarrollo de la enfermedad (Shay R. *et al*., 2022). Por lo tanto, el estudio de las biopelículas de hongos fitopatógenos, es relevante para establecer estrategias antifúngicas seguras y eficaces que garanticen la calidad del producto en las etapas de precosecha como de poscosecha.

PARTE EXPERIMENTAL

Obtención de conidios de *P. clavispora*

Se cultivó *P. clavispora* en medio agar papa-dextrosa (PDA) a 28 °C durante 7-15 días para la obtención de los conidios. Las características macroscópicas se realizarón en un microscopio estereoscopio (Nikon modelo C-PS) y las características microscópicas mediante microscopía de campo claro y tinción con Blanco de Calcofluor en microscopia de fluorescencia (Leica DMLS). Los conidios fuerón cuantificados en una cámara de Neubawer.

Análisis del desarrollo de la biopelícula de *P. clavispora*

Se sembraron $1x10^5$ conidios/mL en microplacas de 6 pozos (Corning Costar) en medio de cultivo líquido Papa-Dextrosa. Posteriormente, se incubaron a 28 ºC durante 0 – 72 h. Previamente, se retiraron los conidios no adheridos a 1 h de incubación. Despues, se incubaron y cada 24 h, se determinarón los siguientes parametros, que a continuación se describen.

Determinación de la actividad metabólica

La actividad metabólica se realizó por el método de XTT (2,3-bis (2-metoxi-4-nitro-5-sulfofenil)-2-h-tetrazolium-5-carboxanilide), el cual se basa en la reducción de la sal a cristales de formazan, proceso llevado a cabo por las mitocondrias de las células viables. La solución de XTT (Sigma) se preparó con 0.25 mg/mL en Menadiona (Sigma) al 0.1 mM y se añadierón 100 μL a la biopelícula en los diferentes tiempos (0 - 72 h), posteriormente, se incubó por 90 min a 37 °C en oscuridad y se midió la absorbencia a 490 nm (Espectrofotómetro Epoch Biotek).

Determinación de la Biomasa

La capacidad de la formación de la biopelícula se evaluó a través de la cuantificación de la biomasa total mediante la tinción con cristal violeta. Para ello, la biopelícula (0 – 72 h), se fijó con metanol al 99 % por 15 min, posteriormente, se dejó secar a temperatura ambiente y se adicionó el cristal violeta al 0.01% por 5 min, transcurrido el tiempo se adicionó a la biopelícula ácido acético al 33 % y al sobrenadante recuperado se determinó la absorbencia a 570 nm (Espectrofotómetro Epoch Biotek).

Determinación de la estructura de la biopelícula

Para caracterizar la formación de la biopelícula, los conidios ($1x10^5$ conidios/mL) de *P. clavispora* fuerón sembrados en cubreobjetos de 22x22 mm en medio papa-dextrosa y posteriormente se incubaron a los diferentes tiempos (0 - 96 h). En cada tiempo las muestras se analizarón en microscopia de campo claro y fluorescencia, para ello, se tiñerón con Calcofluor W2R (0.2 % p/v, Sigma-Aldrich), un fluorocromo que tiñe quitina y celulosa para la determinación de la estructura de la biopelícula. Las preparaciones fuerón montadas con SlowFade™ Diamond Antifade Mountant con DAPI (4',6-diamidino-2-phenylindole, Thermo Fisher Scientific) y se observaron en un microscopio de epifluorescencia (Leica, DMLS) con una cámara AxioCam ICc1 (Carl Zeiss) o en un microscopio confocal (Microscopio Zeiss LSM 710 NLO).

Determinación de la ultraestructura de la biopelícula

La ultraestructura de la biopelícula se analizó mediante microscopía electrónica de barrido; las muestras se fijaron con glutaraldehído al 3 % en amortiguador de cacodilato de sodio 0.1 M a pH 7.4 postfijación con tetraóxido de osmio, deshidratación con alcoholes y secado con HDMS. Montaje sobre cinta de carbono doble cara y recubrimiento con oro durante 100s. Finalmente las preparaciones fuerón observadas en un microscopio electrónico de barrido (JEOL modelo JSM6610LV OXFORD INSTRUMENTS).

RESULTADOS

El inicio del desarrollo de la biopelícula de *P. clavispora*, se realizó a partir de conidios maduros que fueron obtenidos de acervúlos (Fig. 3). Los conidios mostrarón un 70 % de adhesión a la superficie desde la primera hora de incubación, posteriormente, se observó la diferenciación del conidio a micelio con la formación de un entramado micelial denso a partir de las 24 horas (Fig. 4).

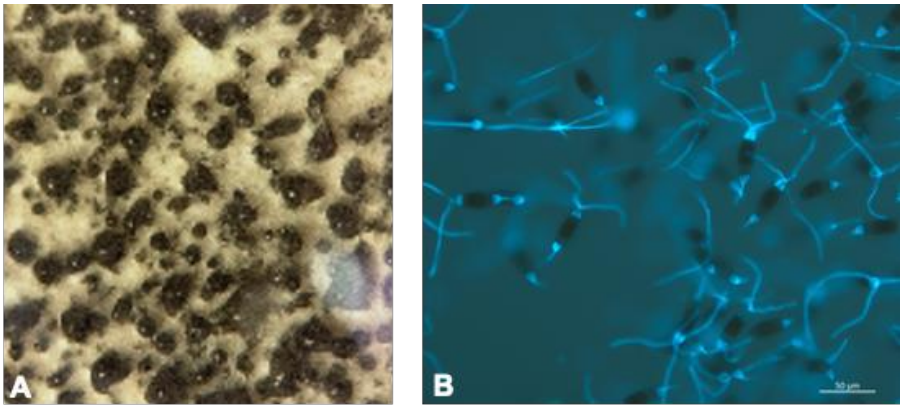


Figura 3. Acérvulos de un cultivo de 10 días de *P. clavispora* en Agar Papa-Dextrosa (A), Conidios pigmentados de melanina obtenidos de los acérvulos y teñidos con Blanco de Calcofluor (B), Barra= 50 μm.

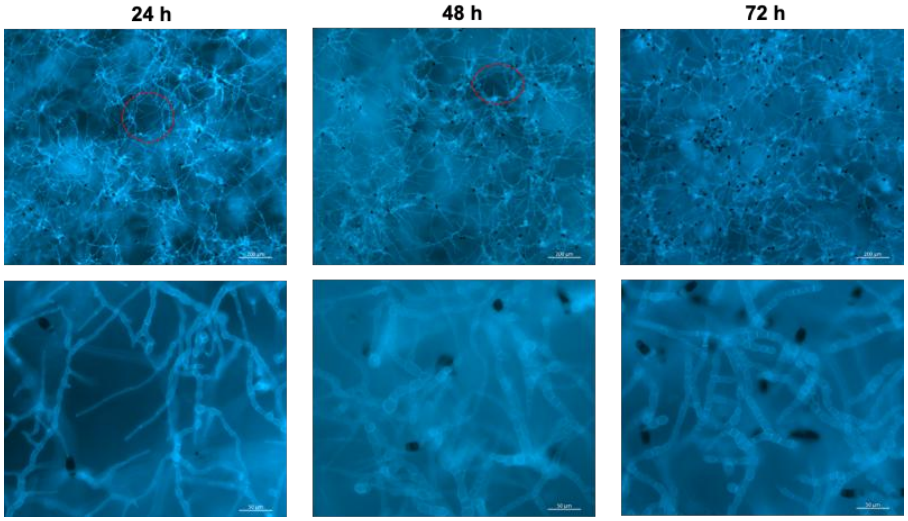


Figura 4. Análisis del crecimiento de *P. clavispora*. Tinción con blanco de calcofluor, los círculos indican la formación de canales de agua.

Aunado al análisis morfológico, se determinó la actividad metabólica, la cual se correlacionó directamente con el crecimiento micelial (biomasa) (Fig. 5). La biomasa fue observada mediante la tinción con cristal violeta, un colorante catiónico que se combina fuertemente con componentes celulares cargados negativamente, como es la pared celular de los hongos.

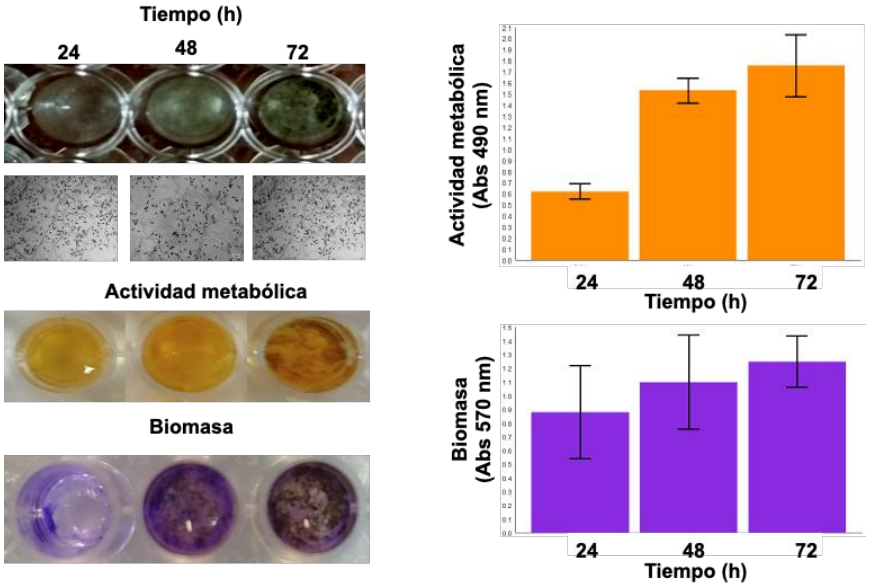


Figura 5. Determinación de la actividad metabólica y biomasa durante el desarrollo de la biopelícula.

Por otra parte, la estructura tridimensional de la biopelícula muestra la asociación de las hifas dentro del entramado micelial (Fig. 6) y el análisis de la ultraestructura (fig. 7), facilitó la observación del micelio embebido en la matriz extracelular (MEC), elemento clave en las etapas de adhesión y diferenciación celular. La estructura de la biopelícula presenta la disposición de las hifas confiriendo la estabilidad y resistencia mecanica a la estructura. Asimismo, se observó la presencia de canales de agua esenciales para el transporte de nutrientes, oxígeno y señales químicas.

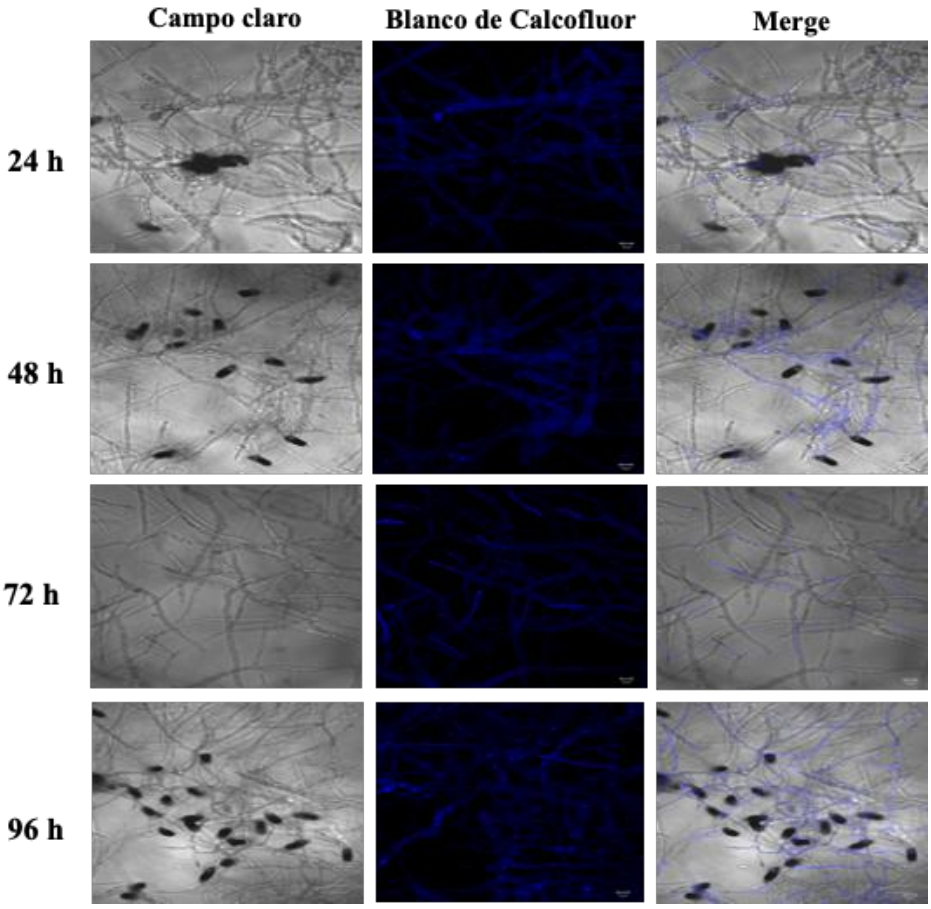


Figura 6. Análisis de la estructura tridimensional de la biopelícula de *P. clavispora* teñida con Blanco de Calcofluor. Barra = 10 μm.

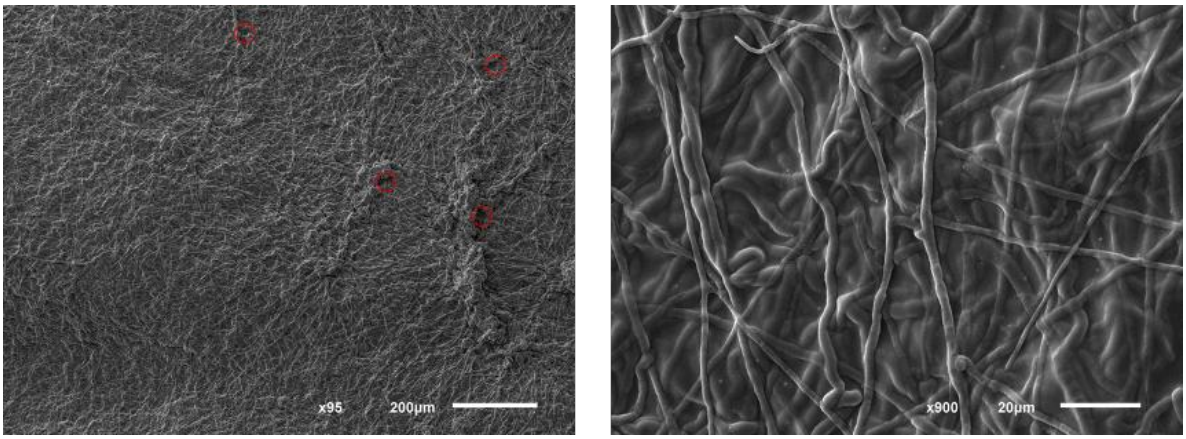


Figura 7. Análisis ultraestructural de la biopelícula de 72 horas. Presencia de canales de agua (círculos rojos) y micelio embebido en la matriz extracelular.

CONCLUSIONES

P. clavispora desarrolla una estructura tridimensional micelial, así como la secreción de matriz extracelular (sustancias polímericas). La comprensión profunda de la arquitectura de la biopelícula, permitirá dilucidar sus propiedades fisicoquímicas y, por consiguiente, entender los mecanismos de patógenicidad asociados a este hongo.

AGRADECIMIENTOS. Los autores agradecen al M en C. Abraham Gasca Venegas, por su asistencia en la microscopía confocal (Departamento de Biología, DCNE campus Guanajuato, Universidad de Guanajuato). El estudio se llevo a cabo con el financiamiento del Proyecto 386/2025, de la Convocatoria Institucional de Investigación Científica 2025 de la Universidad de Guanajuato, otorgado a L. L. Flores Villavicencio.

BIBLIOGRAFÍA

1. Servicio de Información Agroalimentaria y Pesquera, Secretaría de Agricultura y Desarrollo Rural. (2024). Panorama agroalimentario 2024. Lugar de publicación: https:// gob.mx/siap
2. L. Li, H. Zhang, Z. Liu, X. Cui, T. Zhang, Y. Li, & L. Zhang, "Comparative transcriptome sequencing and de novo analysis of *Vaccinium corymbosum* during fruit and color development" BMC plant biology, Vol. *16,* 1, 2016, pp. 1-9.
3. H. M. Sater, L. N. Bizzio, D. M. Tieman, & P. D. Muñoz, "A review of the fruit volatiles found in blueberry and other vaccinium species". *Journal of agricultural and food chemistry*, Vol. *68*, 21, 2020, pp. 5777-5786.
4. M. A. Varo, M. P. Serratosa, J. Martín-Gómez, L. Moyano, J. Mérida, J. "Influence of Fermentation Time on the Phenolic Compounds, Vitamin C, Color and Antioxidant Activity in the Winemaking Process of Blueberry (*Vaccinium corymbosum*) Wine Obtained by Maceration" Molecules, Vol. 27, 22, 2022, pp. 7744.
5. Servicio de Información Agroalimentaria y Pesquera. (2020). Panorama agroalimentario 2020, datos de un campo que avanza sin dejar a nadie atrás.
6. S. Silva, E. M. Costa, M. Veiga, R. M. Morais, C. Calhau, M. Pintado. "Health promoting properties of blueberries: a review", *Critical reviews in food science and nutrition*, Vol. 60, 2, 2020, pp. 181–200.
7. G. Q. Song, Blueberry (*Vaccinium corymbosum* L.). In *Agrobacterium Protocols* 2015, pp. 121-131. Springer, New York, NY.
8. H. Wang, X. Guo, X. Hu, T. Li, X. Fu, R. H. Liu, "Comparison of phytochemical profiles, antioxidant and cellular antioxidant activities of different varieties of blueberry (*Vaccinium*spp.)", Food chemistry, Vol. 217, 2017, pp. 773-781.
9. B. Z. Yuan, J. Sun, J. "Bibliometric analysis of blueberry (*Vaccinium corymbosum* L.) research publications based on Web of Science". Food Science and Technology, Vol. 42, 2021.
10. Servicio de Información Agroalimentaria y Pesquera, Secretaría de Agricultura y Desarrollo Rural. (2025). Panorama agroalimentario 2025. Lugar de publicación: https:// gob.mx/siap
11. X. L. Yang, J. Z. Zhang, D. Q. Luo, The taxonomy, biology and chemistry of the fungal *Pestalotiopsis* genus. Natural product reports, Vol. 29, 6, 2012, pp. 622-641.
12. D. Zhao, M. Hu, G. Ma, X. Xu, "Five New Terpenes with Cytotoxic Activity from *Pestalotiopsis* sp.", Molecules, Vol. 26, 23, 2021, pp. 7229.
13. C. Wu, Y. Wang, Y. Yang, "*Pestalotiopsis* Diversity: Species, Dispositions, Secondary Metabolites, and Bioactivities". Molecules, Vol. 27, 22, 2022, pp. 8088.
14. IndexFungorum (2026). Published on the Internet https://www.indexfungorum.org, The Royal Botanic Gardens, Kew. [Retrieved 3 June 2026].
15. J. Yi-Lan, J., J. Shi-Long, J., J. Xuan-Li, "Disease-resistant identification and analysis to transcriptome differences of blueberry leaf spot induced by beta-aminobutyric acid". Archives of Microbiology, Vol. 203, 6, 2021, pp. 3623-3632.
16. Zheng, X., Liu, X., Li, X., Quan, C., Li, P., Chang, X., Gu, J., Khaskheli, M. I., & Gong, G. *Pestalotiopsis* Species Associated with Blueberry Leaf Spots and Stem Cankers in Sichuan Province of China. *Plant disease*, Vol. 107, 1, 2023, pp. 149–156.
17. E. Cisternas y A. France, "Manual de campo. Plagas, enfermedades y desordenes fisiológicos del arándano en Chile". Chillán, Chile: Instituto de Investigaciones Agropecuarias, Boletín INIA N° 189. 2009, p. 88.
18. A. Hernández-Ceja, P. D. Loeza-Lara, F. J. Espinosa-García, Y. M. García-Rodríguez, J. R. Medina-Medrano, G. F. Gutiérrez-Hernández, & L. F. Ceja-Torres, "In Vitro Antifungal Activity of Plant Extracts on Pathogenic Fungi of Blueberry (*Vaccinium* sp.)", *Plants (Basel, Switzerland)*, Vol, 10, 5, 2021, pp. 852.

19. S. Fanning, A. P. Mitchell, “Fungal biofilms”, PLoS Pathog 2012, 8:e1002585–4.
20. R. Shay, A. A. Wiegand, F. Trail, “Biofilm Formation and Structure in the Filamentous Fungus *Fusarium graminearum*, a Plant Pathogen”, *Microbiology spectrum*, Vol, *10*, 4, 2022, pp. e0017122.
21. Motaung, T. E., Peremore, C., Wingfield, B., & Steenkamp, E. Plant-associated fungal biofilms-knowns and unknowns. *FEMS microbiology ecology*, Vol. 96,12, 2020 fiaa224.
22. Harding MW, Marques LLR, Howard RJ et al. Biofilm morphologies of plant pathogenic fungi. *Am J Plant Sci Biotechnol*. Vol. 4, 2010, pp. 43–7.
23. M. W. Harding, L. L. R. Marques, R. J. Howard, M. E. Olson, “Can filamentous fungi form biofilms?” Trends Microbiol, Vol. 17, 2009, pp. 475–480.
24. Gulati M, Nobile CJ. *Candida albicans* biofilms: development, regulation, and molecular mechanisms. Microb Infect, Vol. 18, 5, 2016, pp. 310–21
25. R. Sánchez-Herrera, L. L. Flores-Villavicencio, J. L. Pichardo-Molina, J. P. Castruita-Domínguez, X. Aparicio-Fernández, M. Sabanero López, J. C. Villagómez-Castro, “Analysis of biofilm formation by *Sporothrix schenckii”*, *Medical mycology*, Vol. *59*, 1, 2021, pp. 31–40.
26. Vichi S.I., Plocek V., Rashim Bhart, Jana M., Libuˇse V., Zdena P. Spatial structure of yeast biofilms and the role of cell adhesion across different media. *Biofilm* Vol.10, 2025, 100306

EVALUACIÓN DE LA ANCESTRÍA GENÉTICA EN POBLACIONES MESTIZAS DEL SUR DE MÉXICO A TRAVÉS DEL ANÁLISIS DE 39 MARCADORES AIM-INDELS

Gabriela Martínez Cortés[1], Irán Cortés Trujillo[1], Noemí Yolanda Velázquez Suárez[1], Alejandra Villagómez Vega[2], Ismael Nuño Arana[2], Karla Iliada Mujica López[1] y Héctor Rangel Villalobos[1]

[1]Centro Universitario de la Ciénega, Universidad de Guadalajara, [2]Centro Universitario de Tonalá, Universidad de Guadalajara.

gabriela.mcortes@academicos.udg.mx

RESUMEN

Los marcadores informativos de ancestría de tipo inserción-deleción (AIMs-INDELs, *Ancestry Informative Markers Insertion-Deletion*) son polimorfismos de longitud caracterizados por la presencia o ausencia de secuencias cortas en el genoma. Estos marcadores tienen la particularidad de mostrar una diferenciación alélica significativa entre poblaciones geográficamente distantes, por lo que es posible inferir la composición biogeográfica de un individuo o estimar la contribución de componentes ancestrales de un individuo o poblaciones mezcladas. Actualmente, en México la mayoría de la población (~90%) está conformada por mestizos, resultado de la mezcla genética entre nativos americanos, europeos y africanos. Aunque se ha evaluado la estructura genética en algunas poblaciones mestizas a partir de otros sistemas genéticos, los marcadores AIM-INDELs, que constituyen polimorfismos de elección para evaluar la ancestría genética no se han estudiado en población mestiza del sur de México. Por lo tanto, el objetivo del trabajo fue evaluar la ancestría genética a partir de 39 AIM-INDELs en tres poblaciones mestizas del sur de México. El estudio incluyó a 215 individuos mestizos de los estados de Guerrero, Veracruz y Oaxaca. El ADN fue amplificado por PCR multiplex y genotipado por electroforesis capilar usando un analizador genético ABI Prism 3130, así como el software GeneMapper v 3.2 para interpretar los perfiles genéticos. En los resultados se obtuvieron las frecuencias alélicas para 39 marcadores AIM-INDELs en tres poblaciones mestizas del sur de México. La distribución de los genotipos se ajustó al equilibrio de Hardy-Weinberg (EHW) demostrando que las poblaciones no han sufrido mutación, selección, deriva génica o migración, este último no al menos de manera significativa. La distribución alélica y heterocigosidad demostraron alta informatividad en la mayoría de los AIM-INDEL estudiados. El análisis de estructura genética demostró variabilidad significativa (F_{ST}= 2.88%; p=0.00000) a pesar de que las poblaciones corresponden a una misma región. La población de Oaxaca destacó por presentar el menor índice de diversidad genética y mayor proporción de ascendencia nativa de américa (90.9%), lo que define menor mestizaje en esta población. A nivel regional, se estimó 79.46% de ascendencia nativa de américa, 13.03% de ascendencia europea, 3.33% de componente asiático y 4.2% ancestría africana. Finalmente, la comparación entre las estimaciones de ancestría genética por población obtenidas en este estudio y los datos genómicos no muestran diferencias estadísticamente significativas, lo que sugiere que el panel de 39 marcadores AIM-INDELs constituye una herramienta válida y robusta para su implementación en estudios de epidemiología genética, particularmente en aquellos que usan diseños de casos y controles, ya que previsiblemente permitiría corregir la estratificación poblacional.

INTRODUCCIÓN

La variabilidad genética constituye la base para comprender los procesos evolutivos, demográficos y epidemiológicos que caracterizan a las poblaciones contemporáneas. Entre los distintos tipos de variación genética, los polimorfismos de inserción-deleción (INDELs) representan una fuente importante de diversidad en el genoma humano y se caracterizan por la presencia o ausencia de fragmentos cortos de ADN. Algunos de estos polimorfismos muestran diferencias significativas en sus frecuencias alélicas entre poblaciones geográficamente distantes, por lo que pueden emplearse como marcadores informativos de ancestría (AIMs, *Ancestry Informative Markers*) para inferir el origen biogeográfico de individuos y poblaciones (Pereira et al., 2012; Montinaro et al., 2015).

Además de su utilidad en estudios evolutivos e histórico-antropológicos, la estimación de ancestría mediante AIMs ha adquirido relevancia en genética epidemiológica y forense, debido a su capacidad para detectar estructura poblacional y reducir sesgos derivados de la estratificación genética en estudios de asociación (Pereira et al., 2012).

La población mexicana representa un modelo particularmente interesante para este tipo de investigaciones debido a su compleja historia de mestizaje. Se estima que más del 90% de la población del país está constituida por individuos mestizos, resultado de la mezcla genética entre poblaciones nativas americanas, europeas y, en menor proporción, africanas. Diversos estudios realizados mediante plataformas genómicas de alta densidad, marcadores STR autosómicos, polimorfismos del cromosoma Y y ADN mitocondrial han demostrado que la composición genética de los mestizos mexicanos no es homogénea y presenta una marcada estructura geográfica. En términos generales, el componente europeo tiende a incrementarse hacia el norte y occidente del país, mientras que la contribución indígena aumenta hacia el centro y sureste, manteniéndose el componente africano en proporciones relativamente bajas pero detectables (Gorodezky et al., 2001; Rubí-Castellanos et al., 2009; Martínez-Cortés et al., 2012; Martínez-Cortés et al., 2013; Moreno-Estrada et al., 2014; Sohail et al., 2023). A pesar de la amplia evidencia sobre la estructura genética de la población mexicana observada mediante el análisis de otros sistemas genéticos, los AIM-INDELs han sido escasamente explorados en este contexto. Particularmente, no se han reportado estudios específicamente orientados a evaluar el potencial del panel de 39 AIM-INDELs para caracterizar la ancestría genética y la estructura poblacional en individuos mestizos del sur de México. Esta limitada disponibilidad de información restringe la validación de herramientas genéticas potencialmente útiles para controlar efectos de estratificación en estudios de epidemiologia genética que emplean un enfoque de casos y controles, así como también para aplicaciones en genética forense y reconstrucción histórico-demográfica. Por lo tanto, el objetivo principal del estudio fue evaluar las proporciones de ancestría genética mediante el análisis de 39 AIM-INDELs en poblaciones mestizas del sur de México.

METODOLOGÍA

Se realizó un estudio transversal descriptivo en 215 individuos mestizos no emparentados procedentes de tres poblaciones del sur de México (Veracruz, Guerrero y Oaxaca). Las muestras de ADN se cuantificaron usando el espectrofotómetro NanoDrop 2000 (*Thermo scientific*) y posteriormente, se amplificaron por PCR múltiplex para 39 marcadores AIM-INDELs, empleando las condiciones descritas por Pereira et al. (2012). Los productos de PCR se sometieron a electroforesis capilar en un analizador genético ABI Prism 3130, utilizando una matriz estándar DS-33 (Dye Set G5) (Thermo Fisher Scientific). Los genotipos de los individuos se visualizaron en electroferogramas empleando el software GeneMapper® ver. 3.2 (Thermo Fisher Scientific).

Se estimaron las frecuencias alélicas para los 39 marcadores AIM-INDELs mediante el método de conteo génico. Además, se realizaron pruebas exactas para evaluar el equilibrio de Hardy-Weinberg (EHW) de los 39 marcadores AIM-INDELs. La ancestría genética se evaluó a través de un análisis supervisado con el programa STRUCTURE v.2.2 (Pritchard et al., 2012), para lo cual se incluyeron individuos de cinco poblaciones de referencia (África, Europa, Asia, América y Oceanía). Adicionalmente, se evaluó la estructura genética entre poblaciones mestizas a través de un análisis molecular de varianza (AMOVA). La diferenciación genética se estimó con la medida de F_{ST} y a través de las distancias genéticas de Nei (Nei, 1978), las cuales fueron representadas en un análisis de escalamiento multidimensional (MDS) y en un árbol de Neighbour Joining (NJ), respectivamente. Para dichos análisis se emplearon los programas Arlequin v.3.11, GDA v.1.0 y SPSS Statistics v.20.

RESULTADOS

Frecuencias alélicas de los marcadores AIM-INDELs

Se obtuvieron las frecuencias alélicas para los 39 marcadores AIM-INDELs en poblaciones mestizas de Guerrero, Veracruz y Oaxaca. Los marcadores MID-881, MID-2929, MID-3072 y MID-1636 presentaron las mayores frecuencias del alelo con deleción en las tres poblaciones. En contraste,

los marcadores MID-593, MID-3854 y MID-1802 destacaron por mostrar altas frecuencias del alelo con inserción. La población de Oaxaca presentó el patrón alélico más diferenciado, con frecuencias elevadas del alelo con deleción en los marcadores MID-2313, MID-397, MID-419 y MID-2719, así como menores frecuencias de deleción en MID-3122, MID-2011 y MID-772 respecto a Guerrero y Veracruz. Además, se identificaron cuatro marcadores monomórficos en Oaxaca (MID-3072, MID-2538, MID-2431 y MID-1802).

Diversidad genética y equilibrio de Hardy-Weinberg

La diversidad alélica se evaluó a través de los índices de heterocigosidad para cada marcador genético. La heterocigosidad promedio observada para los 39 marcadores AIM-INDELs fue similar en la población de Guerrero y Veracruz, mientras que Oaxaca presentó para la mayoría de los marcadores un menor índice de diversidad alélica (Figura 1). La población de Guerrero mostró una heterocigosidad promedio de 35.4%, cuyos valores de heterocigosidad por marcador oscilaron en un rango de 5.7%–66.7%. Por otra parte, la población de Veracruz presentó una heterocigosidad promedio de 34.2%, en un rango de 1.6%–71.4%. Finalmente, la población de Oaxaca mostró una heterocigosidad promedio de 32.5% con un rango de 3.0%–75.7%.

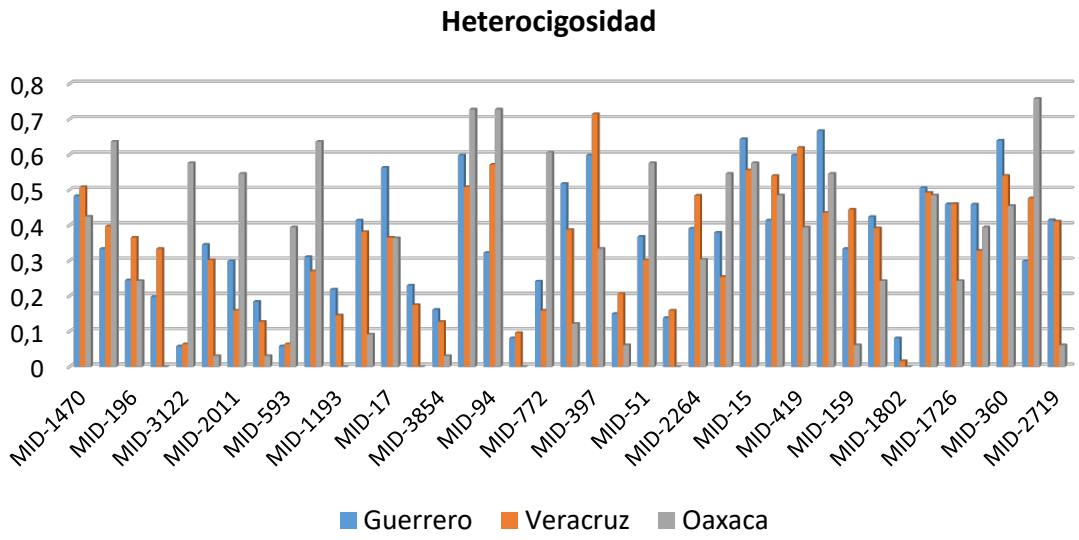


Figura 1. Valores de heterocigosidad observada para 39 marcadores AIM-INDELs evaluados en tres poblaciones mestizas del sur de México.

Por otra parte, después de aplicar la corrección de Bonferroni para un nivel de significancia de $p > 0.00128$, se demostró que la distribución de los genotipos observados para los 39 marcadores AIM-INDELs se ajustó al modelo de Hardy-Weinberg en las tres poblaciones analizadas. Cabe mencionar que para los marcadores MID-2538, MID-3072, MID-2431 y MID-1802 en la población de Oaxaca no fue posible calcular este parámetro ya que se observaron en estado monomórfico.

Estructura genética poblacional y ancestría

El análisis de AMOVA mostró que el 97.11% de la variación genética se encuentra dentro de las poblaciones, mientras que el 2.88% corresponde a diferencias entre poblaciones, siendo esta variación estadísticamente significativa ($p = 0.00000$). Por otra parte, el análisis de STRUCTURE permitió identificar cuatro componentes ancestrales principales (K= 4). A nivel de la región sur de México, la ancestría nativo-americana representó el 79.46% (71.1%–90.9%), la europea el 13.03% (20.6%–3.3%), la africana el 4.20% (4%–4.6%) y la asiática el 3.33% (1.3%–4.4%) (Figura 2). Adicionalmente, se presenta un *Bar plot*, en el cual se puede observar la contribución principal de dos componentes genéticos (América y Europa), mientras el componente africano y asiático es muy limitado (Figura 3). Nuestras estimaciones se compararon con las obtenidas de estudios genómicos (Silva-Zolezzi et al., 2009; Moreno-Estrada et al., 2014; Sohail et al., 2023) y de un estudio de 104

AIM-SNPs (Cahua-Pablo et al., 2017) e interesantemente no se encontraron diferencias significativas (p> 0.05), lo que permite inferir la eficiencia de los 39 AIM-INDELs para determinar la proporciones de ancestría.

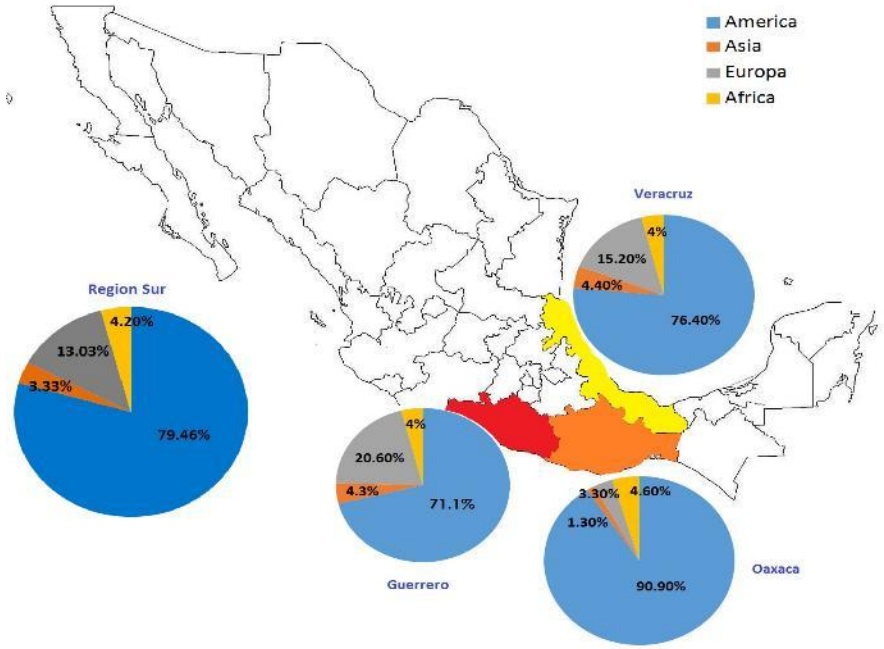


Figura 2. Proporciones de ancestría genética en poblaciones mestizas del sur de México (Guerrero, Veracruz y Oaxaca).

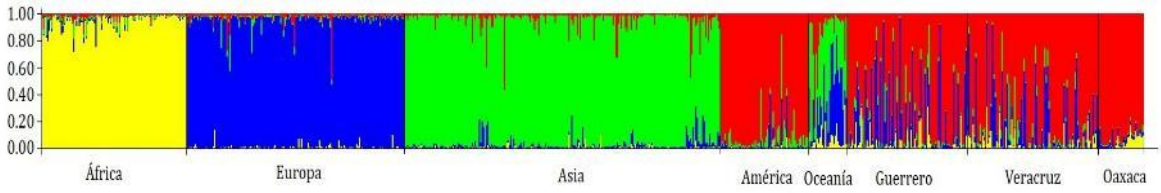


Figura 3. *Bar Plot* de la estructura genética poblacional inferida a partir de 39 AIMs en tres poblaciones mestizas del sur de México (Guerrero, Veracruz y Oaxaca).

Distancias genéticas entre poblaciones

Las comparaciones pareadas y las distancias genéticas de Nei basadas en la distribución alélica de los 39 marcadores AIM-INDELs entre las tres poblaciones mestizas de México mostraron una menor distancia genética de las poblaciones de Guerrero y Veracruz como se observa en dendograma de Neighbour Joining (NJ) (Figura 4). Por el contrario, Oaxaca presentó una mayor diferenciación genética con respecto a Guerrero y Veracruz. En adición, el análisis de escalamiento multidimensional confirmó este patrón, ubicando a la población de Oaxaca más próxima a los nativos de América, mientras que Guerrero y Veracruz ocuparon posiciones intermedias. Las poblaciones de referencia de origen europeo y africano mostraron una clara diferenciación respecto a las poblaciones mestizas analizadas (Figura 5).



Figura 4. Árbol de Neighbour-Joining (NJ) generado a partir de las distancias genéticas de Nei basadas en 39 marcadores AIM-INDELs evaluados en mestizos de tres poblaciones del sur de México.

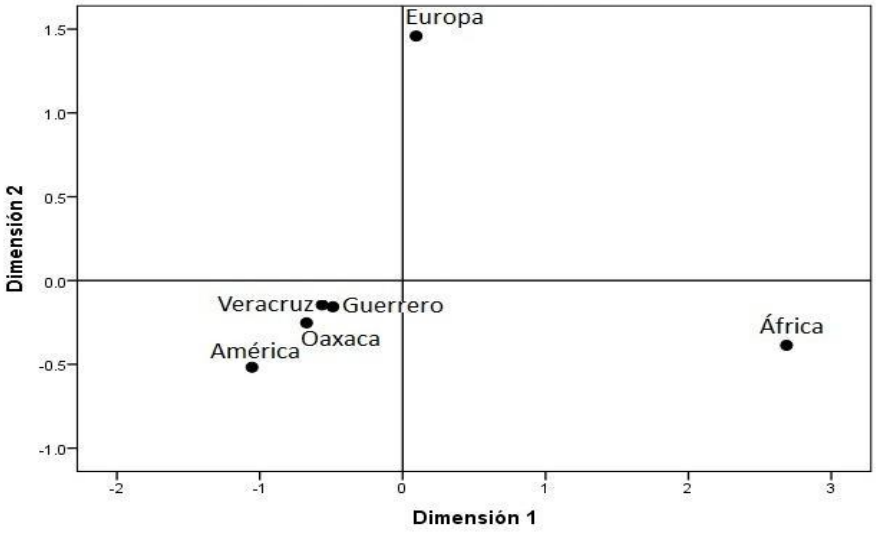


Figura 5. Análisis de escalamiento multidimensional (MDS) generado a partir de las distancias genéticas de F_{ST} basadas en 39 marcadores AIM-INDELs evaluados en mestizos de tres poblaciones del sur de México.

CONCLUSIONES

El análisis de 39 marcadores AIM-INDELs permitió caracterizar la composición genética y la estructura poblacional de tres poblaciones mestizas del sur de México. Las frecuencias alélicas y los índices de heterocigosidad marcaron diferencias importantes en la distribución de los alelos demostrando el poder informativo de los 39 marcadores AIM-INDELs para definir la ancestría genética de un individuo. Asimismo, la distribución genotípica se ajustó al equilibrio de Hardy-Weinberg, lo que respalda la consistencia de los datos obtenidos y la utilidad de los marcadores para estudios de genética poblacional. Además, los resultados demuestran sub-estructura genética en poblaciones mestizas del sur de México debido a las diferencias que existen principalmente en las ascendencias nativa americana y europea. Estos contrastes mostraron a Oaxaca como la población más diferenciada, lo que indica que, a pesar de que las poblaciones corresponden a una misma región geográfica en el país, la estructura genética es significativa (F_{ST}= 2.88%; p= 0.00000). La ancestría genética de la región sur de México estuvo compuesta principalmente por un componente nativo americano (79.46%), seguido por contribuciones europeas (13.03%), africanas (4.20%) y asiáticas (3.33%). En particular, Oaxaca presentó menores índices de diversidad genética, así como también mostró el mayor grado de diferenciación genética y una mayor proximidad genética a las poblaciones de referencia de origen nativo-americano, lo que permite inferir menor mestizaje en esta población respecto a Guerrero y Veracruz. Las estimaciones de ancestría genética obtenidas a partir de 39 marcadores AIM-INDELs no muestran diferencias significativas con las estimaciones reportadas usando análisis genómicos, lo que demuestra que el conjunto de 39 marcadores AIM-INDELs puede usarse de manera eficiente para evaluar la ancestría genética de individuos o poblaciones mezcladas.

BIBLIOGRAFÍA

1. Cahua-Pablo JÁ, Cruz M, Tello-Almaguer PV, Del Alarcón-Romero LC, Parra EJ, Villerías-Salinas S, Valladares-Salgado A, Tello-Flores VA, Méndez-Palacios A, Pérez-Macedonio CP, Flores-Alfaro E. Analysis of admixture proportions in seven geographical regions of the state of Guerrero, Mexico. *Am J Hum Biol*. 2017;29(6):e23032.

2. Gorodezky C, Alaez C, Vázquez-García MN, de la Rosa G, Infante E, Balladares S, Toribio R, Pérez-Luque E, Muñoz L. The genetic structure of Mexican Mestizos of different locations: tracking back their origins through MHC genes, blood group systems, and microsatellites. *Hum Immunol*. 2001;62(9):979-91.
3. Martínez-Cortés G, Salazar-Flores J, Fernández-Rodríguez LG, Rubi-Castellanos R, Rodríguez-Loya C, Velarde-Félix JS, Muñoz-Valle JF, Parra-Rojas I, Rangel-Villalobos H. Admixture and population structure in Mexican-Mestizos based on paternal lineages. *J Hum Genet*. 2012;57(9):568-74.
4. Martínez-Cortés G, Salazar-Flores J, Haro-Guerrero J, Rubi-Castellanos R, Velarde-Félix JS, Muñoz-Valle JF, López-Casamichana M, Carrillo-Tapia E, Canseco-Avila LM, Bravi CM, López-Armenta M, Rangel-Villalobos H. Maternal admixture and population structure in Mexican-Mestizos based on mtDNA haplogroups. *Am J Phys Anthropol*. 2013;151(4):526-37.
5. Montinaro F, Busby GB, Pascali VL, Myers S, Hellenthal G, Capelli C. Unravelling the hidden ancestry of American admixed populations. *Nat Commun*. 2015;6:6596.
6. Moreno-Estrada A, Gignoux CR, Fernández-López JC, Zakharia F, Sikora M, Contreras AV, Acuña-Alonzo V, Sandoval K, Eng C, Romero-Hidalgo S, Ortiz-Tello P, Robles V, Kenny EE, Nuño-Arana I, Barquera-Lozano R, Macín-Pérez G, Granados-Arriola J, Huntsman S, Galanter JM, Via M, Ford JG, Chapela R, Rodriguez-Cintron W, Rodríguez-Santana JR, Romieu I, Sienra-Monge JJ, del Rio Navarro B, London SJ, Ruiz-Linares A, Garcia-Herrera R, Estrada K, Hidalgo-Miranda A, Jimenez-Sanchez G, Carnevale A, Soberón X, Canizales-Quinteros S, Rangel-Villalobos H, Silva-Zolezzi I, Burchard EG, Bustamante CD. Human genetics. The genetics of Mexico recapitulates Native American substructure and affects biomedical traits. *Science.* 2014;344(6189):1280-5.
7. Nei, M. Estimation of average heterozygosity and genetic distance from a small number of individuals. *Genetics*. 1978;89(3):583-590.
8. Pereira R, Phillips C, Pinto N, Santos C, dos Santos SE, Amorim A, Carracedo Á, Gusmão L. Straightforward inference of ancestry and admixture proportions through ancestry-informative insertion deletion multiplexing. *PLoS One.* 2012;7(1):e29684.
9. Pritchard JK, Stephens M, Donnelly P (2000) and contributors in the current release: Daniel Falush, Melissa Hubisz, Matthew Stephens, Jonathan Pritchard, Peter Donnelly, William Wen, Mike Trienis, Pall Melsted. Inference of population structure using multilocus genotype data: dominant markers and null alleles. *Mol Ecol Notes.* 2012;7(4):574–578.
10. Rubi-Castellanos R, Martínez-Cortés G, Muñoz-Valle JF, González-Martín A, Cerda-Flores RM, Anaya-Palafox M, Rangel-Villalobos H. Pre-Hispanic Mesoamerican demography approximates the present-day ancestry of Mestizos throughout the territory of Mexico. *Am J Phys Anthropol.* 2009;139(3):284-94.
11. Silva-Zolezzi I, Hidalgo-Miranda A, Estrada-Gil J, Fernandez-Lopez JC, Uribe-Figueroa L, Contreras A, Balam-Ortiz E, del Bosque-Plata L, Velazquez-Fernandez D, Lara C, Goya R, Hernandez-Lemus E, Davila C, Barrientos E, March S, Jimenez-Sanchez G. Analysis of genomic diversity in Mexican Mestizo populations to develop genomic medicine in Mexico. *Proc Natl Acad Sci U S A*. 2009;106(21):8611-6.
12. Sohail M, Palma-Martínez MJ, Chong AY, Quinto-Cortés CD, Barberena-Jonas C, Medina-Muñoz SG, Ragsdale A, Delgado-Sánchez G, Cruz-Hervert LP, Ferreyra-Reyes L, Ferreira-Guerrero E, Mongua-Rodríguez N, Canizales-Quintero S, Jimenez-Kaufmann A, Moreno-Macías H, Aguilar-Salinas CA, Auckland K, Cortés A, Acuña-Alonzo V, Gignoux CR, Wojcik GL, Ioannidis AG, Fernández-Valverde SL, Hill AVS, Tusié-Luna MT, Mentzer AJ, Novembre J, García-García L, Moreno-Estrada A. Mexican Biobank advances population and medical genomics of diverse ancestries. *Nature.* 2023;622(7984):775-783.

SÍNTESIS VERDE Y CARACTERIZACIÓN DEL SISTEMA Ag/AgCl PARA LA DEGRADACIÓN FOTOCATALÍTICA DE CONTAMINANTES ORGÁNICOS

Xiadani González-Velázquez, Mayra L. Melgoza-Ramírez, Mario A. Rodríguez-Rivera

Centro de Investigaciones en Óptica A.C., León, Guanajuato, México.
xgonzalez@cio.mx

RESUMEN

La presencia de contaminantes persistentes en el agua representa un problema ambiental debido a su estabilidad química y baja biodegradabilidad. Entre los representantes de este tipo de contaminantes están los colorantes, medicamentos y pesticidas [1]. De manera general de entre los métodos emergentes para su remediación, la fotocatálisis heterogénea destaca por su capacidad de aprovechar la energía solar y por la posibilidad de recuperar y reutilizar el catalizador [2].En este contexto, los sistemas basados en Ag/AgCl han mostrado alta eficiencia bajo iluminación con luz visible, aprovechando el efecto de resonancia plasmónica superficial de la plata metálica, que favorece la separación de cargas y amplía la absorción espectral [3]. En el presente trabajo se sintetizó y caracterizó partículas Ag/AgCl mediante una ruta de síntesis verde empleando extractos acuosos de palo azul (Eysenhardtia polystachya) y se evaluó su desempeño en la degradación fotocatalítica del colorante cristal violeta. Los extractos de palo azul se prepararon por separado usando agua o etanol a 60 °C con agitación constante. El espectro de absorción del extracto presenta una banda intensa en 280 nm y un hombro alrededor de 320 nm, atribuibles a compuestos fenólicos y flavonoides. Para la síntesis de las partículas de Ag/AgCl se adicionó una solución acuosa de $AgNO_3$ de manera controlada a una mezcla del extracto acuoso con NaCl en agitación ultrasónica. Las partículas fabricadas fueron purificadas por centrifugación y lavadas con etanol. La caracterización estructural se realizó mediante difracción de rayos X, la morfología por microscopía electrónica de barrido (SEM), la composición por espectroscopía de energía dispersiva (EDS) y la distribución del tamaño de partícula por dispersión dinámica de luz (DLS). Los difractogramas confirmaron la formación de Ag/AgCl con estructura cúbica centrada en las caras, observándose picos característicos de AgCl y de plata metálica. El análisis DLS indicó diámetros hidrodinámicos entre 200 y 600 nm, con valores de índices de polidispersidad moderados. Las micrografías SEM revelaron morfología irregular y tendencia a la aglomeración mientras que el análisis EDS confirmó la distribución homogénea de Ag y Cl en el sistema base. La actividad fotocatalítica de las partículas fabricadas se evaluó para degradar el colorante comercial cristal violeta bajo iluminación con luz visible. La degradación se observó cualitativamente por la decoloración de la solución y se confirmó por una disminución progresiva de la banda de absorción a 590 nm. En conjunto, los resultados demuestran que el extracto de palo azul actúa eficazmente como agente reductor para la síntesis mediante un procedimiento compatible con el ambiente de partículas de Ag/AgCl, el cual mostró su potencial para remediación de aguas contaminadas mediante procesos fotocatalíticos.

INTRODUCCIÓN

La presencia de contaminantes orgánicos persistentes en cuerpos de agua constituye una problemática ambiental y sanitaria de creciente relevancia debido a su elevada estabilidad química, baja biodegradabilidad y capacidad de bioacumulación. Aunque las plantas de tratamiento de aguas residuales emplean procesos biológicos (lodos activados, biodiscos y lagunas de estabilización), físico-químicos (coagulación-floculación, sedimentación, filtración, adsorción en carbón activado) y procesos de desinfección, estos suelen ser insuficientes para degradar compuestos altamente recalcitrantes. Sin embargo, diversas sustancias permanecen en los efluentes tratados y se liberan al medio ambiente. Entre los contaminantes más representativos se encuentran los colorantes sintéticos, los residuos farmacéuticos, los pesticidas y los derivados nitroaromáticos provenientes de las industrias textiles, cosméticas, farmacéuticas y de impresión [1,5].

Frente a estas limitaciones, los métodos convencionales de tratamiento de aguas residuales presentan restricciones importantes relacionadas con los costos operativos, generación de subproductos secundarios y eficiencia limitada frente a contaminantes recalcitrantes. En respuesta a estos desafíos, se han desarrollado tecnologías basadas en el aprovechamiento de la luz solar, entre las que destacan los sistemas fotocatalíticos asistidos por fotosensibilizadores. Estos compuestos son capaces de absorber radiación en la región del UV-visible del espectro y transferir la energía a especies reactivas o materiales semiconductores. En este contexto, la fotocatálisis heterogénea ha emergido como una de las estrategias más prometedoras para la degradación de contaminantes orgánicos, debido a la capacidad de los fotosensibilizadores para aprovechar radiación luminosa y generar especies reactivas altamente oxidantes capaces de mineralizar compuestos persistentes [3, 4].

Tradicionalmente, materiales semiconductores como TiO_2 y ZnO han sido ampliamente investigados como fotocatalizadores; sin embargo, bajo excitación con luz solar es limitada debido a su amplia banda prohibida, lo que restringe su activación que principalmente se realiza con luz de la región ultravioleta del espectro electromagnético. Debido a ello, en los últimos años se ha aumentado significativamente el interés por desarrollar sistemas fotocatalíticos híbridos capaces de extender su respuesta óptica hacia la región visible.

Entre estos materiales, los sistemas Ag/AgCl han demostrado propiedades fotocatalíticas relevantes bajo iluminación visible debido a la coexistencia de fases semiconductoras de AgCl con plata metálica (Ag^0). Diversos estudios sugieren que la presencia de Ag^0/AgCl puede favorecer procesos de transferencia de electrones, separación de cargas y absorción de radiación visible, incrementando así la eficiencia fotocatalítica del sistema [3, 5]. Adicionalmente, la interacción interfacial entre AgCl y Ag metálica puede contribuir reduciendo los procesos de recombinación electrón-hueco, favoreciendo la generación de especies oxidantes responsables de la degradación de contaminantes orgánicos [4].

Paralelamente, los procesos de síntesis verde de materiales funcionales han adquirido relevancia como alternativa sustentable frente a métodos químicos convencionales. Este enfoque busca reducir el uso de reactivos tóxicos y condiciones de síntesis agresivas mediante el uso de extractos naturales ricos en metabolitos secundarios con capacidad reductora y estabilizante. En particular, extractos vegetales que contienen flavonoides, polifenoles, taninos y compuestos aromáticos han mostrado alta eficiencia en procesos de reducción de iones metálicos y formación de sistemas híbridos funcionales [2, 6].

El palo azul (Eysenhardtia polystachya) es una especie vegetal rica en compuestos fenólicos y flavonoides, cuyas propiedades químicas lo convierten en un candidato potencial para llevar a cabo reducción del tipo de síntesis verde. Sin embargo, los estudios relacionados con la fabricación de sistemas Ag/AgCl utilizando extractos de esta especie vegetal aún son limitados, particularmente para evaluarse en aplicaciones fotocatalíticas enfocadas a la degradación de contaminantes orgánicos bajo iluminación visible [7].

La Figura 1 resume de manera esquemática la idea central del trabajo de investigación, mostrando el origen de diversos contaminantes orgánicos presentes en sistemas acuáticos y el proceso fotocatalítico empleado para su degradación mediante activación con luz solar.

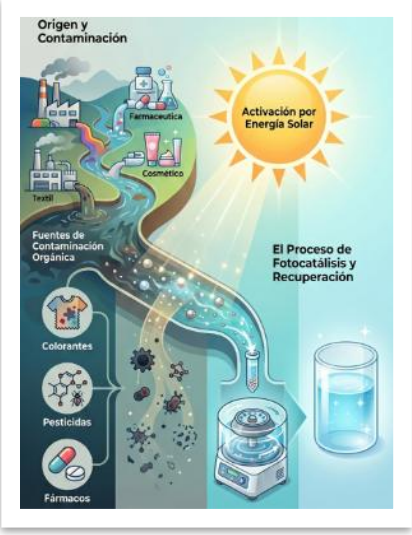


Figura 1. Esquema conceptual del proceso fotocatalítico para la degradación de contaminantes orgánicos bajo irradiación solar. (Elaboración propia mediante herramienta de generación asistida por inteligencia artificial.)

En este trabajo se presenta la síntesis verde y caracterización estructural, morfológica y óptica de un sistema Ag/AgCl utilizando el extracto acuoso de palo azul como agente reductor. Asimismo, se evaluó preliminarmente la actividad fotocatalítica del material mediante la degradación de cristal violeta usando luz visible, con la finalidad de explorar el potencial de este sistema como alternativa sustentable para remediación ambiental.

METODOLOGÍA

Preparación del extracto vegetal

La corteza de palo azul (Eysenhardtia polystachya) fue lavada y cortada en fragmentos menores a 0.5 cm. Posteriormente se preparó un extracto acuoso manteniendo el material vegetal dentro de agua destilada a 60 °C bajo agitación constante durante una hora. Finalmente, el extracto obtenido fue filtrado para eliminar residuos sólidos y almacenado en la oscuridad para utilizarlo posteriormente como agente reductor.

Síntesis del sistema Ag/AgCl

La síntesis del sistema Ag/AgCl se realizó mediante la adición controlada de una solución acuosa de nitrato de plata ($AgNO_3$) sobre una mezcla previamente preparada de extracto acuoso de palo azul y cloruro de sodio (NaCl). Durante el proceso de reacción la mezcla se mantuvo en agitación ultrasónica con la finalidad de favorecer la dispersión y la nucleación de las partículas.
Durante el tiempo de reacción se observó un cambio de aspecto y coloración de la mezcla formándose una suspensión blanquecina de aspecto lechoso, indicando la formación del sistema Ag/AgCl. El material obtenido se purificó mediante centrifugación y lavado con etanol para eliminar residuos orgánicos y reactivos sobrantes. Finalmente, el producto final se resuspendió en agua.

Caracterización estructural y morfológica

La caracterización óptica del extracto vegetal y de las partículas sintetizadas se realizó mediante espectroscopia UV-Vis usando un Espectrofotómetro Uv/Vis/Nir Elmer LAMBDA 900 La distribución de tamaño de las partículas fabricadas fue determinada mediante dispersión dinámica de luz (DLS) con un analizador modelo Malvern Zeta-Sizer.

La morfología superficial de las partículas fue evaluada mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), mientras que la composición elemental y distribución química fueron determinadas utilizando espectroscopia de energía dispersiva de rayos X (EDS) ambos experimentos con el Microscopio Electrónico de Barrido JSM-7800F modelo Fiel Emission Scanning Electron Microscope
Para identificar las fases cristalinas se realizó mediante difracción de rayos X (DRX) generado por el difractómetro D2 PHASER, marca Bruker, comparando los patrones experimentales con cartas de referencia JCPDS correspondientes a AgCl y plata metálica.

Evaluación de las propiedades fotocatalíticas
La actividad fotocatalítica del sistema Ag/AgCl se evaluó utilizando el colorante comercial cristal violeta como molécula modelo. Las partículas sintetizadas fueron suspendidas en una solución acuosa del colorante y expuestas a la luz visible. Durante el proceso se registraron espectros UV-Vis a diferentes tiempos de irradiación con la finalidad de monitorear la disminución de la banda de absorción característica del cristal violeta alrededor de 590 nm.

RESULTADOS Y DISCUSIÓN

Caracterización óptica del extracto vegetal
La Figura 2 muestra los espectros de absorción UV-Vis correspondientes al extracto acuoso de palo azul y a la suspensión de partículas del sistema Ag/AgCl sintetizado mediante síntesis verde. El espectro del extracto de palo azul presentó una banda intensa de absorción centrada alrededor de 280 nm, un hombro cercano a 320 nm, así como una banda en 390 nm. Dichas señales son características de compuestos fenólicos y flavonoides presentes en extractos vegetales, cuyos sistemas aromáticos conjugados son capaces de absorber radiación en la región ultravioleta [6]. La presencia de estas bandas sugiere que dichos metabolitos podrían participar como agentes reductores durante la síntesis del sistema Ag/AgCl.

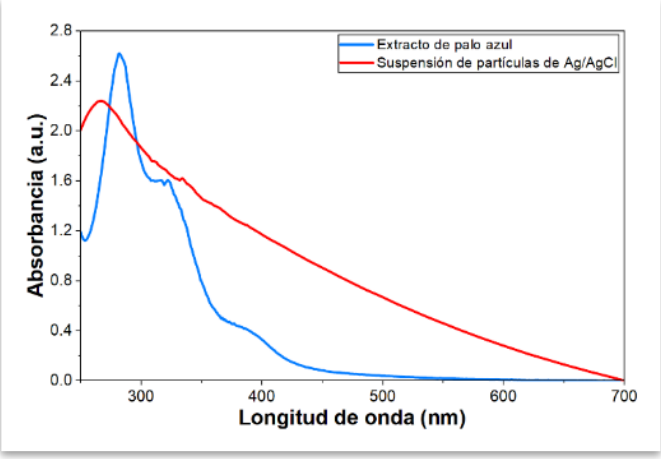


Figura 2. Comparación de los espectros de absorción UV-Vis del extracto acuoso de palo azul y de la suspensión de partículas del sistema Ag/AgCl.

Por otra parte, la suspensión de partículas Ag/AgCl mostró una banda amplia que se extiende desde la región ultravioleta hacia la región visible del espectro electromagnético. Este comportamiento indica una modificación de las propiedades ópticas después del proceso de fabricación y sugiere la formación del sistema híbrido Ag/AgCl.

Sin embargo, no se observó una banda plasmónica claramente definida alrededor de 400–450 nm, región típicamente asociada a la resonancia de plasmón superficial localizado de nanopartículas de plata metálica. La ausencia de esta señal podría estar relacionada con la formación de partículas con diámetros mayores de 100 nm, partículas agregadas o con una baja proporción superficial de Ag^0 metálica en el sistema sintetizado.

A pesar de ello, la banda es amplia extendida hasta la región visible sugiere que el sistema Ag/AgCl presenta capacidad de interacción con radiación visible, característica relevante para la actividad fotocatalítica bajo iluminación solar.

Caracterización morfológica: tamaño de partícula

La distribución de tamaño de las partículas sintetizadas se evaluó mediante dispersión dinámica de luz (DLS). La Figura 3 muestra el análisis de distribución de tamaño para las muestras fabricadas y tienen un diámetro hidrodinámico promedio (Z-average) de 222.4 nm con un índice de polidispersidad (PdI) de 0.138, indicando una distribución relativamente homogénea de tamaños dentro de la suspensión analizada.



Figura 3. Distribución de tamaño hidrodinámico obtenida mediante DLS para las partículas del sistema Ag/AgCl.

El análisis mostró una única población principal centrada aproximadamente en 260 nm, lo que sugiere la formación predominante de partículas submicrométricas con baja dispersión relativa. El valor reducido de PdI indica una distribución moderadamente estrecha y una estabilidad aceptable de la suspensión coloidal obtenida. Los tamaños determinados mediante DLS indican que las estructuras sintetizadas corresponden principalmente a agregados submicrométricos y no a nanopartículas metálicas aisladas convencionales. Este comportamiento puede estar relacionado con procesos de agregación durante la síntesis verde, así como con la presencia de compuestos orgánicos residuales provenientes del extracto vegetal, los cuales podrían favorecer interacciones intermoleculares y la formación de estructuras de mayor tamaño.

Difracción de rayos X

Los patrones de difracción obtenidos para las muestras sintetizadas con extracto acuoso de palo azul se muestran en la Figura 4. En ambos casos se identificaron picos característicos correspondientes a la fase cristalina de AgCl con estructura cúbica centrada en las caras (FCC), localizados aproximadamente en $2\theta \approx 32°, 46°, 54°, 57°$ y $67°$, asociados a los planos cristalográficos propios del material. Además, se observaron señales de menor intensidad alrededor de $2\theta \approx 38°$, $44°$, $64°$ y $77°$, correspondientes a reflexiones características de plata metálica Ag^0. La presencia simultánea de ambas fases indica que durante el proceso de síntesis verde ocurrió una reducción parcial de Ag^+ favorecida por los compuestos fenólicos y flavonoides presentes en el extracto de palo azul.

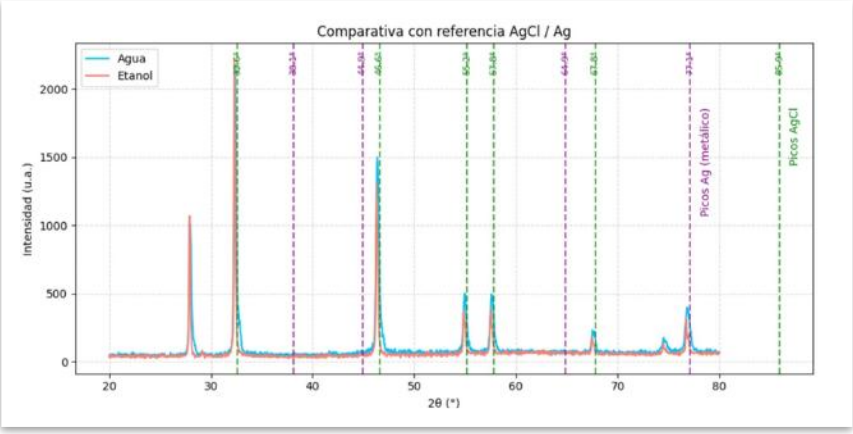


Figura 4. Difractograma del sistema Ag/AgCl sintetizado utilizando extractos de palo azul. Las líneas punteadas verdes corresponden a las posiciones características de AgCl, mientras que las líneas moradas indican las reflexiones asociadas a Agº metálica.

Caracterización morfológica y elemental

La morfología superficial y la composición elemental del sistema Ag/AgCl sintetizado con extracto acuoso de palo azul fueron evaluadas mediante microscopía electrónica de barrido y espectroscopía de energía dispersiva de rayos X (SEM-EDS). La Figura 5 muestra la micrografía SEM junto con los mapas de distribución elemental correspondientes a Ag y Cl.

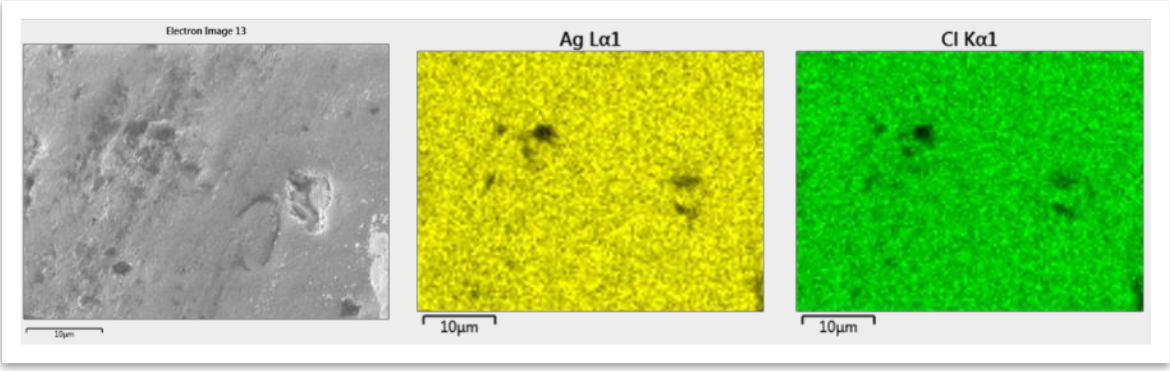


Figura 5. Micrografía SEM y mapas de distribución elemental EDS del sistema Ag/AgCl sintetizado mediante síntesis verde utilizando extracto acuoso de palo azul.

La micrografía SEM mostró superficies irregulares y la presencia de agregados distribuidos sobre la muestra, comportamiento consistente con los tamaños hidrodinámicos obtenidos mediante DLS. La ausencia de estructuras geométricas definidas sugiere un proceso de nucleación y crecimiento complejo, que dio lugar a partículas con morfología irregular y la distribución de tamaños mostrados en los resultados obtenidos por DLS.

Por otra parte, los mapas elementales EDS confirmaron la presencia simultánea de Ag y Cl en la región analizada. La distribución espacial similar observada para ambos elementos sugiere una dispersión relativamente homogénea del sistema Ag/AgCl dentro de la muestra sintetizada. Estos resultados son consistentes con los análisis de DRX, que confirmaron previamente la formación de las fases cristalinas correspondientes a AgCl y Agº metálica.

Evaluación fotocatalítica

La actividad fotocatalítica del sistema Ag/AgCl sintetizado mediante síntesis verde se evaluó utilizando cristal violeta como molécula modelo bajo iluminación visible. La Figura 6a muestra el cambio visual observado en la solución antes y después del proceso de irradiación, mientras que en

la Figura 6b se presenta la evolución de los espectros de absorción UV-Vis registrados durante el experimento.

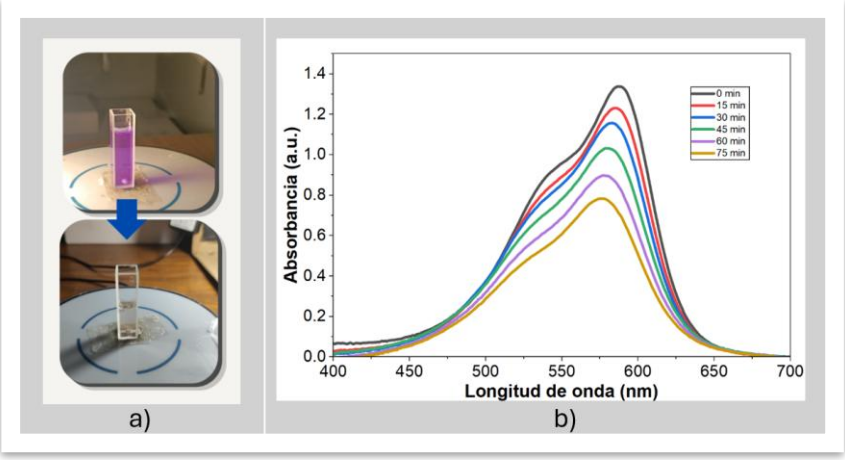


Figura 6. Actividad fotocatalítica del sistema Ag/AgCl bajo iluminación visible. a) Cambio visual de la solución de cristal violeta antes y después del tratamiento fotocatalítico. b) Espectros UV-Vis registrados durante el proceso de degradación del cristal violeta a diferentes tiempos de irradiación.

Los espectros UV-Vis mostraron una disminución progresiva en la intensidad de la banda de absorción localizada alrededor de 590 nm conforme aumentó el tiempo de irradiación, indicando la degradación gradual del cristal violeta en presencia del sistema Ag/AgCl. Después de 75 minutos de exposición, se observó una reducción significativa de la absorbancia, acompañada de una pérdida visible de coloración en la solución.

La disminución de la banda característica del cristal violeta sugiere que el sistema sintetizado presenta actividad fotocatalítica al ser iluminado con luz visible. Este comportamiento puede estar asociado a la generación de especies reactivas promovidas por la interacción entre las fases AgCl y Ag^0 presentes en el material, favoreciendo procesos de oxidación y degradación del contaminante orgánico. Aunque los espectros UV-Vis del material no mostraron una banda plasmónica claramente definida asociada a nanopartículas metálicas de Ag, la presencia del sistema Ag^0/AgCl confirmada mediante DRX podría contribuir parcialmente a la absorción de radiación visible y al desempeño fotocatalítico observado. Estos resultados demuestran el potencial del sistema Ag/AgCl sintetizado mediante extracto de palo azul para aplicaciones de remediación ambiental bajo iluminación visible.

CONCLUSIONES

Se sintetizaron partículas del sistema Ag/AgCl utilizando extracto acuoso de palo azul como agente reductor. El análisis DRX confirmó la presencia de las fases cristalinas correspondientes a AgCl y plata metálica Ag^0, mientras que mediante SEM-EDS corroboró la composición química y distribución elemental homogénea del material obtenido.

Las partículas sintetizadas presentaron morfología irregular y diámetros entre 200 y 600 nm, correspondientes principalmente a estructuras submicrométricas agregadas. Aunque no se observó una banda plasmónica claramente definida en los espectros UV-Vis, el sistema presentó absorción extendida hasta la región visible y actividad fotocatalítica durante la degradación de cristal violeta bajo iluminación visible.

Los resultados obtenidos demuestran el potencial del extracto acuoso de palo azul como alternativa sustentable para la fabricación de sistemas Ag/AgCl con aplicaciones en procesos de fotodegradación de contaminantes orgánicos.

BIBLIOGRAFÍA

1. Panchal, P., Meena, P., & Nehra, S. P. (2021). A rapid green synthesis of Ag/AgCl-NC photocatalyst for environmental applications. *Environmental Science and Pollution Research, 28*(4), 3972–3982.
2. Lopez-Miranda, J. L., Vázquez González, M. A., Mares-Briones, F., Cervantes-Chávez, J. A., Esparza, R., Rosas, G., & Pérez, R. (2018). Catalytic and antibacterial evaluation of silver nanoparticles synthesized by a green approach. *Research on Chemical Intermediates, 44*(12), 7479–7490.
3. Gao, D., Yang, H., & Shu, Z. (2022). Synthesis of Ag@AgCl/CA and visible-light photocatalytic degradation of oxytetracycline. *Computational Intelligence and Neuroscience, 2022*, 1–10.
4. Udomkun, P., et al. (2022). Green Ag/AgCl as an Effective Plasmonic Photocatalyst for Degradation and Mineralization of Methylthioninium Chloride. Separations, 9(8), 191.
5. Singh, K. B., Gautam, N., Updhyay, D. D., & Pandey, G. (2022). Sonication-assisted synthesis of Ag@AgCl and Ag@AgCl-GO and their photocatalytic performances. *Journal of Molecular Structure, 1269*, 133756.
6. Baran, M. F., Keskin, C., Baran, A., Hatipoğlu, A., Yildiztekin, M., Küçükaydin, S., Kurt, K., Hoşgören, H., Sarker, M. M. R., Sufianov, A., Beylerli, O., Khalilov, R., & Eftekhari, A. (2023). Green synthesis of silver nanoparticles from *Allium cepa* L. peel extract, their antioxidant, antipathogenic, and anticholinesterase activity. *Molecules, 28*(5), 2310.
7. Lopez-Miranda, J. L., Hernández-Rodríguez, B., Velázquez-Hernández, I., Serafín-Mancera, E., Mares-Briones, F., Esparza, R., & Estevez, M. (2025). Ag/AgCl nanoparticles: Biosynthesis, characterization, and evaluation of their photocatalytic properties. *MRS Advances, 10*(1), 24–29.

LA INFECCIÓN CON *Salmonella Typhimurium DETERIORA* LOS SISTEMAS GABAÉRGICO Y SEROTONINÉRGICO EN EL NEMATODO *Caenorhabditis Elegans*

Leonardo Hernández Hernández[1], Maria del Rosario Hernández Itto[2], Diego Wenceslao Aguilar Ocampo[3], Araceli Castillo Romero[3], Susan Andrea Gutierrez Rubio[3], Rocio del Carmen Montoya Perez[4], Rafael Cortés Zárate[3] y Gabriela Camargo Hernández[5]

[1] Universidad de Guadalajara, [2] Universidad de Sonora, [3] Universidad de Guadalajara Centro Universitario de Ciencias de la Salud, [4] Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, [5] Universidad de Guadalajara Centro Universitario de Los Altos.

leonardo.hhernandez@academicos.udg.mx.

RESUMEN

La infección por *Salmonella typhimurium* representa un problema de salud pública relevante debido a su alta incidencia y a sus mecanismos de virulencia, que le permiten colonizar y persistir en el hospedero. El uso de organismos modelo ha permitido comprender con mayor precisión las interacciones hospedador–patógeno, destacando el nematodo *Caenorhabditis elegans* como un sistema experimental adecuado por su genoma bien caracterizado, su transparencia corporal y la conservación de múltiples procesos biológicos con respecto a organismos superiores. Diversos antecedentes señalan que la infección bacteriana no solo afecta la fisiología intestinal, sino que también altera sistemas neuroquímicos relacionados con la conducta, particularmente los circuitos GABAérgicos y serotoninérgicos, implicados en la locomoción, la respuesta al estrés y la adaptación conductual frente a estímulos adversos. Para evaluar estos efectos, se emplearon gusanos de la cepa N2 Bristol mantenidos en condiciones controladas y alimentados con bacterias no patógenas o con la cepa patógena SL1344. Se realizaron ensayos conductuales orientados a analizar la respuesta mecano-sensorial mediante la prueba de “nose touch”, la conducta de evitación frente al patógeno mediante ensayos de quimiotaxis y la capacidad reproductiva mediante el análisis de ovoposición. Los datos obtenidos fueron analizados estadísticamente mediante la prueba t de Student, considerándose significativos los valores de p menores que 0.05. El trabajo experimental se desarrolló en el Centro Universitario de Ciencias de la Salud, de la Universidad de Guadalajara. Los resultados evidenciaron que la exposición al patógeno provocó modificaciones conductuales significativas. Los organismos infectados mostraron un incremento en la respuesta de encogimiento ante el estímulo mecánico, lo que sugiere alteraciones en la transmisión neuronal asociada a circuitos sensoriomotores. Asimismo, se observó un aumento progresivo en la conducta de evitación hacia la bacteria patógena, lo que indica la presencia de procesos de aprendizaje o de memoria aversiva frente a estímulos nocivos. Adicionalmente, la ovoposición disminuyó significativamente en los organismos expuestos, lo que refleja un impacto negativo sobre la fisiología reproductiva y el estado general del hospedero. En conjunto, los hallazgos demuestran que la infección por *Salmonella typhimurium* afecta no solo la integridad intestinal, sino también la función del sistema nervioso y el comportamiento del organismo, lo que evidencia la estrecha relación entre la infección, la neurobiología y la conducta. El empleo de *C. elegans* como modelo experimental permitió comprender de manera integral estas interacciones, aportando evidencia relevante para el estudio de los efectos sistémicos de los patógenos y fortaleciendo la formación científica y técnica en el análisis de procesos biológicos asociados a la salud y el bienestar.

INTRODUCCIÓN

Salmonella typhimurium es un serotipo clave de *Salmonella* tanto en México como en el mundo, muy asociado a alimentos y aguas contaminadas. En México está ampliamente distribuido en humanos, alimentos y aguas, con cepas frecuentemente multirresistentes. Globalmente, es causa importante de gastroenteritis y a enfermedades invasivas graves, por lo que es un problema serio de salud pública [1-3].

Asimismo, es sabido que la infección por *Salmonella typhimurium* altera de forma profunda el microbiota intestinal, causando una disbiosis marcada donde se ha reportado pérdida de bacterias productoras de Ácidos Grasos de Cadena Corta, e incrementando bacterias oportunistas, además de inflamación intestinal, lo que la propia bacteria aprovecha para colonizar mejor [4-6]. Estas alteraciones de la microbiota y de la barrera intestinal se insertan en el eje microbiota intestino cerebro, con potencial para influir en funciones cerebrales y, en modelos animales, incluso en complicaciones neurológicas. En estudios con modelos animales muestran que la infección por Salmonella altera neurotransmisores y que la microbiota, a través del GABA, modula tanto la respuesta inmune como la conducta. La evidencia directa sobre serotonina en este contexto es más limitada, pero hay datos interesantes con probióticos y postbióticos [7-9].

En el estudio del eje microbiota intestino cerebro, los modelos de mamíferos ofrecen mayor relevancia traslacional, sin embargo, la extrema complejidad del sistema nervioso, y de la microbiota de los animales superiores, dificulta la comprensión de las interacciones en este eje, sobre todo en relación con los mecanismos moleculares finos (vías de señalización, metabolitos concretos). Considerando que estas interacciones no solo ocurren en vertebrados, los invertebrados y vertebrados simples brindan sistemas baratos, rápidos y muy manipulables para descubrir algunos mecanismos básicos [10, 11].

TEORÍA

El nematodo *Caenorhabditis elegans* (*C. elegans*) ha emergido como un modelo poderoso para investigar las interacciones entre microbiota intestinal y el sistema nervioso, conocido como el eje microbiota-intestino-cerebro. Su sistema nervioso completamente mapeado, facilidad de manipulación genética y capacidad para ser colonizado selectivamente con bacterias específicas lo convierten en una herramienta valiosa para desentrañar mecanismos moleculares de comunicación entre microbios y cerebro [12]. Estudios recientes han demostrado que *C. elegans* puede ser infectado experimentalmente con patógenos entéricos humanos como *Salmonella typhimurium,* permitiendo analizar tanto la respuesta inmune innata del hospedador como los efectos sobre funciones neuronales y comportamentales [13]. Además, investigaciones han mostrado que la colonización bacteriana puede modular neurotransmisores clave (dopamina, serotonina) y afectar procesos fisiológicos relevantes para enfermedades neurodegenerativas [14] .

También, el sistema nervioso del *C. elegans* tiene la mayoría de las características presentes en organismos superiores, incluido los sistemas de neurotransmisión GABAérgico y Serotoninérgico. La funcionalidad de la actividad GABAérgica y Serotoninérgica son evaluados en *C. elegans* por ensayos conductuales bien establecidos, principalmente el ensayo de ovoposición que depende de la Serotonina [15], y el ensayo de toque a la nariz, donde la aparición de la conducta de encogimiento indica disfunción de las neuronas GABAérgicas [16].

El ensayo de ovoposición se fundamenta en el hecho de que la serotonina es uno de los principales neurotransmisores que estimulan la puesta de huevos en *C. elegans*. Las neuronas HSN (Hermaphrodite Specific Neurons) liberan serotonina sobre músculos vulvares y neuronas asociadas, promoviendo la transición desde un estado inactivo a un estado activo de oviposición, por los que cuando existe deficiencia serotoninérgica, se observa una disminución significativa en la frecuencia de puesta de huevos. Por el contrario, la administración exógena de serotonina incrementa la oviposición [17-19].

Por otra parte, en el ensayo de toque de la nariz, básicamente buscamos la aparición de la conducta de encogimiento corporal. Este ensayo aprovecha la actividad de las neuronas motoras GABAérgicas tipo DD y VD, las que inhiben la contracción simultánea de los músculos dorsales y ventrales durante la locomoción. Cuando la neurotransmisión GABAérgica está alterada, la estimulación mecánica intensa induce una co-contracción de ambos grupos musculares, provocando que el animal se "encoja" temporalmente en lugar de desplazarse normalmente, lo que constituye

uno de los marcadores conductuales más sensibles de alteración GABAérgica en *C. elegans [20, 21]*.

También, el ensayo de evitación es clave para estudiar estos neurotransmisores. En *Caenorhabditis elegans* se rige por un fino balance entre la activación conductual de huida y el frenado o contextualización del movimiento. Dentro de este circuito neuro inmune, la Serotonina (5-HT) y el GABA (ácido gamma-aminobutírico) actúan como un sistema de aceleración y control homeostático sumamente preciso. Mientras la serotonina opera como la "alarma molecular" que procesa el daño y activa la aversión olfativa, el GABA modula la susceptibilidad inmunitaria, el tono basal de defensa y el equilibrio de la toma de decisiones (trade-off) entre la longevidad y la respuesta a patógenos [22, 23]. De este modo, si el nematodo presenta disfunción serotoninérgica, se quedará comiendo el patógeno; si posee alteraciones en las vías reguladas por GABA, el balance homeostático se rompe, alterando la susceptibilidad molecular y acelerando o retrasando de forma anómala la respuesta de huida del césped bacteriano.

Derivado de los anterior, el propósito de este trabajo fue determinar el efecto de la infección con la cepa patógena SL1344 de *Salmonella typhimurium* sobre la actividad GABAérgica y Serotoninérgica del nematodo *C. elegans*.

PARTE EXPERIMENTAL

Cepas de estudio. Se emplearon gusanos de la cepa N2 (Wild Type) del tipo Bristol adquiridas en el Caenorhabditis Genetics Center (Minneapolis, MN, EUA). Todos los experimentos se realizaron en animales adultos sincronizados, cultivados en placas de Petri con Agar-NGM mantenidas a 19°C con *Escherichia coli* de la cepa OP50 como fuente de alimento [24]. Además, se utilizó la cepa patógena SL1344 de *Salmonella typhimurium.*

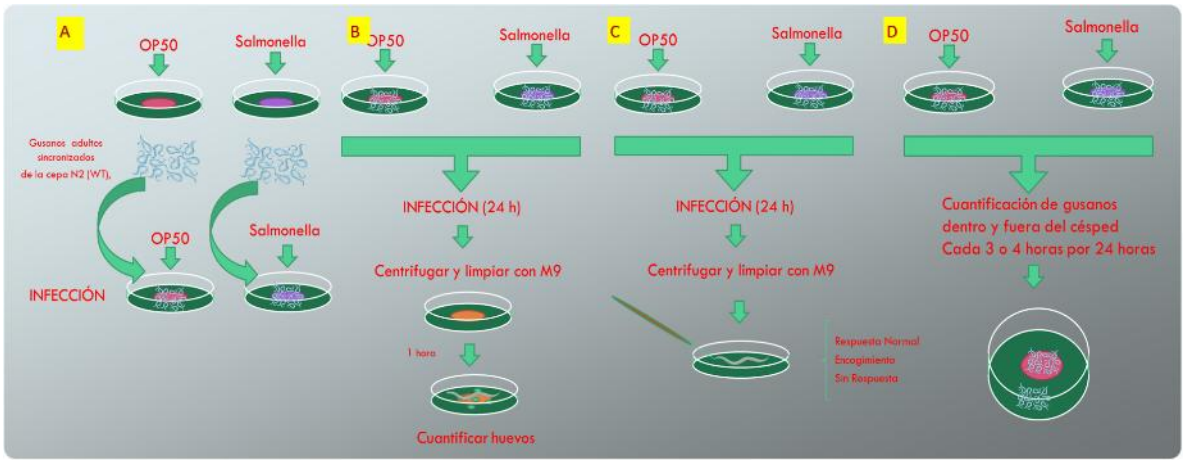


Figura 1. Protocolos experimentales. A. Procedimiento de infección. B. Ensayo de Ovoposición. C. Ensayo de Nose Touch. C. Ensayo de Evitación.

Grupos de Estudio. Se instauraron 2 grupos de estudio: un grupo control (OP50), alimentado con *E. coli* OP50, y un grupo SL1344, alimentado con la cepa SL1344.

Ensayo de la evitación a patógenos. En placas de Agar-NGM de 90 mm con césped bacteriano de las cepas de estudio, se trasladaron 30 gusanos y se mantuvieron a 19°C. Cada 4 horas por 24 horas se cuantificó la proporción de animales fuera y dentro del césped bacteriano.

Protocolo de infección. Se prepararon placas de agar NGM de 35 mm con la cepa SL1344, así como *E. coli* OP50. Para esto, a cada placa de agar NGM se añadieron 30 microlitros del stock de

estas cepas en caldo LB (1x108 UCF/ml). En cada placa se transfirieron 30 gusanos y se mantuvieron a 19°C por 24 horas.

Ensayo de conducta de ovoposición. Nematodos sometidos al protocolo de infección se trasladaron (5 por grupo) a placas de Agar NGM con alimento, y se contabilizaron los huevos depositados por los gusanos por hora (2).

Ensayo de respuesta al tacto de la nariz. En este ensayo se toca con un pelo de ceja la parte anterior de la cabeza de un gusano que se mueve hacia delante. El ensayo consiste en hacer inducir la respuesta al toque a la nariz al menos 10 veces en cada gusano (3). Se registró la frecuencia la respuesta anormal de encogimiento.

Análisis Estadístico. Los resultados se reportan como media ± error estándar de la media. Para la comparación de medias de los dos grupos se utilizó la prueba t o la prueba de Mann-Whitney. Las diferencias se consideraron significativas con una p <0.05.

RESULTADOS

Los resultados evidenciaron que la exposición al patógeno provocó modificaciones conductuales significativas. Los organismos infectados mostraron un incremento estadísticamente significativo en la respuesta de encogimiento ante el estímulo mecánico del 275% ((P = <0.001)), lo que sugiere alteraciones en la transmisión neuronal asociada a circuitos sensoriomotores asociados a la neurotransmisión GABAérgica. Por su parte, la ovoposición disminuyó significativamente en los organismos expuestos en un 57.6% (P = 0.004), lo que refleja un impacto negativo sobre la neurotransmisión serotoninérgica, deteriorando la fisiología reproductiva y el estado general del hospedero. Asimismo, se observó un aumento en la conducta de evitación hacia la bacteria patógena, iniciando a las 16 horas, continuando progresivamente casi de manera exponencial. Es interesante ver que tardo en presentar esta la conducta casi 4 horas después de los animales alimentados con OP50, lo que podría indicar un retardo en la aparición de procesos de aprendizaje o de memoria aversiva frente a estímulos nocivos lo que indicaría deterioro tanto de los sistemas serotoninérgicos y GABAérgicos.

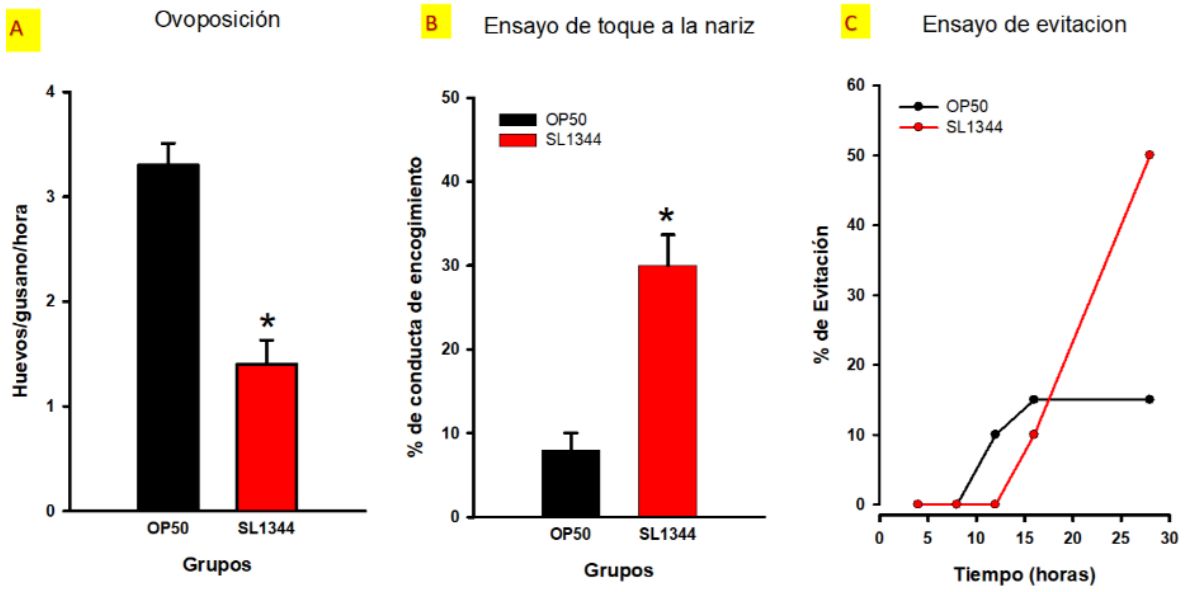


Figura 2. Efecto de la infección con *Salmonella typhimurium* sobre la Ovoposición (A), sobre la conducta de encogimiento en el ensayo de Nose Touch (B) y la conducta de evitación (C). Los resultados fueron analizados con Pruebas t-Student y se consideran significativos una P <0.05.

CONCLUSIONES

En conjunto, los hallazgos demuestran que la infección por *Salmonella typhimurium* afecta no solo la integridad intestinal, sino también la función del sistema nervioso y el comportamiento del organismo, lo que evidencia la estrecha relación entre la infección, la neurobiología y la conducta, particularmente la dependiente de los sistemas serotoninérgicos y GABAérgicos. El empleo de *C. elegans* como modelo experimental permitió comprender de manera integral estas interacciones, aportando evidencia relevante para el estudio de los efectos sistémicos de los patógenos y fortaleciendo la formación científica y técnica en el análisis de procesos biológicos asociados a la salud y el bienestar.

BIBLIOGRAFÍA

1. Ballesteros-Nova, N., et al., *Genomic Epidemiology of Salmonella enterica Circulating in Surface Waters Used in Agriculture and Aquaculture in Central Mexico.* Applied and Environmental Microbiology, 2022. 88.
2. Godínez-Oviedo, A., et al., *Salmonella enterica in Mexico 2000–2017: Epidemiology, Antimicrobial Resistance, and Prevalence in Food.* Foodborne Pathogens and Disease, 2020. 17: p. 98-118.
3. Gómez-Baltazar, A., et al., *Genomic analysis of the MLST population structure and antimicrobial resistance genes associated with Salmonella enterica in Mexico.* Genome, 2023.
4. Argüello, H., et al., *Early Salmonella Typhimurium infection in pigs disrupts Microbiome composition and functionality principally at the ileum mucosa.* Scientific Reports, 2018. 8.
5. Khan, S. and K. Chousalkar, *Salmonella Typhimurium infection disrupts but continuous feeding of Bacillus based probiotic restores gut microbiota in infected hens.* Journal of Animal Science and Biotechnology, 2020. 11.
6. Leleiwi, I., et al., *Gut microbiota carbon and sulfur metabolisms support Salmonella infections.* The ISME Journal, 2024. 18.
7. Cryan, J., et al., *The Microbiota-Gut-Brain Axis.* Physiological reviews, 2019. 99 4: p. 1877-2013.
8. Kaur, A., et al., *Salmonella Strain Specificity Determines Post-typhoid Central Nervous System Complications: Intervention by Lactiplantibacillus plantarum at Gut-Brain Axis.* Frontiers in Microbiology, 2020. 11.
9. O'Riordan, K., et al., *The gut microbiota-immune-brain axis: Therapeutic implications.* Cell Reports Medicine, 2025. 6.
10. Moradian, H., et al., *New methods to unveil host-microbe interaction mechanisms along the microbiota-gut-brain-axis.* Gut Microbes, 2024. 16.
11. Nagpal, J. and J. Cryan, *Microbiota-brain interactions: Moving toward mechanisms in model organisms.* Neuron, 2021.
12. De Ora, L.O. and E. Bess, *Emergence of Caenorhabditis elegans as a Model Organism for Dissecting the Gut–Brain Axis.* mSystems, 2021. 6.
13. Walker, A., et al., *Colonization of the Caenorhabditis elegans gut with human enteric bacterial pathogens leads to proteostasis disruption that is rescued by butyrate.* PLoS Pathogens, 2021. 17.
14. Li, G., et al., *Head dopaminergic and serotonergic neurons monitor alterations in gut bacterial activity through a gut-brain-gut axis.* bioRxiv, 2024.
15. Horvitz, H., et al., *Serotonin and octopamine in the nematode Caenorhabditis elegans.* 1982. 216(4549): p. 1012-1014.
16. Bamber, B.A., et al., *The Caenorhabditis elegans unc-49 locus encodes multiple subunits of a heteromultimeric GABA receptor.* J Neurosci, 1999. 19(13): p. 5348-59.
17. Chase, D.L. and M.R. Koelle, *Biogenic amine neurotransmitters in C. elegans.* WormBook, 2007: p. 1-15.
18. Harding, H.P., et al., *An integrated stress response regulates amino acid metabolism and resistance to oxidative stress.* Mol Cell, 2003. 11(3): p. 619-33.
19. Shyn, S.I., R. Kerr, and W.R. Schafer, *Serotonin and Go modulate functional states of neurons and muscles controlling C. elegans egg-laying behavior.* Curr Biol, 2003. 13(21): p. 1910-5.

20. Deng, L., et al., *Inhibition Underlies Fast Undulatory Locomotion in Caenorhabditis elegans.* eneuro, 2021. 8(2): p. ENEURO.0241-20.2020.
21. McIntire, S.L., et al., *The GABAergic nervous system of Caenorhabditis elegans.* Nature, 1993. 364(6435): p. 337-41.
22. Otarigho, B. and A. Aballay, *Immunity-longevity tradeoff neurally controlled by GABAergic transcription factor PITX1/UNC-30.* Cell Reports, 2021. 35(8).
23. Zhang, Y., H. Lu, and C.I. Bargmann, *Pathogenic bacteria induce aversive olfactory learning in Caenorhabditis elegans.* Nature, 2005. 438(7065): p. 179-84.
24. Hope, I.A., *C. elegans: A Practical Approach*. 1 edition ed. Practical Approach Series, ed. I.A. Hope. Vol. 213. 1999, Oxford ; New York: Oxford University Press.

ESTUDIO DE ADSORCIÓN Y DESORCIÓN DE UN ANTIBIÓTICO NATURAL EN EXCIPIENTES DE SÍLICE MESOPOROSA

[1]Carol Cadenas Gutiérrez, [1]Guadalupe Ithayetzy Cruz Calvillo, [2]Mercedes Salazar Hernández, [1*]Carmen Salazar Hernández

[1]UPIIG-Instituto Politécnico Nacional. [2]Departamento de Minas, Metalurgia y Geología. Universidad de Guanajuato.
msalazarh@ipn.mx.

RESUMEN

En la actualidad, la medicina tradicional constituye una alternativa para el tratamiento de diversas enfermedades, utilizando como principios activos farmacéuticos extractos de plantas. Entre ellos, el extracto de ajo (*Allium sativum*) ha sido ampliamente empleado por sus propiedades antibióticas. Por otro lado, los nanoexcipientes de sílice mesoporosa (SM) se han propuesto como sistemas de liberación controlada y prolongada de distintos fármacos, incluyendo antibióticos, anticancerígenos, vitaminas y antiinflamatorios. En este proyecto se plantea la síntesis de un nanoexcipiente de sílice mediante rutas de bajo costo, denominado *green mesoporous silica* (GMS), obtenido por vía hidrotérmica a partir de silicato de sodio como precursor. La GMS se evaluó como excipiente para el extracto de ajo obtenido por maceración en diferentes disolventes (agua, etanol y acetona). Los análisis de espectroscopía infrarroja confirmaron que la alicina es el componente principal de los extractos, identificándose las siguientes señales características: grupo S=O a 1020 cm^{-1}, CH_2 entre 2940–2880 cm^{-1} y C=C en el rango de 806–679 cm^{-1}. La adsorción del extracto en la GMS se llevó a cabo mediante impregnación simple, alcanzando una capacidad máxima de aproximadamente 9.2%, cuantificada por gravimetría. Las pruebas de desorción realizadas a pH 3 y 5, con temperatura controlada de 37 °C, mostraron perfiles de liberación sostenida y controlada hasta 240 minutos teniendo liberaciones del extracto del 14% para la alicina y del 25% para la aliína. En conclusión, la GMS podría convertirse en un excipiente económico y eficaz para este antibiótico natural, permitiendo una dosificación más segura y prolongada.

INTRODUCCIÓN

La medicina tradicional, en la actualidad representa una alternativa para el tratamiento de enfermedades causadas por bacterias, utilizando como principios activos farmaceúticos extractos de plantas. Tal es el caso, del extracto de ajo (*Allium sativum*) por sus propiedades antibióticas [1,2]. Este extracto se obtiene a partir del machacado del ajo natural, donde la aliínasa se oxida hasta la formación de la alicina; como se muestra en la Figura 1a. Sin embargo, la alicina es una molécula altamente inestable y volátil, perdiendo su actividad biológica por encima d ellos 60°C y estando en contacto con el oxígeno. Por otra parte, el ajo se compone de diferentes compuestos, teniendo como principales la aliína y alicina; sin embargo, diferentes compuestos sulfurados (véase Figura 1b) conforman la composición química de éste [3].

La alicina y los diferentes compuestos sulfurados han mostrado actividad biológica como: anticancerígenos y oxidantes [4], antidiabéticos, antibacteriano, antifúngico [5] actividad como antihipertensivo [6]. Entre la actividad biológica del ajo se encuentra su actividad antiparásitos (Haemonchus contortus, Trichuris muris and Angiostrongylus cantonensis, H. diminuta, Echinostoma caproni, and Fasciola hepática) [7-9]. Sin embargo, cualquiera que sea el fármaco que se dosificará es necesario tener un excipiente económico que permita su dosificación en el organismo. En este sentido se tienen los excipientes de sílice mesoporosa [10,11] los cuales son sensibles al pH y permiten dosificar el fármaco de manera controlada y prolongada.

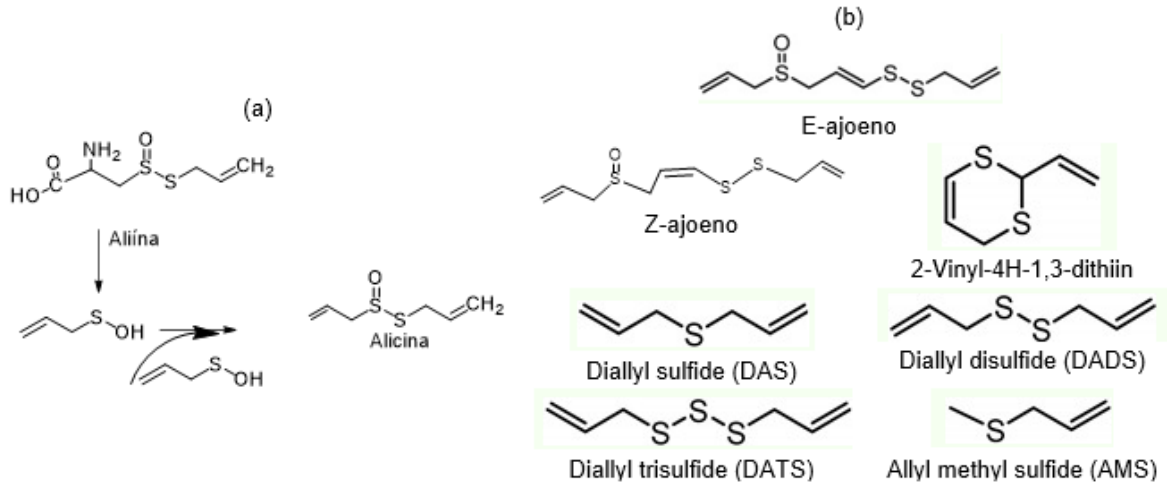


Figura 1. Componentes del ajo (a) Transformación de la alinasa a alicina (b) Compuestos sulfurados que conforman la composición química del ajo [3]

Recientemente, Salazar-Hernández C y colaboradores han propuesto el uso de una sílice mesoporosa como nano excipiente de fármacos obtenida a partir de rutas de bajo costo [12]; los autores emplean silicato de sodio para obtener mediante una columna de intercambio iónico ácido silícico, que de acuerdo con el tiempo de envejecimiento se mejoran las propiedades texturales del sólido [13]. Por lo que, en este trabajo se presenta el estudio de la adsorción-desorción del extracto de ajo (fármaco natural) en el excipiente de sílice mesoporosa obtenida por ruta de bajo costo, denominada como GMS.

PARTE EXPERIMENTAL

Obtención de los Extractos de Ajo

Se obtuvo ajo fresco comercial al cual se retira la cáscara para triturar los dientes de ajo utilizando tres diferentes disolventes: acetona (grado industrial, Karal), etanol (grado industrial, Karal) y agua destilada (Fermont). La Tabla 1 indica las condiciones empleadas para cada extracto, el tiempo en reposo en el cual se encuentra en contacto el ajo y los disolventes fue de 24 h. Una vez concluido el tiempo de la extracción se separó por filtración el sólido del líquido y el líquido se concentra ¾ partes su volumen por evaporación rotativa o evaporación al vacío y condensación, para posteriormente terminar la eliminación de cada uno de los disolventes por secado a 60°C durante 24 hr, el extracto en agua, no se concentró en rotavapor y este se secó a 60°C por 5 días y también se secó a 100°C por 24 hr, este sí concentrándose en rotavapor.

Tabla 1. Condiciones empleadas para la obtención del extracto de ajo

	Ajo Triturado (g)	Etanol (mL)	Acetona (mL)	*Agua (mL)
Extracto-1	100	250		
Extracto-2	100		250	
Extracto-3	100			250

* El extracto de agua se eliminó el disolvente empleando una temperatura de 60°C y otro con un secado a 100°C

Síntesis de Sílice Mesoporosa (GMS)

La GMS se obtiene a partir de síntesis hidrotérmica empleando la metodología del tamiz molecular pasar una solución de Na_2SiO_3 grado industrial (10 gr de silicato en 50 mL de agua destilada) por una columna de intercambio iónico DOWEX 50WX8- 100 y recolectando la fracción ácida de pH 1-3. La fracción recolectada es ácido silícico ($Si(OH)_4$) que es envejecido a 25°C por 24 hr. Posteriormente, el ácido silícico se adiciona a una disolución de Pluronic P-123 (EO20-PO170-EO20; PMav= 5800; Sigma Aldrich) que actuará como director de estructura. La disolución de P-123 se preparó disolviendo 66.2 g del polímero en 600 mL de H_2O desionizada. Una vez mezclado el P-123 con el Si(OH)4 envejecido (10 mL) se dejó en reflujo por 24 hr hasta la formación del gel de sílice. Posteriormente, la extracción del P-123 se realizó con reflujo por 12 horas con etanol ácido y el sólido obtenido se filtra, lava con etanol y se colocó a secar a 80ºC por 6 horas y finalmente se calcina a 600ºC por 3 horas para eliminar cualquier traza de P-123 presente en la sílice.

Adsorción del Extracto en GMS

La sílice mesoporosa empleada como nano-excipiente para el extracto de ajo se ha sintetizado y caracterizado previamente en el grupo de trabajo de acuerdo con la metodología propuesta por Salazar-Hernández C. et.al; 2024. Que han determinado como tiempo de saturación para este material alrededor de los 45 min, por lo que, la adsorción del extracto en la GMS se llevó a cabo por impregnación simple (véase Figura 7), donde una solución del extracto (500 mg/ mL) empleando isopropanol como disolvente; se coloca en contacto con la GMS (4 g) por 45 min asistida con agitación magnética. Posteriormente, el sólido se separó por filtración y se coloca a secar en la estufa a 60°C por 24 hr, finalmente la cantidad de extracto adsorbido se cuantificó por gravimetría calcinando 0.5 g del material a 900°C, temperatura a la cual se logra obtener la sílice densificada (libre de humedad y materia orgánica) (Hench & West, 1990).

Cinética de desorción. Obtención de los perfiles de liberación del Extracto de Ajo

Se obtuvieron perfiles de desorción estudiando el efecto del pH en el sistema GMS/ExAj de ajo; por lo que se colocó 0.3 g GMS/ExAj con 10 mL de agua destilada acidificada con HCl a 37 °C; se tomaron alícuotas de 2 mL cada 15 min por 4 hr manteniendo el volumen constante. Los pH fueron: pH 3 simulador del pH de jugo gástrico, pH 5 simulador del pH ExAj de duodeno después de la ingesta de alimentos y pH de 7, simulador de pH de duodeno antes de la ingesta de alimentos. La cuantificación de la cantidad de extracto de ajo desorbido o liberado se cuantifico por espectroscopía UV-Visible, empleando el equipo espectrofotómetro (UNICO SQ-2800). Para lo cual se obtuvo el espectro del extracto en agua destilada definiendo la longitud de onda de máxima adsorción y obteniendo la curva de calibración de acuerdo con la ley de Beer -Lambert.

Comparación con un antibiótico comercial mediante pruebas de antibiograma.

Se realizarán pruebas de antibiograma mediante el método de Kirby-Bauer para con ello identificar los halos de inhibición para los extractos de ajo usando los diferentes disolventes (agua, acetona y etanol), el extracto de ajo/GMS y para el antibiótico comercial, iprofloxacino iniciando con la preparación del inóculo con *Escherichia coli* para posteriormente inocular en agar nutritivo utilizando la técnica de estría cruzada. Se llevará a incubación a 36°C por 24 horas. Se tomará una colonia y se inoculará en caldo nutritivo llevando a incubación a 36°C por 24 horas. Pasado ese tiempo se colocará el caldo nutritivo con E. coli en el agar Muller Hinton, se esparcirá y luego se colocará sobre el agar los sensidiscos impregnados con los extractos, ExAj/GMS y el Ciprofloxacino. Se mantendrán bajo incubación a 36°C y se observará si existen halos de inhibición a las 24, 48 y 72 horas.

Técnicas de caracterización empleadas en el desarrollo del Proyecto

Espectroscopía de Infrarrojo.- En esta técnica se observó los modos vibracionales de los grupos funcionales presentes en la estructura de las moléculas (tanto para el Extracto de Ajo como para la GMS). Para ello, se empleó un equipo Nicolet-iS10 Thermoscientific,

obteniendo el promedio de 16 scans, con 4 cm-1 de resolución y ventana espectral de 4000 a 600 cm-1.

Espectroscopía UV-visible.- Esta técnica se realizó para cuantificar la cantidad de Extracto de ajo desorbido en agua destilada; para ello se obtuvo el espectro del extracto en agua destilada empleando un equipo UV–visible spectrometer (UNICO SQ-2800). El espectro permitió definir una longitud de onda de máxima absorbancia para el Extracto y con ello realizar una pseudo curva de calibración que se utilizó para cuantificar la cantidad de Extracto desorbido.

Isotermas de Adsorción-Desorción de N2.- Esta técnica permite determinar la porosidad formada en la estructura de la SM-silicato a través de la determinación de sus propiedades texturales como lo son el área superficial, volumen de poro y tamaño de poro. Para ellos se estarán obteniendo las isotermas de adsorción-desorción de N2 a 77K; empleando un equipo Micromeritics ASAP–2010 instrument; las muestras se estarán desgasificando por 12 hr a 180 °C y 71 mmHg antes de su medición.

Microscopía Electrónica de Barrido.- Esta técnica permitirá observar la morfología de la GMS; se observó empleando un Equipo JOEL-6510 plus, observando la sílice depositada en una cintilla de carbono.

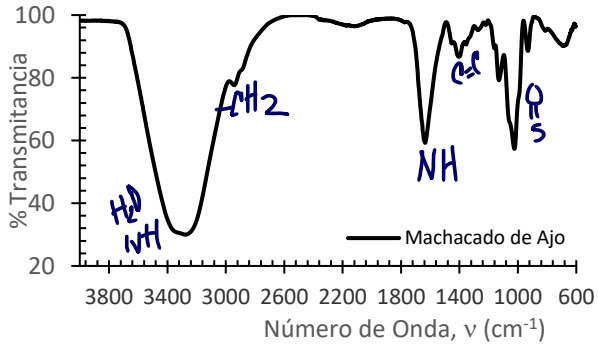
Análisis Termogravimétrico.- Se empleó para cuantificar la capacidad de adsorción máxima de ExAj en la GMS; para ello se utilizó una mufla Felisa 2000 donde se calcinó la cantidad de muestra de ExAj/GMS conocida, determinando por pérdida de peso la cantidad de extracto adsorbido en la sílice.

RESULTADOS

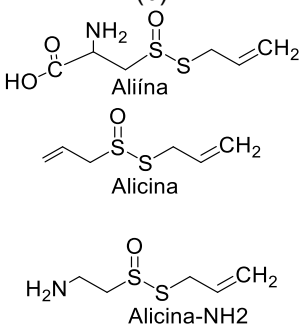
Extractos de Ajo (Allium Sativum)

La Figura 2a muestra el espectro de infrarrojo obtenido para el machacado de ajo presentó a 3600cm^{-1} una banda ancha que corresponde a humedad y grupo amino, el cual también se observó a 1614 cm^{-1} la banda correspondiente al N-H de deformación. A 1016 cm^{-1} se presenta la banda intensa del grupo S=O; y a 1427 cm^{-1} las señales correspondientes a los dobles enlace, a 2900 cm^{-1} el grupo -CH y CH_2. Por lo que, se propone que el machacado forma una estructura de alicina aminada, como se muestra en la Figura 2b. Los extractos mostraron espectros de infrarrojo idénticos independientemente del tipo de disolvente empleado, lo que hace una diferencia es la temperatura a la cual se eliminó este. Cuando la temperatura fue mayor a los 60°C, se tiene una estructura química similar al del ajo machacado (alicina aminada) con un grupo carbonilo, 1723 cm^{-1}; lo que indica la presencia de aliína (Figura 2c) mientras que, si el disolvente se eliminó a una temperatura inferior a los 60°C, se tiene como predominante la extracción de alicina-aminada (Figura 2d).

(a)



(b)



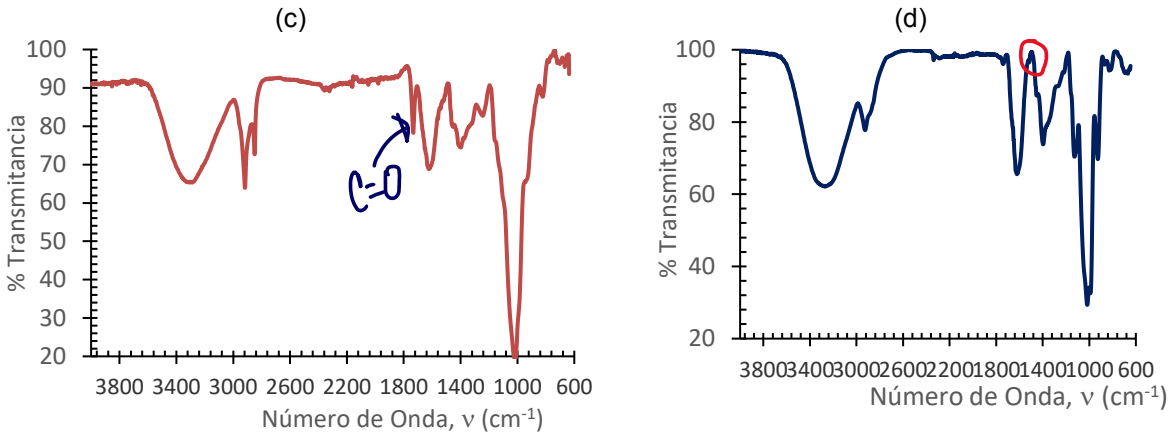


Figura 2. Espectros de infrarrojo (a) ajo machacado (b) estructuras de compuestos sulfurados presentes en el ajo (c) Extracto de ajo obtenido en agua secado a T>60°C (d) Extracto de ajo en etanol secado a T< 60°C

Por otra parte, se obtuvieron los espectros de UV-visible para los extractos observando dos bandas de absorción; λ1 a 307 nm y l2 a 247 nm (véase Figura 3a). Las cuales se asignaron para aliína y alicina respectivamente [14]. La Figura 3b muestra una seudocurva de calibración obtenida para la alicina, mostrando una R^2 de 0.9819; mientras que la seudocurva de calibración para la aliína presento una R^2 de0.9929 (Figura 3c).

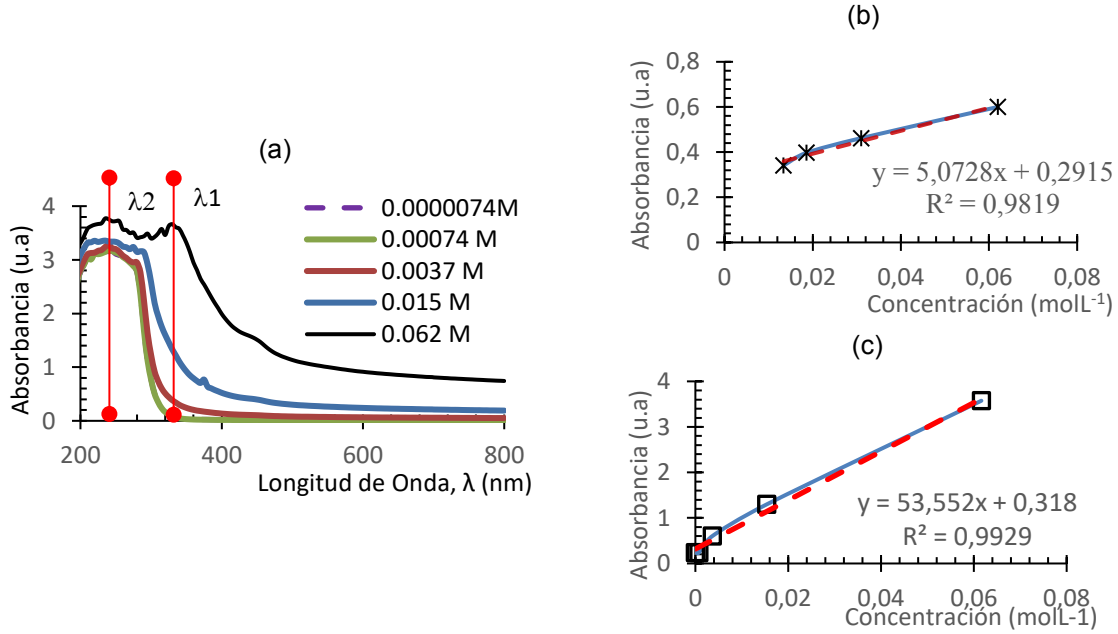


Figura 3. Caracterización por Espectroscopía de UV-visible para los extractos de ajo (a) Espectros de UV-visible a diferente concentración (b) Curva de calibración para la alicina a λ de 247 nm (c) Curva de calibración para aliína a λ de 307 nm

Caracterización de la Sílice Mesoporosa (GMS)

La Figura 4, muestra un resumen de la caracterización de la GMS; donde el espectro de infrarrojo (véase Figura 4a) muestra la formación de la red del solido inorgánico con presencia de agua fisisorbida (3600 cm^{-1} y 1600 cm^{-1}), el enlace siloxano a 1100 cm^{-1} y 780 cm^{-1} y a 920 cm^{-1} la presencia de grupos silanoles. La Figura 4b muestra la isoterma de adsorción-desorción de N_2 para este material, mostrando un comportamiento de material meso-poroso con un área superficial BET

de 496.5 $m2g^{-1}$; volumen de poro de 0.552 $cm3g^{-1}$ y dos distribuciones de poros a 3.65 nm y 6.55 nm. Finalmente, en la Figura 4c se muestra la microscopia electrónica de barrido, donde se observa la formación de aglomerados de estructuras aglomeradas que conforman la porosidad del material (marcadas con círculo rojo).

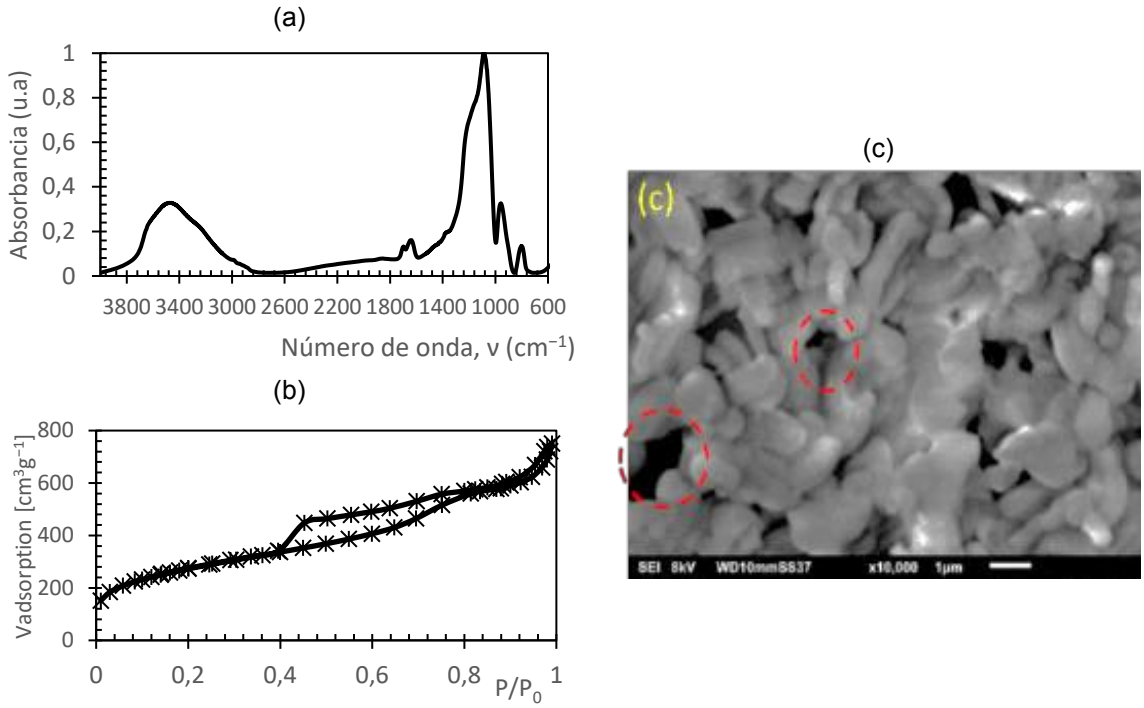


Figura 4. Caracterización de la GMS (a) Espectroscopía de infrarrojo mostrando la formación del sólido inorgánico SiO_2 (b) isoterma de adsorción-desorción de N_2 mostrando un comportamiento como material meso-poroso (c) Microscopia electrónica de barrido

Capacidad De Adsorción Del Extracto En la GMS

La Tabla 2 muestra la capacidad de adsorción del extracto de ajo en la GMS; el cual se realizó por impregnación simple manteniendo en contacto la GMS en la disolución del extracto en agua por 30 min. Teniendo un 8% peso de humedad y 9.2 % de capacidad de adsorción del extracto (fracción orgánica).

Tabla 2. Capacidad de adsorción de ExAjo GMS calculados por gravimetría

		% peso
GMS	Agua fisisorbida y Si-OH	8
GMS/Ext.Ajo	Agua fisisorbida y Si-OH Ex.Ajo	8 9.2

Cinética de Deserción del Extracto Adsorbido en la GMS a Diferentes pH

La Figura 4a muestra la cinética de desorción para la alicina, donde se muestra una dependencia en la desorción del componente con el pH, siendo mayor para pH de 5 y menor en el pH de 3. Estos perfiles muestran un comportamiento de desorción controlado, lo que se debe a las interacciones de la molécula orgánica con la superficie de la sílice. Por otra parte, el valor máximo desorbido fue de3 13% en peso con respecto al total de fracción orgánica adsorbida en la sílice; que no es solamente alicina, esta contiene alicina, aliína y diferentes compuestos sulfurados.

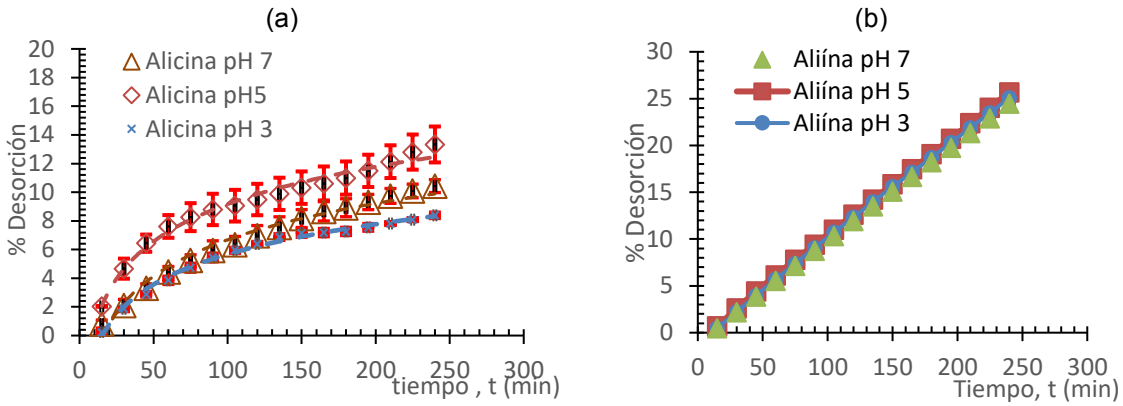


Figura 4. Cinética de desorción a diferentes pH (a) Alicina (b) Aliína

Por otra parte, la Figura 4b muestra la cinética de desorción para la aliína, donde se tiene un comportamiento lineal sin dependencia con el pH, indicando que la desorción de este compuesto es por difusión y depende únicamente de la solubilidad de éste en el medio. El porcentaje de desorción máximo calculado fue del 25%. Debido a que se tiene una mezcla de diferentes componentes no se puede indicar si este valor corresponde a la totalidad de aliína en la mezcla del extracto.

Actividad Biológica del Extracto de Ajo

La Figura 5 muestra el resultado obtenido en las pruebas de antibiograma para los extractos obtenidos en los diferentes disolventes y se comparan con la actividad mostrada por un fármaco comercial (ciprofloxacino). Los tres extractos presentaron similar actividad biológica, el halo de inhibición para la *E-coli* fue de 1.73-1.96 cm; empleando una concentración de extracto en cada sensidisco de 478 μg. El fármaco comercial presento un halo de 1.37 cm; sin embargo, su concentración fue 239 veces menor al del extracto natural, por lo que se puede concluir que, si bien el extracto presenta actividad antimicrobiana, la concentración requerida para observarla es muy elevada con respecto a un fármaco sintético.

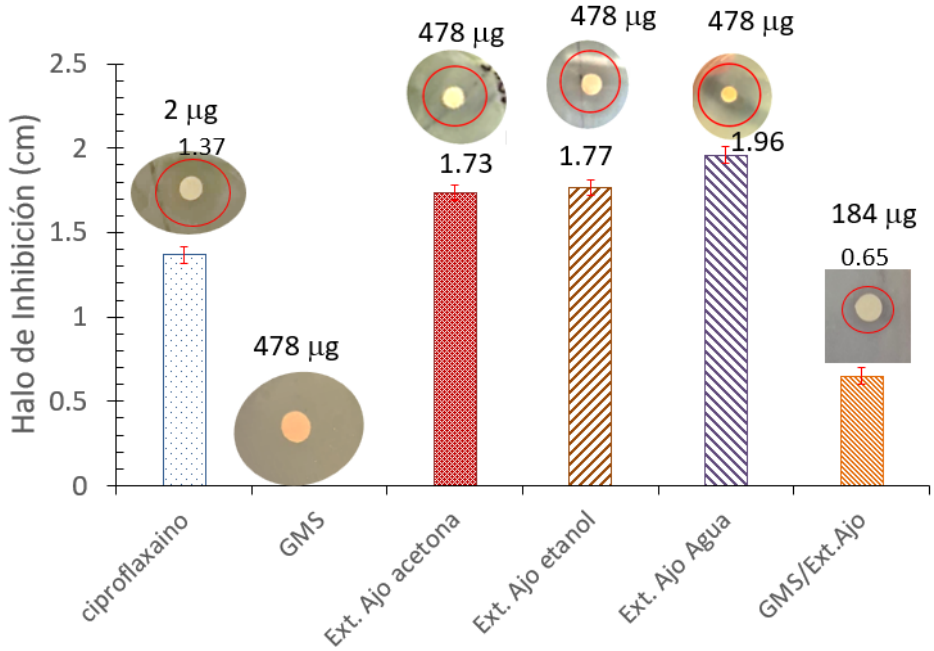


Figura 5. Resultados de la prueba de antibiograma para el extracto natural y extracto adsorbido en GMS comparado con la de un fármaco comercial.

Por otra parte, la sílice sin extracto no mostro actividad antimicrobiana y la GMS/ExtAj mostró un halo de 0.65 cm con una concentración de extracto de 184 μg con una concentración de 2.60 veces menor que la empelada con el extracto solo. Este resultado indica que la GMS puede ser utilizado como excipiente para el extracto sin disminuir su actividad biológica, teniendo como ventaja la dosificación controlada como se observó en los perfiles de desorción para la alicina.

CONCLUSIONES

El extracto obtenido presentó los mismos grupos funcionales, de acuerdo con los espectros de infrarrojo; indicando que se obtiene la misma mezcla independientemente del disolvente empleado. Sin embargo, la temperatura de secado si influye en la composición de la mezcla. Extractos secados con T>60°C favorece la formación de aliína (donde se observa el grupo carbonilo de este compuesto) mientras que extracto secado con T< 60°C se favorece la extracción de una Alicina-NH_2.

La GMS presentó una capacidad de adsorción del extracto de ajo del 9.2%peso; el cual se introduce dentro los poros del sólido. No se logró tener la saturación total de la sílice; debido al disolvente empleado para la impregnación. 3. De acuerdo con los resultados de los perfiles de desorción para la alicina se mostró una dependencia con el pH; teniendo una mayor desorción para el pH 5; mientras que los perfiles obtenidos para la Aliína fueron lineales, sin mostrar dependencia con el pH. Los extractos de ajo y la GMS/ExAj inhiben el crecimiento de *e.coli* formando halos de inhibición, esto debido a la actividad antimicrobiana de los tiosulfinatos.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen a la Secretaría de Investigación y Posgrados del Instituto Politécnico Nacional por su apoyo a través del programa de Proyecto **SAPPI 2026-IND-0156**

BIBLIOGRAFÍA

1. Savairam V.D, Patil N.A, Borate S.R, Ghaisas M.M, Shete R.V (2023) Allicin: A review of its important pharmacological activities, Pharmacological Research-Modern Chinese Medicene, 8, 100283.
2. Valqui, W., & Inga, R. (2022). Efecto del extracto de ajo (Allium sativum) en el control de los tres principales agentes infecciosos de la mastitis bovina. Revista Científica Dékamu Agropec, 2, 9-17.
3. Verma T, Aggarwal A, Dey P, Chauhan AK, Rashid S, Chen K-T and Sharma R (2023) Medicinal and therapeutic properties of garlic, garlic essential oil, and garlic-based snack food: An updated review. Front. Nutr. 10:1120377.
4. Tadele KT, Zerssa GW. (2021) Specific plant nutrients and vitamins that fortify human immune system. In: Husen A editor. Traditional herbal therapy for the human immune system. Boca Raton, FL: CRC Press.p. 363–96.
5. Thuy BTP, My TTA, Hai NTT, Hieu LT, Hoa TT, Thi Phuong Loan H, et al. (2020) Investigation into SARS-CoV-2 resistance of compounds in garlic essential oil. ACS Omega. 5:8312–20
6. Sativi BA. WHO. (1999). Monographs on Selected Medicinal Plants, Vol.1. Geneva:World Health Organization 16–32.
7. Idris AR, Afegbua SL. (2017) Single and joint antibacterial activity of aqueous garlic extract and Manuka honey on extended-spectrum beta-lactamase-producing Escherichia coli. Trans R Soc Trop Med Hyg. 111:472–8.
8. Jain I, Jain P, Bisht D, Sharma A, Srivastava B, Gupta N. (2015) Comparative evaluation of antibacterial efficacy of six Indian plant extracts against Streptococcus mutans. J Clin Diagn Res. 9:ZC50.
9. Wu X, Santos RR, Fink-Gremmels J. (2015) Analyzing the antibacterial effects of food ingredients: model experiments with allicin and garlic extracts on biofilm formation and viability of Staphylococcus epidermidis. Food Sci Nutr. 3:158–68.
10. Benko F, Kristó K, Sovany T (2025) Mesoporous Silica Nanoparticles as Drug Delivery Systems, Parmaceuticals, 18(9) 1392

11. Khoz R, Yazdian F, Pourmadadi M, Rahdar A, Fathi-Karkan S, Pandey S (2024) Current trends in silica based drug delivery systems, European Journal of Medicinal Chemistry Reports, 12, 100206
12. Salazar-Hernández C, Salazar-Hernández M, Mendoza-Miranda J.M, León-Reyes M.R, Rocha-Ramírez A.H (2024) Mesoporous Silica-Based Drug Delivery Systems Obtained from Sodium Silicate as an Economical Synthesis. In Trends and Challenges in Multidisciplinary Research for Global Sustainable Development. (Ed) Hernández-Ponce A.M, Escobar K.M, Canales Hernández L.D, Zea Ortiz M, Sánchez-Alonso R.E, Springer, ISBN 978-3-031-57619-5
13. Salazar-Hernández C, Salazar-Hernández M, Elorza-Rodríguez E, Mendoza-Miranda J.M, Miranda-Avilés R, León-Reyes M.R, Rodríguez-Dahmlow J.E (2026) Cr(III) Adsorption on Green Mesoporous Silica: Effect of Amine Functionalization and pH, Process, 1482), 358
14. Farias A, Pollonio M.A., Meireles M.A.A, (2014) Allicin-Rich Extract Obtained from Garlic by Pressurized Liquid Extraction: Quantitative Determination of Allicin in Garlic Samples, Food and Punlic Health, 4(6) 272-278.

ANÁLISIS COMPARATIVO DEL GRADO DE INHIBICIÓN DE DIVERSAS BACTERIAS PATÓGENAS

Jessica Dhamar Salinas Avelar[1], Rubén Octavio Méndez Márquez[1], Rosalinda Gutiérrez Hernández[2]

[1]Programa Académico de Químico Farmacéutico Biólogo, Unidad Académica de Ciencias Químicas. [2]Programa Académico de Nutrición, Unidad Académica de Enfermería. Universidad Autónoma de Zacatecas,
42101955@uaz.edu.mx

RESUMEN

Las infecciones causadas por bacterias patógenas representan un desafío creciente para la salud publica debido al aumento sostenido de cepas resistentes a los antimicrobianos convencionales, lo que ha disminuido la eficacia de los tratamientos disponibles y ha impulsado la búsqueda de nuevas alternativas terapéuticas. En este contexto, los péptidos antimicrobianos (AMPs), moléculas naturales que forman parte del sistema inmunitario innato y que actúan principalmente mediante la alteración de la integridad de la membrana celular bacteriana, emergen como candidatos prometedores por su amplio espectro de acción y su potencial selectividad.1
El presente estudio tuvo como objetivo evaluar y comparar la actividad antimicrobiana de distintos AMPs frente a cepas bacterianas representativas, así como analizar su concentración mínima inhibitoria (MIC), su actividad hemolítica y su estabilidad térmica. Para ello, se empleó el método de microdiluciones en placas de 96 pozos, utilizando inóculos bacterianos estandarizados e incubación a 37°C. La MIC se definió como la menor concentración capaz de inhibir el crecimiento bacteriano visible. Adicionalmente, se realizaron ensayos de hemolisis sobre eritrocitos equinos para estimar la posible citotoxicidad de los péptidos y pruebas de termoestabilidad para determinar la conservación de su actividad tras la exposición a distintas temperaturas.2

Los resultados evidenciaron variaciones en la potencia antimicrobiana entre los péptidos evaluados algunos compuestos mostraron valores de MIC bajos indicando alta eficacia inhibitoria a concentraciones reducidas mientras que otros requirieron concentraciones mayores para lograr efectos comparables. En general, la mayoría de los péptidos presentó baja o nula actividad hemolítica, lo que sugiere un perfil de selectividad favorable hacia células bacterianas en comparación con células animales. Asimismo, varios AMPs como el Cap 11 y la melitina conservaron su actividad antimicrobiana después de someterse a diferentes condiciones térmicas, demostrando una estabilidad de relevante para su posible aplicación clínica.

En conjunto, los hallazgos respaldan el potencial de los péptidos antimicrobianos como alternativas terapéuticas frente a bacterias patógenas, incluidas aquellas resistentes a múltiples fármacos. Su eficacia inhibitoria, baja citotoxicidad relativa y adecuada estabilidad térmica los posicionan como candidatos prometedores para el desarrollo de nuevas estrategias antimicrobianas, ya sea como agentes individuales o en terapias combinadas orientadas a mitigar el problema global de la resistencia microbiana.

INTRODUCCIÓN

Las infecciones causadas por bacterias patógenas representan un desafío creciente para la salud publica debido al aumento sostenido de cepas resistentes a los antimicrobianos convencionales, lo que ha disminuido la eficacia de los tratamientos disponibles y ha impulsado la búsqueda de nuevas alternativas terapéuticas. En este contexto, los péptidos antimicrobianos (AMPs), moléculas naturales que forman parte del sistema inmunitario innato y que actúan principalmente mediante la alteración de la integridad de la membrana celular bacteriana, emergen como candidatos prometedores por su amplio espectro de acción y su potencial selectividad.[1]

El presente estudio tuvo como objetivo evaluar y comparar la actividad antimicrobiana de distintos AMPs frente a cepas bacterianas representativas, así como analizar su concentración mínima inhibitoria (MIC), su actividad hemolítica y su estabilidad térmica.

TEORÍA

La caracterización microbiológica precisa y la evaluación de la actividad antimicrobiana constituyen pilares fundamentales en la investigación epidemiológica y el desarrollo de alternativas bioterapéuticas. En la actualidad, la identificación fenotípica de bacterias patógenas ha evolucionado hacia la automatización mediante plataformas robóticas como los sistemas VITEK 2 y BD Phoenix 100, entro algunos otros disponibles actualmente. Estos equipos optimizan la precisión diagnóstica a través de tarjetas o paneles con sustratos bioquímicos deshidratados y lecturas cinéticas colorimétricas o fluorométricas, minimizando el error humano y acelerando la determinación de perfiles taxonómicos complejos (De Bel et al., 2021; Zafer et al., 2025). La validez de cualquier estudio experimental de antagonismo bacteriano depende críticamente de esta etapa previa, ya que la variabilidad en los determinantes genéticos y fenotípicos de las cepas blanco puede alterar significativamente su susceptibilidad frente a los agentes inhibidores bajo evaluación.

Una vez establecida la identidad bioquímica de los patógenos, el estudio del antagonismo o de la eficacia de compuestos inhibidores requiere la combinación de metodologías reproducibles que evalúen tanto la difusión del agente como su concentración efectiva. Los métodos de difusión en disco y pocillo en agar son herramientas cualitativas y semicuantitativas esenciales; su fundamento radica en la migración radial del compuesto activo a través de la matriz del agar a partir de un reservorio central, generando un gradiente de concentración que interrumpe el crecimiento bacteriano visible y produce un halo de inhibición medible en milímetros (Balouiri et al., 2022; Magaldi et al., 2024). Sin embargo, debido a que estos halos están influenciados por factores físicos como el peso molecular y la solubilidad de las sustancias, se vuelve esencia contrastar dichos resultados con métodos de dilución en caldo. La microdilución permite determinar con exactitud la Concentración Mínima Inhibitoria (CMI) mediante el contacto directo y homogéneo del inóculo bacteriano con concentraciones decrecientes del antimicrobiano en un medio líquido, sirviendo además como el estándar de referencia analítico para validar la sensibilidad y reproducibilidad reportada por las plataformas automatizadas (Riaz et al., 2023).

PARTE EXPERIMENTAL

Para ello, se empleó el método de microdiluciones en placas de 96 pozos, utilizando inóculos bacterianos estandarizados e incubación a 37°C. La MIC se definió como la menor concentración capaz de inhibir el crecimiento bacteriano visible. Adicionalmente, se realizaron ensayos de hemolisis sobre eritrocitos equinos para estimar la posible citotoxicidad de los péptidos y pruebas de termoestabilidad para determinar la conservación de su actividad tras la exposición a distintas temperaturas.[2]

Identificación fenotípica: esta se realizó mediante la utilización del equipo semiautomatizado Vitek 2 de la casa comercial BIOMERIEUX (Figura 1), el cual arrojo información de identificación y susceptibilidad a antibióticos (Tabla 1). El uso de VITEK 2 proporciona un filtro de verificación fenotípica (perfiles bioquímicos/fluorométricos), disminuyendo el margen de error en la identificación de las cepas analizadas antes de someterlas a los ensayos de antagonismo por triplicado mediante los métodos manuales de difusión y dilución.



Figura 1. Equipo automatizado Vitek® 2.

RESULTADOS

Los resultados evidenciaron variaciones en la potencia antimicrobiana entre los péptidos evaluados algunos compuestos mostraron valores de MIC bajos indicando alta eficacia inhibitoria a concentraciones reducidas mientras que otros requirieron concentraciones mayores para lograr efectos comparables. En general, la mayoría de los péptidos presentó baja o nula actividad hemolítica, lo que sugiere un perfil de selectividad favorable hacia células bacterianas en comparación con células animales. Asimismo, varios AMPs como el Cap 11 y la melitina conservaron su actividad antimicrobiana después de someterse a diferentes condiciones térmicas, demostrando una estabilidad de relevante para su posible aplicación clínica.

Familia de la bacteria	Bacteria	Identificación	Susceptibilidad a antibióticos
Gram +	*Staphylococcus aureus*	Tipo: Coco Gram positivo. Disposición: Racimos Catalasa: Positiva Coagulasa: Positiva Hemolisis: β- hemolisis frecuente. Hábitat: Piel y mucosas humanas.	▪ Oxaciclina: S (MSSA)/ R (MRSA) ▪ Cefazolina: S ▪ Vancomicina: S ▪ Linezolid: S ▪ Clindamicina: S/R ▪ Eritromicina: R frecuente ▪ Gentamicina: S ▪ Trimetoprim-Sulfametoxazol: S
	Streptococcus pneumoniae	Tipo: Coco Gram positivo. Disposición: Diplococos lanceolados Catalasa: Negativa Hemolisis: α- hemolisis Sensibilidad a optoquina: Positiva Solubilidad en bilis: Positiva	▪ Penicilina: S/R según la cepa ▪ Ceftriaxona: S ▪ Vancomicina: S ▪ Levofloxacino:S ▪ Eritromicina: R frecuente ▪ Clindamicina: S/R ▪ Linezolid: S
Gram -	*Enterobacter cloacae*	Tipo: Bacilo Gram negativo Familia: Enterobacteriaceae Oxidasa: Negativa Lactosa: Fermentación variable Movilidad: Positiva	▪ Ampicilina: R ▪ Amoxicilina/ Ácido clavulánico: R frecuente ▪ Ceftriaxona: S/R (AmpC inducible) ▪ Cefepima: S ▪ Piperacilina/Tazobactam: S ▪ Meropenem: S ▪ Ciprofloxacino: S/R ▪ Gentamicina: S

			▪ Amikacina: S ▪ Trimetoprim- Sulfametoxazol: S/R
	Escherichia coli	Tipo: Bacilo Gram negativo Familia: Enterobacteriaceae Lactosa: Positiva Oxidasa: Negativa Indol: Positiva Movilidad: Positiva	▪ Ampicilina: R frecuente ▪ Amoxicilina/ Acido clavulánico: S/R ▪ Ceftriaxona: S ▪ Cefepima: S ▪ Ciprofloxacino: S/R ▪ Gentamicina: S ▪ Amikacina: S ▪ Meropenem: S ▪ Trimetoprim-Sulfametoxazol: S/R

Tabla 1. Identificación y susceptibilidad que se obtuvo del análisis semi automático con el equipo Vitek® 2.



Figura 2. Caja Petri en medio MS, *Bacteria Staphylococcus aureus.*

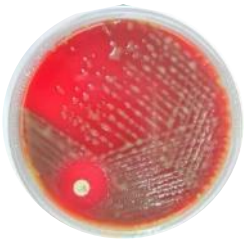


Figura 3. Caja Petri en medio AS, *Bacteria Streptococcus pneumoniae.*



Figura 4. Caja Petri en medio MC, *Bacteria Enterobacter cloacae.*



Figura 5. Caja Petri en medio AS, *Bacteria Escherichia coli.*

CONCLUSIONES

En conjunto, los hallazgos respaldan el potencial de los péptidos antimicrobianos como alternativas terapéuticas frente a bacterias patógenas, incluidas aquellas resistentes a múltiples fármacos. Su eficacia inhibitoria, baja citotoxicidad relativa y adecuada estabilidad térmica los posicionan como candidatos prometedores para el desarrollo de nuevas estrategias antimicrobianas, ya sea como agentes individuales o en terapias combinadas orientadas a mitigar el problema global de la resistencia microbiana.

BIBLIOGRAFÍA

1. Balouiri, M., Sadiki, M., & Ibnsouda, S. K. (2022). Methods for screening and evaluation of antimicrobial activity: A review of current protocols and future perspectives. Journal of Microbiological Methods, 193, Article 106401. https://doi.org/10.1016/j.mimet.2021.106401
2. Breidenstein,E.B.M., de la Fuente Ñuñez ,C,& Hancock, R.E.W. (2011). *Pseudomonas aeruginosa*: All roads lead to resistance. Trends in Microbiology. 19 (8). P 419- 426. https://doi.org/10.1016/i.tim.2011.04005
3. De Bel, A., de Vos, D., Vanhee, L., Wybo, I., & Pierard, D. (2021). Comparative evaluation of the BD Phoenix and VITEK 2 automated systems for identification and antimicrobial susceptibility testing of clinically relevant gram-negative and gram-positive pathogens. European Journal of

Clinical Microbiology & Infectious Diseases, 40(8), 1689–1698. https://doi.org/10.1007/s10096-021-04195-w

4. Ebbensgaard A, Mordhorst H, Overgaard MT, Nielsen CG, Aarestrup FM, et al. (2015) Comparative Evaluation of the Antimicrobial Activity of Different Antimicrobial Peptides against a Range of Pathogenic Bacteria. PLOS ONE 10(12): e0144611. https://doi.org/10.1371/journal.pone.0144611
5. Magaldi, S., Mata-Essayag, S., Hartung de Capriles, C., Perez, C., Colella, M. T., Olaizola, C., & Ontiveros, Y. (2024). Well diffusion approach for assessing bacterial antagonism and natural compound inhibition: Standardization and critical variables. Research in Microbiology, 175(3), Article 104112. https://doi.org/10.1016/j.resmic.2023.104112
6. Riaz, S., Jamil, B., & Rahman, S. U. (2023). Comparison of manual broth microdilution with automated system VITEK 2 and BD Phoenix for profiling multidrug-resistant foodborne and clinical bacterial isolates. Frontiers in Cellular and Infection Microbiology, 13, Article 1104523. https://doi.org/10.3389/fcimb.2023.1104523
7. Zafer, M. M., El-Mahallawy, H. A., & Al-Agamy, M. H. (2025). Performance and accuracy tracking of phenotypic automated platforms (VITEK 2 vs. BD Phoenix 100) in the precise identification of critical nosocomial bacterial pathogens. Journal of Infection and Public Health, 18(2), 241–248. https://doi.org/10.1016/j.jiph.2024.11.015

PRODUCCIÓN DE JABÓN ECOLÓGICO A PARTIR DE RESIDUOS DOMÉSTICOS: UNA ALTERNATIVA PARA LA GESTIÓN SOSTENIBLE DE ACEITES DE COCINA USADOS Y DESECHOS DE CAFÉ

María Elena Becerra Mercado, Jorge Padilla Alvarez, Luz María Ibarra Velázquez, Ana Luisa Madriz Elisondo, Elba Karina Aragón Ríos, José Luis Gazpar Castellanos, Marco Antonio Cardona López.

Centro Universitario de la Ciénega. Universidad de Guadalajara.
maria.bmercado@académicos.udg.mx

RESUMEN

La actual crisis ambiental que enfrenta el planeta ha impulsado la adopción de nuevos modelos de producción y aprovechamiento de recursos, así como el desarrollo de consumidores con hábitos de compra más responsables social y ambientalmente. En este contexto, la valorización de residuos orgánicos surge como estrategia para reducir el impacto ambiental y promover alternativas sustentables. La elaboración del jabón tiene sus orígenes en antiguas civilizaciones como Babilonia (alrededor del 2800 a.C.), Egipto (1500 a.C.) y Fenicia (600 a.C.). La generación de residuos orgánicos representa un problema ambiental significativo. Un ejemplo es el consumo de café que genera grandes cantidades de residuos; en México se estima que se eliminan más de 150 millones de kilogramos anuales. Su aprovechamiento, junto con el reciclaje de aceites de cocina usados, permite elaborar jabones ecológicos que reducen desechos y promueven el cuidado ambiental y consumo responsable. El aceite de cocina se usa aproximadamente 1,280 millones de litros anualmente, de los cuales una proporción considerable originada tanto de hogares como de industria alimentaria y gastronómica, es desechada incorrectamente. De acuerdo con SEMARNAT (2015). Un litro puede contaminar hasta mil litros de agua, por lo que el aceite usado representa un residuo que afecta negativamente al medio ambiente y la salud.

El objetivo es elaborar un jabón sólido biodegradable a partir de aceites de cocina reciclados y residuos de café, utilizando un proceso artesanal libre de químicos sintéticos, y determinar, a través de una encuesta aplicada el aprovechamiento y disposición final de residuos de café, con el propósito de implementar estrategias de valorización sustentable y emprendimiento responsable. La metodología se desarrolló bajo un enfoque mixto, integrando una fase experimental y una descriptiva. Fase experimental: Los aceites recolectados se filtraron y se sometieron a saponificación en frío con materias primas naturales. Se añadieron residuos de café como exfoliante y la mezcla se vertió en moldes, dejándola curar de 3 a 4 semanas hasta obtener un jabón sólido y estable.

Fase descriptiva: Se trabajó con una muestra por conveniencia de 51 participantes (consumidores, empleados y propietarios de cafeterías) y se aplicó una encuesta para analizar el manejo de residuos de café y el conocimiento sobre prácticas sustentables. Los datos se analizaron con estadística descriptiva, utilizando frecuencias y porcentajes para la interpretación de resultados, permitiendo identificar tendencias y áreas de oportunidad para su aprovechamiento. Con base en los resultados, se propusieron estrategias para aprovechar los residuos de café.

El Jabón elaborado presentó buena consistencia, aroma agradable y capacidad de limpieza. En la encuesta, se identificó que el 80% de los participantes consume café de manera habitual, el 43% indicó que desecha los residuos de café en la basura, lo que refleja un área de oportunidad en su aprovechamiento. El 84% manifestó disposición para adoptar alternativas sostenibles. Se concluye que la producción de un jabón biodegradable con aceites de cocina reciclados tratados y residuos de café es una alternativa viable, funcional y sustentable, con generación de utilidades para el productor. Se observa que existe disposición en la población estudiada para adoptar estas soluciones, favoreciendo el aprovechamiento de los residuos.

INTRODUCCIÓN

La actual crisis ambiental que enfrenta el planeta ha impulsado la adopción de nuevos modelos de producción y aprovechamiento de recursos, así como el desarrollo de consumidores con hábitos de compra más responsables social y ambientalmente.[6]

Los jabones ecológicos son una opción capaz de brindarle al medio ambiente y al consumidor grandes beneficios, y están hechos con ingredientes puros y naturales.

En el origen del jabón algunas fuentes indican que comenzó en Babilonia alrededor del 2800 a.c, en Egipto hacia el 1500 a.c, o en Fenicia en el 600 a.c[12]. A partir del siglo IX, se evidencia que la fabricación de jabón se inicia y crece en Marsella en Francia y Savona en Italia.[23]

Es conocido que Galeno, un médico griego gano renombre en el imperio romano, menciono la importancia del jabón para la limpieza corporal como medida para prevenir enfermedades[1,6.]

La elaboración de un jabón natural minimiza significativamente el impacto ambiental al evitar sustancias químicas contaminantes y procesos industriales altamente intensivos, se reduce considerablemente el consumo de recursos esenciales como agua y energía. Los residuos del jabón que llegan a drenajes son biodegradables y no causan daños a ecosistemas, pudiendo incluso reutilizarse como agua de riego para plantas, gracias a su naturaleza inocua. Además se puede reducir considerablemente la acumulación de desechos orgánicos, y los más generados diariamente como un ejemplo el café.[10, 11]

La acumulación de residuos orgánicos y los más generados diariamente como un ejemplo el café que en México se tiran cada año más de 150 millones de kilos. Optar por la reducción y reciclado de estos residuos para elaboración de jabones utilizando también residuos de aceite de cocina usado, es una alternativa fácil y con grandes beneficios para cuidado del planeta. México consume aproximadamente 1280 millones de litros de aceite de cocina al año. Se estima que una parte significativa del aceite (alrededor de la mitad proviene de hogares y la otra mitad de la industria alimentaria/gastronomía) desechando de manera inadecuada, en drenaje. SEMARNAT 2015 y otras fuentes refieren que un solo litro de aceite puede contaminar hasta mil litros de agua.[28]

El aceite vegetal usado es un residuo que en la actualidad no recibe un tratamiento adecuado, lo que genera efectos dañinos para el medio ambiente y salud humana.[11]

El uso de aceites vegetales a nivel poblacional se encuentra en mayor proporción en hogares, restaurantes, instituciones, entre otros. Una gran parte se utilizan para las frituras, que son de consumo popular, en este proceso, al aumentar la temperatura y adicionar un alimento para su cocción, afecta las condiciones químicas del aceite, ya que se presentan un gran número de reacciones que pueden dar como resultado la formación de compuestos tóxicos y nocivos como polímeros, monómeros de ácidos grasos, estructuras trans y/o compuestos polares; esto sucede en el rango de temperatura a la cual los alimentos son preparados (175-185°C), lo que limita la reutilización del aceite y es necesario desecharlo. La mayoría de las personas lo arrojan por los desagües, una vez en los ríos o en el mar el aceite altera la correlación de oxígeno y agua, daña los ecosistemas acuáticos y pone en peligro múltiples especies de animales y plantas.[24]

Los restaurantes de comida rápida en promedio desechan entre 70 L y 100 L de aceite cada 15 días por establecimiento, las franquicias de McDonalds, Burger King, Carl's Jr., KFC y Wings Army en su conjunto suman más de 1,200 restaurantes en México (INEGI, 2014); con estos datos se estima un promedio de más de 10,000 L de aceite sucio generados diariamente. Una alternativa para el aprovechamiento de los aceites residuales es la conversión a biodisel, como lo hace la empresa mexicana Biofuel que se dedica a la recolección y reciclaje de aceite vegetal desde el 2015 (Rosas Barajas et. al., 2018) Sin embargo, en algunos estudios realizados principalmente en países como Ecuador (N. Bombón y M. Albuja., 2014), Perú (A. Davis Fernández, et. al., 2020) y Colombia (M. Y.

Arias Rodríguez y D. M. Ibarra Mojica, 2018) demuestran que se puede obtener jabón a partir de aceites residuales. [3,4,8,15,26]

Optar por la reducción de estos residuos con la elaboración jabones ecológicos a base de residuos de café y aceite de cocina usado, es una alternativa fácil sostenible y con grandes beneficios en la vida cotidiana y cuidado del planeta[17].

Existen pocos estudios en México que buscan el reciclado del aceite residual por lo que el objetivo del presente trabajo es tener un enfoque mixto: Una fase experimental que consta de elaborar un jabón sólido y biodegradable a partir de aceites de cocina reciclados y residuos de café utilizando un proceso artesanal libre de químicos sintéticos.

Una fase descriptiva con el objetivo, determinar a través de una encuesta aplicada a 51 consumidores, empleados y propietarios de cafeterías, para conocer el aprovechamiento y destino final de residuos de café así como su disposición de adoptar la estrategia con el fin de implementarla y lograr un emprendimiento responsable además recuperar residuos como gesto ecológico para concientizar un estilo de vida sustentable

TEORIA

El aceite de cocina usado hoy en día se ha convertido en la contaminación silenciosa de las aguas y del medio ambiente, porque después del preparado de las exquisiteces culinarias, el residuo del aceite por la gran mayoría de personas es eliminado por el lavaplatos, llegando a atascar los alcantarillados y contaminar los mares, ríos y acuíferos, como el caso memorable que ocurrió en la capital Británica en el año 2015 cuando se produjo la ruptura de sus cañerías por la formación de un fatberg (bloque de grasa) el cual era un coágulo de 10 toneladas de grasa de acumulación silenciosa que se formó a partir de los residuos de aceite que fueron eliminados desde los domicilios y restaurantes a los desagües urbanos.(Ladera Sur, 2019)

Los aceites vegetales son extraídos por diferentes procesos físicos y son usados principalmente para el consumo mediante la elaboración de subproductos.[2]

De acuerdo con Durán, Torres y Sanhueza (2015)[9] los aceites son una de las sustancias más utilizadas por los seres humanos desde su aparición, y se han destinado al uso alimenticio y combustible, además se caracterizan por que sus principales componentes son los triglicéridos, que puede ser uno o la mezcla de varios. Si la mezcla de estos triglicéridos es sólida a temperatura ambiente se denomina grasa y si es líquida, aceite. Existen aceites que pueden ser muy viscosos y otros que pueden ser más suaves, por ejemplo, el aceite de palma es suave y el aceite de oliva es líquido, mientras que aceites como el de canola, maíz, algodón, maní, soya y girasol son muy líquidos. (Ening, 1991).

En cuanto a impactos ambientales, varios autores señalan los efectos de la disposición de aceites de cocina usados (ACUs), que impactan los ecosistemas de diferentes formas. En primer lugar, los ACUs tienen un impacto sobre el recurso hídrico, de hecho, el Consejo Nacional de Seguridad resaltó el trabajo de González & González (2012),[13] quienes establecieron que un litro de aceite de cocina usado puede llegar a contaminar la misma cantidad de agua que consume una persona al año puesto que al entrar en contacto con el agua los aceites forman una capa que retiene otros residuos sólidos, así mismo, se señala que este residuo contiene 5.000 veces más carga contaminante que otros tipos de aguas residuales que circulan por las alcantarillas. Aunque esta cifra es altamente significativa, se consideran otras cifras más conservadoras como las que señalan que un litro del mismo líquido oleoso solo contamina 1.000 litros de agua. [27]

Autores como Larrota (2020), señalaron que los impactos ambientales por la inadecuada disposición de ACUs son relativamente bajos cuando se eliminan pocas cantidades; resaltando además que el principal efecto está en los sistemas de alcantarillado, los cuales se obstruyen por las

concentraciones de grasa en las tuberías. En ese sentido, los residuos de aceite vertidos por los desagües se unen con los restos de detergentes y jabones, lo cual causa “bolas de grasa”, especialmente cuando la presión del agua es baja, lo que se traduce en atascos; incluso cuando esto se presenta se pueden obstruir las trampas de grasa de los hogares y los restaurantes. [16]

Por lo anterior, se puede evidenciar que los residuos de aceite de cocina usados no solo implican cambios negativos en los ecosistemas y matrices ambientales, sino que también impactan otras áreas que son de alto interés para la población humana y de las cuales se habla más adelante, estas se representan con efectos sociopolíticos y económicos.

La Agencia de Protección Ambiental (EPA, por sus siglas en inglés), señaló que los Aceites de cocina usados (ACUs), pueden cubrir animales y plantas asfixiándolos y perjudicando sus entornos, ya que esto provoca el agotamiento del oxígeno. A lo anterior se suman los olores rancios, la suciedad de las costas, la obstrucción de las plantas de tratamiento de aguas residuales (PTAR) y el bloqueo de tuberías domésticas y caños. De esta forma, dado el origen orgánico del ACU se pueden generar efectos de emisiones directas, como el material particulado y los hidrocarburos aromáticos policíclicos crean graves problemas de salud a largo plazo. En lo que respecta a las PTAR, los residuos ACUs se degradan lentamente y afectan la actividad microbiana, limitando la transferencia de oxígeno, ralentizando la degradación de otros materiales orgánicos [29]

En cuanto a los efectos sociopolíticos, el tema es relevante en materia de salud pública y la protección de la vida humana; precisamente porque la mala gestión de estos residuos o su reciclaje ilegal como producto para el consumo humano a precios más económicos ha traído la muerte de varias personas, especialmente, en las zonas más vulnerables y de bajos ingresos económicos. “Además de la disposición informal, una de las problemáticas más perjudiciales de ACU, se relaciona con la recolección de dicho aceite del sistema de alcantarillado, drenajes y trampas de grasas, con el fin de utilizarse para alimentos después de aplicar un tratamiento”. [29]

Un jabón ecológico o biodegradable propicia la preservación del medio ambiente y es amigable con la piel porque los materiales que contiene son, en su mayoría, naturales. Su composición se basa en aceites saponificados y también incluye pigmentos naturales y aceites esenciales, así como otros aditivos a base de hierbas para mejorar las propiedades de cuidado adicional. Su variedad es inmensa, lo que permite a los fabricantes (Eco Mixers) obtener productos con las funciones y durezas deseadas. Dependiendo de qué aceite o mantequilla se utilice, es posible obtener un jabón con cuidado, limpieza, formación de espuma, así como propiedades nutritivas (PPC, 2021).[20]

El uso de jabones exfoliantes es muy común debido a que sus partículas físicas producen microdermoabrasión. Particularmente, el jabón elaborado a base de café es un producto natural de belleza con increíbles beneficios para la dermis, tanto del rostro como del cuerpo, ya que contiene con propiedades exfoliantes, anticelulíticas, reafirmantes, energizantes y rejuvenecedoras. Si bien, la mayoría de éstos se obtienen del residuo de café, también llamado bagazo o borra, mismo que produce en gran medida las cafeterías.

Los residuos del café ofrecen una infinidad de posibilidades de generar valor agregado. Sin embargo, la transformación de los desperdicios, a menos que se haga de forma artesanal, requiere de inocuidad.[14] Con respecto al área cosmética; el aprovechamiento de micro gránulos sintéticos en formulaciones de cremas o jabones exfoliantes ya sea corporal o facial puede evitar en gran medida la contaminación ambiental y química.

La industria cafetera está vinculada con la salud del medio ambiente.[21] Se estima que aproximadamente el 30% de la población mundial consume café por lo menos una vez en el día. Este puede ser preparado por ebullición y decantación, por filtración del extracto de ebullición o utilizando presión.

El consumo de café es responsable de la generación de la masa residual, dado que solo el 5% del peso del fruto total se usa para la preparación de la infusión (Serna-Jiménez et al., 2018). Este

desecho con tamaño de una partícula muy pequeña y de alta humedad se genera en grandes proporciones (Palomino García y Del Bianchi, 2015). Asociando la problemática a la que nos enfrentamos por dicha contaminación residual de las cafeterías que, generalmente sucumben a la eliminación de estos desechos, que hasta ahora incluyen la descarga en aguas residuales o vertederos (Ballesteros et al., 2014), incineración, alimentación del ganado y uso como relleno y adsorbente en material termo endurecible (Palomino García y Del Bianchi, 2015), por lo cual los microorganismos presentes realizan una demanda mayor de oxígeno para su descomposición, y generan de esta manera asfixia de la biota acuática (Serna-Jiménez et al., 2018).

El café tiene grandes aportes nutricionales de minerales, vitaminas, fibra, antioxidantes y, por supuesto cafeína (Garrido, 2015). Independientemente de la cafeína, tiene sustancias como: "el cafestol, el kahweol, el ácido clorogénico a los cuales se les atribuye propiedades antioxidantes"[30] También tiene macronutrientes como magnesio, potasio, niacina y tocoferoles, entre los principales que tienen efectos benéficos para la salud.[7]

Los jabones ecológicos exfoliantes a base de residuos de café contienen antioxidantes esenciales que protegen nuestro cuerpo del daño de los radicales libres que aceleran el envejecimiento de la piel (Urquieta, 2020). Además, la cafeína, como componente principal del café activa la circulación sanguínea, ayudando a reducir la visibilidad de celulitis, estrías y resequedad, dando a la piel una apariencia más firme y revitalizada.

En México existe una amplia variedad de artículos de belleza; sin embargo, los consumidores cada vez más buscan aquellos que sean naturales u orgánicos. La producción de jabón ecológico por pequeñas empresas locales se ha convertido en una artesanía cada vez más popular y valorada. Datos de la Cámara Nacional de la Industria de Productos Cosméticos (Canipec), revelan que el consumo de este tipo de productos también ha permitido que México sea el segundo mercado más importante en Latinoamérica, con una industria de 10,000 millones de dólares cuyo crecimiento es de 4% anualmente.[1]

METODOLOGÍA

La investigación es de tipo descriptiva y aplicada, integra técnicas cualitativas y cuantitativas. La finalidad es dar solución a un problema relacionado con el manejo inadecuado de residuos de aceite de cocina usado y de café.

La metodología se desarrolló bajo un enfoque mixto, integra una fase experimental y una descriptiva.

Fase experimental.

Hay 2 pasos importantes antes de llevar a cabo la preparación del jabón. El primero es la de recolección de materia prima y su sedimentación. El aceite reciclado y recolectado atravesó por el proceso de sedimentación por 24 horas.

El segundo es el agostamiento/secado del bagazo de café al aire libre, con presencia de luz solar y con la finalidad de reducir un porcentaje de humedad bajo para evitar la presencia de mesófilos aerobios y total ausencia de hongos, levaduras, Staphylococcus aureus, Escherichia coli y Pseudomona aeruginosa.[7]

La metodología se estructura en tres fases: Preparación del jabón, Elaboración, maduración y modelado. Preparación: 1. Preparación del aceite reciclado. 2. Secar el café usado.
Elaboración: 1.Preparación de la lejía. 2. preparar los aceites 3. Saponificación. 4. Incorporar aditivos naturales (Café seco). Maduración y moldeado.

Se elaboró un jabón sólido biodegradable a partir de aceites de cocina recolectados y filtrados para eliminar las impurezas. Luego con un proceso de saponificación en frío con materias primas

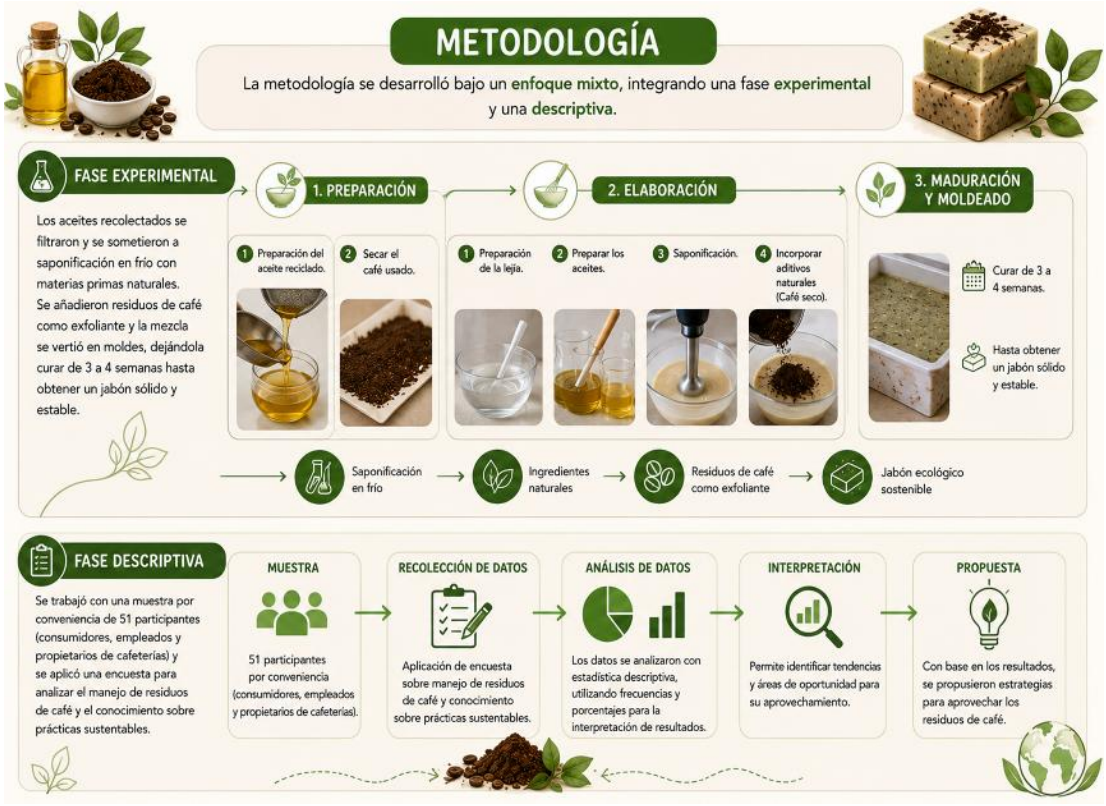
naturales, para evitar el uso de químicos sintéticos, se añadieron los residuos de café previamente secados se incorporaron a la mezcla como agente exfoliante mediante un proceso artesanal.

Se añadieron residuos de café como exfoliante y la mezcla se vertió en moldes, dejándola en reposo durante un periodo de curado aproximado de 3 a 4 semanas, hasta obtener un producto sólido, estable y apto para su uso.

Fase descriptiva.
Se diseñó y aplicó una encuesta estructurada a una muestra de participantes relacionados con cafeterías (consumidores, empleados y propietarios), con el objetivo de conocer el aprovechamiento y la disposición final de los residuos de café.

El instrumento incluyó preguntas cerradas y de opción múltiple enfocadas en hábitos de manejo de residuos, conocimiento sobre reciclaje y disposición a adoptar prácticas sustentables.
Se trabajó con una muestra por conveniencia de 51 participantes y se aplicó una encuesta para analizar el manejo de residuos de café y el conocimiento sobre prácticas sustentables. Se recolectaron los residuos de café de 3 cafeterías que son las más frecuentadas además su cercanía con la Universidad. Los datos se analizaron con estadística descriptiva, utilizando frecuencias y porcentajes para la interpretación de resultados, permitiendo identificar tendencias y áreas de oportunidad para el aprovechamiento de residuos. Con base en los resultados, se propusieron estrategias para aprovechar los residuos de café.

Análisis de datos
Los datos obtenidos se organizaron y analizaron mediante estadística descriptiva, utilizando frecuencias y porcentajes para interpretar los resultados. Esto permitió identificar patrones de manejo de residuos y áreas de oportunidad para su valorización.



Elaboración propia con ayuda de ChatGTP

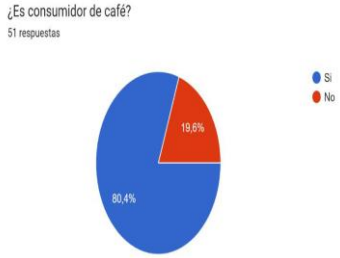
RESULTADOS

En los resultados se observa que el desarrollo de un modelo de negocio sostenible para la elaboración de un jabón ecológico artesanal a partir de residuos de café constituye una propuesta viable y estratégica frente a los retos ambientales y sociales actuales.

Esta investigación no solo ofrece una solución al problema de la disposición inadecuada de residuos de café, que generan contaminación promoviendo una alternativa productiva. Se identifican los procesos que integran la cadena de suministro, lo que permitió establecer una base operativa sólida desde la recolección del residuo del café hasta la elaboración de los jabones.

La investigación muestra que la producción de jabones biodegradables es factible ya que generan utilidades al productor además no solo cumplen su función de limpieza corporal siendo efectivos y naturales para cuidar la piel con funciones de limpieza, hidratación, exfoliante, reafirmante como alternativas saludables. Con la cantidad de ingredientes utilizados se obtuvieron 4 jabones con un tamaño promedio de 70 gramos.
Los nutrientes y antioxidantes del café que permanecen en los residuos ayudan a combatir la grasa que se acumula debajo de la piel.

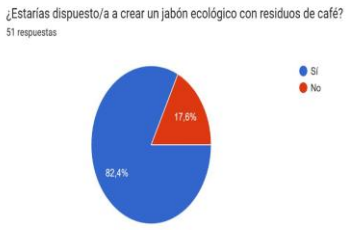
La encuesta aplicada muestra los resultados siguientes.



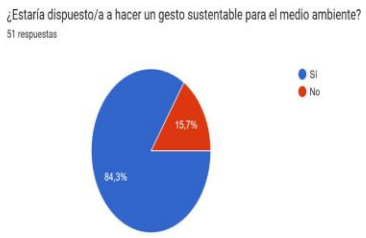
Se observa que el 80.4% de los encuestados es consumidor de café.



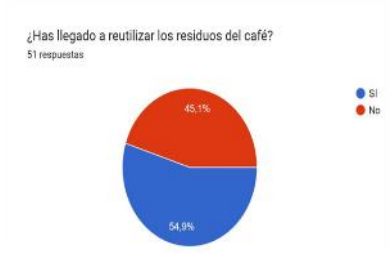
Se observa un empate del 43.1% en ambos apartados (tirarlo en la basura y separarlo para usarlo en compost).



Se observa que el 84.3% de los encuestados está dispuesto a realizar un gesto sustentable para el medio ambiente, optando por prácticas sostenibles.



Se observa que el 84.3% de los encuestados está dispuesto a realizar un gesto sustentable para el medio ambiente, optando por prácticas sostenibles.



Se observa que el 54.9% de los encuestados si reutiliza el residuo del café.

Obtención del Jabón ecológico.



Figura 1: Resultado final de las piezas de jabón ecológico con bagazo de café. Nota: Se sometió a corte las piezas finales, obtenido tres réplicas del mismo.



Figura 2. Barra de jabón con residuos de café. Nota: Se realizó la prueba del mínimo efecto de espuma dado por el aceite de oliva.

CONCLUSIÓN

Los resultados confirman la viabilidad técnica de producir un jabón sólido biodegradable mediante un proceso artesanal a partir de residuos orgánicos; sin embargo, el estudio presenta limitaciones relacionadas con el tamaño de la muestra y el tipo de muestreo por conveniencia, lo que restringe la generalización de los hallazgos. A pesar de ello, la alta disposición de los participantes hacia alternativas sostenibles sugiere un contexto favorable para la implementación de estrategias de valorización.

En el presente estudio se observa que el jabón elaborado presenta buena consistencia, aroma natural agradable y buena capacidad de limpieza. En la encuesta, se identificó que el 80% de los participantes consume café de manera habitual, el 43% indicó que desecha los residuos de café en la basura, lo que refleja un área de oportunidad en su aprovechamiento. El 84% manifestó disposición para adoptar alternativas sostenibles.

La reutilización de los residuos del café y el aceite usado es fundamental para una vida sustentable. Es imprescindible concientizar a la sociedad en general de la importancia de hacer gestos ecológicos utilizando residuos.

Los beneficios ambientales en la producción de jabón son una alternativa sostenible para dar un segundo uso a materiales que de otro modo terminarían en la basura, contribuyendo a la reducción de la huella ecológica. Además es un producto natural, siendo ideal para personas con sensibilidades cutáneas, libre de químicos sintéticos, parabenos y sulfatos, que respeta el pH natural de la piel y es más suave, por lo que es similar a los jabones de pasta comerciales, ya que los jabones líquidos convencionales comerciales tienen pH neutros como también ácidos porque son detergentes (surfactantes), sin embargo, no hay que perder de vista que la finalidad es reducir la contaminación de agua y suelo así como dar un uso a los residuos de aceite vegetal que se generan diariamente a nivel mundial.

La producción de un jabón biodegradable con aceites de cocina reciclados tratados y residuos de café es una alternativa viable, funcional y sustentable, con generación de utilidades para el productor. El jabón obtenido requiere que sus características organolépticas de color y olor sean mejoradas no obstante tiene propiedades humectantes ya que durante el proceso de saponificación se produce glicerina como subproducto, a diferencia de la mayoría de los jabones comerciales a los que se les quita la glicerina durante el proceso de producción para ser comercializada por separado.

La prueba de aceptación del producto se llevó a cabo en la comunidad estudiantil del Centro Universitario de la Ciénega.

Se recomienda, para futuras investigaciones, ampliar la muestra, incorporar análisis fisicoquímicos, microbiológicos y los que indique en cuanto a calidad del producto las reglamentaciones oficiales y evaluar su aceptación en el mercado para fortalecer su potencial como alternativa sustentable y de emprendimiento.

BIBLIOGRAFÍA

1. Argueta, E. L. (2017, 11 octubre). Cosmética natural, medio para cuidar la salud y emprender. El Economista. https://www.eleconomista.com.mx/el-empresario/Cosmetica natural-medio-para-cuidar-la-salud-y-emprender-20171010-0188.html

2. Algumedo Romaña C.A. (2020). Elaboración de jabones artesanales con aceite usado como estrategia para la enseñanza de las ciencias naturales a través de aprendizaje basados en proyectos. [Tesis de maestría]. Universidad Pontificia Bolivariana escuela de ingeniería, maestría en ciencias naturales y matemática, Medellín. Recuperado de https://repository.upb.edu.co/bitstream/handle/20.500.11912/6059/Elaboraci%c3%b3n%20de%20jabones%20artesanales%20con%20aceite%20usado.pdf?sequence=1&isAllowed=y

3. Arias Rodríguez M. Y y D. M. Ibarra-Mojica, (2018) Saponificación artesanal de aceites de cocina usados provenientes del municipio de Charalá, Working Paper, no 1. [En linea]. Disponible en https://doi.org/10.22490/ECAPMA.2778

4. Bombón N. y M. Albuja., (2014). Diseño de una Planta de Saponificación para el aprovechamiento del aceite vegetal de desecho", Revista Politécnica, volumen 34, número 1, p. 22. https://revistapolitecnica.epn.edu.ec/ojs2/index.php/revista_politecnica2/article/view/304/pdf

5. Buiza Bautista, J. N., Luna Marin, M. A., Ramos Vega, K. Y., Ruiz Campos, F. D., & Cotrina Villanueva, J. E. (2019). Elaboración de jabones a base de café 100% premium "Coffee Shower".

6. Castillo Vergara, M. (2021a). ¿Cómo podemos avanzar en el desarrollo de modelos de negocios sostenibles? *Gestión y Tendencias*, *5*(4), 9-12. https://doi.org/10.11565/gesten.v5i4.133

7. Coello Fernández, E. F. (2022). Evaluación de la capacidad exfoliante de un jabón cosmético corporal a base de borra de café (Bachelor's thesis).

8. Davis Fernández, A, W. A. Bayona Lozada, J. C. Campos Espinoza, A. L. Cruz Criollo, J. C. Pérez Valdiviezo., (2020) Diseño de proceso para la elaboración de jabón a base de aceite de cocina usado en la Urb. Santa María del Pinar, distrito Piura, Universidad de Piura. https://pirhua.udep.edu.pe/backend/api/core/bitstreams/417d991f-f9de-454e-b0bd-6f938c055847/content

9. Durán, S., Torres, J., & Sanhueza, J. (2015). Aceites vegetales de uso frecuente en Sudamérica: características y propiedades. Nutrición Hospitalaria, 32(1), 11-19. http://www.aulamedica.es/nh/pdf/8874.pdf

10. Domínguez, K. V. (2018, 23 abril). Elaborando jabones artesanales - Karla Victoria Domínguez. Medium. Recuperado noviembre de 2021, de https://medium.com/@karlavictoriadominguez/elaborando-jabones-artesanales-ba18594dcaf1

11. *Echavarría Restrepo, J. (2012). El desarrollo sostenible y el reciclaje del aceite usado de cocina a la luz de la jurisprudencia y el ordenamiento jurídico colombiano. Producción + Limpia, 7(1), 109-122.*

12. Galeano, S. G. L. (2020, 31 julio). Fabricación y comercialización de jabón artesanal contra la celulitis a base de café orgánico. Universitaria Agustiniana -Repositorio Institucional. Recuperado noviembre de 2021, de https://repositorio.uniagustiniana.edu.co/handle/123456789/1291

13. González Canal, I., & González Ubierna, J. A. (2015). Aceites usados de cocina. Problemática ambiental, incidencias en redes de saneamiento y coste del tratamiento en depuradoras. http://residusmunicipals.cat/uploads/activitats/docs/20170427092548.pdf

14. Guerrero, T. (2022, 10 marzo). Residuos de la producción de café: una alternativa sostenible. Perfect Daily Grind EspaÃ±ol. https://perfectdailygrind.com/es/2021/06/24/residuos-de-la produccion-de-cafe-una-alternativa-sostenible

15. INEGI. (2014). Directorio Nacional de Unidades Económicas. DENUE. Censos Económicos 2014. Recuperado de http://www.beta.inegi.org.mx/app/mapa/denue/default.aspx.

16. Larrota Cruz, E. Efectos ambientales por la disposición de aceites vegetales usadosrestaurante chispas y brasas Samacá. https://repository.usta.edu.co/bitstream/handle/11634/33431/2021elverlarrota.pd f?sequence

17. Mosquera, R., & Liloys, A. (2019). Manejo y disposición adecuada de los residuos orgánicos producidos en las cafeterías en la Universidad de San Buenaventura (San Benito) Medellín.

18. Mundo Eco Soluciones. (2018). Aceite de cocina usado ¿qué hacer con este residuo?

19. Oxfam, E. (2017, 26 julio). Conoce los beneficios de utilizar jabón natural para tu hogar. Ingredientes que Suman. Recuperado noviembre de 2021, de https://blog.oxfamintermon.org/conoce-los-beneficios-de-utilizar-jabon-natural-para-tu-hogar/#Que_caracteriza_a_estos_productos_naturales_de_Comercio_Justo

20. PCC Group. (2021, 18 enero). Producción de jabón: materias primas naturales y sintéticas. Portal de productos del grupo PCC. https://www.products.pcc.eu/es/blog/produccion-de-jabonmaterias-primas-naturales-y-sinteticas/

21. Petrich, I. L. (2020, 12 febrero). Café de Calidad y Sostenibilidad Ambiental: ¿Cómo Lograrlos? Perfect Daily Grind EspaÃ±ol. https://perfectdailygrind.com/es/2019/09/12/caf

22. Pintor, Y. P. (2020, 24 julio). Usos del café como tratamiento de belleza. Mejor con Salud. https://mejorconsalud.as.com/usos-del-cafe-como tratamiento-de-belleza/

23. Ramón A. Feenstra (2021). Historia del jabón. 100 años de Jabones Beltrán. Ed. Dykinson, Madrid, 2021.

24. Restrepo, J., (2012). El desarrollo sostenible y el reciclaje del aceite usado de cocina a la luz de la jurisprudencia y el ordenamiento jurídico colombiano. Producción más limpia, volúmen 7, número 1, p. 109-122.file:///C:/Users/llare/Downloads/Dialnet-ElDesarrolloSostenibleYElReciclajeDelAceiteUsadoDe-4333909.pdf

25. Rivas, A. (2016). Utilización de desechos de café en dos formulaciones (crema y jabón en barra) de tipo exfoliante para uso cosmético (Doctoral dissertation, Tesis de pregrado), Universidad de San Carlos de Guatemala, Ciudad de Guatemala, Guatemala https://bibliotecafarmacia. usac. edu. gt/Tesis/QF1409. pdf).

26. Rosas Barajas A, Aguilar Ortega A, Cornejo Corona I, Rizo Fernández Z, Córdova de la Cruz S.E, Ramos Frausto L.G., y Esparza Claudio J.J., (2018). Análisis de las cadenas de suministro de bioetanol y biodiésel en México: Estudios de caso. Nova scientia, volumen 10, número 1, p. 13-29. https://www.revista.unam.mx/vol.15/num5/art38/art38.pdf

27. Salamanca, L. (2022). Así se puede reciclar y reutilizar el aceite usado de cocina. Consejo Colombiano de Seguridad. https://ccs.org.co/proteccion-seguridadcomunidad/proteccion-seguridad-en-la-comunidad-edicion-no-44-segundotrimestre-2022/

28. Secretaría del Medio Ambiente de la Ciudad de México (SEDEMA). (2020). Promueve Sedema separación y reciclaje de aceite usado con "Mi cocina no contamina". https://sedema.cdmx.gob.mx

29. Thushari, I., & Babel, S. (2022). Comparative study of the environmental impacts of used cooking oil valorization options in Thailand. Journal of Environmental Management, 310, 114810. https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2022.114810

30. Valenzuela BA. El consumo té y la salud: Características y propiedades benéficas de esta bebida milenaria. Revista chilena de nutrición. 2004; 31:72-82. [Links]

DISTRIBUCIÓN ALÉLICA Y GENOTÍPICA DE LA VARIANTE -24 C>T DEL GEN ABCC2 (rs717620) EN POBLACIÓN MESTIZA MEXICANA

Diana Judith Vega Gómez[1], Gabriela Martínez Cortés[1], Joel Salazar Flores[1], Héctor Rangel Villalobos[1], Yvain Salinas Delgado[2] y Mariana Chávez Arreguin[1].

[1]Centro Universitario de la Ciénega, Universidad de Guadalajara, [2]Universidad de la Ciénega del Estado de Michoacán de Ocampo UCEMICH.

Diana.vega9160@alumnos.udg.mx

RESUMEN

La SNV (*single nucleotide variant*) -24 C>T (rs717620) está localizada en el cromosoma 10q24.2 específicamente en la región 5' no traducida (5′-UTR) del gen ABCC2. Aunque esta secuencia no traduce a la proteína, se ha descrito que estas regiones desempeñan un papel determinante en la eficiencia de la traducción. En esta secuencia se inicia la traducción de la proteína 2 asociada a la resistencia a múltiples fármacos (MRP2, del inglés *Multidrug Resistance-associated Protein 2*), la cual se ha asociado con la aparición de neuropatía periférica inducida por nab-paclitaxel en pacientes con cáncer de páncreas[1], así como también se ha visto implicado en la resistencia a fármacos antiepilépticos como la lacosamida[2]. La MRP2 es un transportador ABC que participa en procesos celulares que implican el transporte de fármacos cuyo efecto terapéutico es muy variable entre pacientes[3]. Debido a que la distribución alélica varía según el origen biogeográfico y considerando la alta heterogeneidad genética que caracteriza a la población mexicana, el análisis de las frecuencias alélicas previsiblemente permitiría conocer el posible impacto de esta variante genética sobre la variabilidad en la respuesta farmacológica en población mexicana. Por tal motivo, el objetivo del trabajo fue determinar la distribución alélica y genotípica de la variante -24 C>T del gen ABCC2 (rs717620) en población mestiza de diferentes regiones de México. El estudio incluyó 193 individuos pertenecientes a siete poblaciones mestizas que representan a cuatro regiones geográficas: Norte (Monterrey y Chihuahua), Occidente (Jalisco), Centro (Ciudad de México y Puebla) y Sur (Yucatán y Chiapas) de México. El genotipado se realizó mediante discriminación alélica por q-PCR con sondas TaqMan, empleando un analizador QS5 y el software QuantStudio™ Design & Analysis v1.4.3. Se obtuvieron las frecuencias alélicas y genotípicas, el equilibrio de Hardy-Weinberg (EHW), un análisis molecular de varianza (AMOVA) y las distancias genéticas entre poblaciones. Para dichos análisis se emplearon los programas Arlequin v.3.11, GDA v.1.0 y SPSS Statistics v.20. En los resultados, el alelo C fue más frecuente en todas las poblaciones analizadas (76–90%), mientras que el alelo T se observó en menor proporción (10–24%). Además, el genotipo CC fue el más común (62–81%), seguido por el heterocigoto CT (19–33 %), mientras que el genotipo homocigoto TT presentó una menor frecuencia (2–12%). Las pruebas exactas confirmaron que la distribución de los genotipos para el SNV -24 C>T (rs717620) se encuentra en EHW en todas las poblaciones (p>0.05). El AMOVA reveló que solo el 0.8% de la variabilidad total es atribuible a diferencias entre poblaciones sin mostrar diferencias estadísticamente significativas (p= 0.35802). Finalmente, las comparaciones pareadas y las distancias genéticas de Nei son consistentes con el AMOVA, ya que no se observaron diferencias entre pares de poblaciones. Estos resultados en conjunto, confirman la ausencia de una estructura genética, lo que sugiere homogeneidad entre las poblaciones analizadas.

INTRODUCCIÓN

La SNV -24 C>T (rs717620) se encuentra en la región 5' no traducida (5'-UTR) del gen ABCC2, corriente arriba del sitio de inicio de la transcripción, por lo que no altera directamente la secuencia de aminoácidos de la proteína, sin embargo, se ha descrito que estas regiones desempeñan un papel determinante en la eficiencia de la traducción. Los genes ABC son esenciales para procesos celulares como la absorción, distribución y excreción de fármacos, se encuentran presentes de manera regular en células de diferentes órganos y tejidos del cuerpo humano donde median el transporte de varios tipos de compuestos endógenos como hormonas, vitaminas, lípidos, ácidos

grasos, péptidos y otros xenobióticos, participando en el mantenimiento de la homeostasis celular (Alam & Locher, 2023).

Los transportadores ABC son importantes en la resistencia al metrotexato, citarabina, vincristina, antraciclinas y dexametasona, también influyen en la respuesta al tratamiento y la supervivencia de los pacientes. La sobreexpresión de transportadores ABC es un biomarcador clave para la MDR (*Multidrug Resistance*). Transportadores como P-gp, MRP1, MRP2 y BCRP se han vinculado a la resistencia al tratamiento en diversas neoplasias malignas, también se ha observado que el tratamiento continuo con agentes quimioterapéuticos aumenta la expresión de transportadores ABC, y por lo tanto, el riesgo de MDR (Pote & Gacche, 2023). El gen ABCC2 está constituido por 34 exones y presenta una longitud total de 4.87 kb y codifica a la proteína asociada a la resistencia a múltiples fármacos 2 (MRP2), la cual participa en el transporte transmembranal de diversos compuestos endógenos y exógenos. Se expresa en el hígado, los intestinos, los riñones, la BHE, los capilares del sistema nervioso central y la placenta. Media la excreción hepatobiliar de moléculas de bilirrubina monoglucuronidadas y bisglucuronidadas, por lo que desempeña un papel importante en la desintoxicación de la bilirrubina. La deficiencia en la función de la proteína provoca el síndrome de Dubin-Johnson que es causado por un exceso del pigmento biliar en las células del hígado. Las mutaciones que provocan una disminución de la cantidad de MRP2 funcional se han asociado con una mayor incidencia de lesión hepática tóxica durante la administración de fármacos citotóxicos. Además de los sustratos endógenos como componentes biliares y metabolitos, también transporta algunos xenobióticos como lo son los fármacos. La regulación positiva de MRP2 se asocia con un mal pronóstico en algunos tipos de cáncer (Kamisako et al., 1999; Koide et al., 2025).

La sobreexpresión de ABCC2 hace que la célula tumoral adquiera resistencia a múltiples fármacos; sin embargo, estudios recientes han revelado que ABCC2 podría estar asociado con una mayor tasa de supervivencia sin enfermedad en pacientes con cáncer de colon tratados con oxaliplatino. Este hallazgo sugiere que ABCC2 puede funcionar como un agente contra el cáncer a través de vías alternativas en la progresión del tumor, más allá de su papel establecido en la resistencia a múltiples fármacos (Wang et al., 2024).

Aunque ya se han reportado frecuencias alélicas de sitios polimórficos en genes de proteínas transportadoras para algunas poblaciones; especialmente en México, poco se conoce sobre la distribución alélica, en un país que se caracteriza por poseer una alta heterogeneidad genética. El análisis de las frecuencias alélicas y genotípicas podría permitirnos conocer el posible impacto de esta variante genética sobre la variabilidad en la respuesta farmacológica en población mexicana. Por tal motivo, el objetivo de este trabajo fue determinar la distribución alélica y genotípica de la variante -24 C>T del gen ABCC2 (rs717620) en población mestiza de diferentes regiones de México.

METODOLOGÍA

Se realizó un estudio transversal y descriptivo donde se incluyeron un total de 193 muestras de mestizos mexicanos pertenecientes al Norte (Monterrey y Chihuahua), Occidente (Jalisco), Centro (DF y Puebla) y Sur (Chiapas y Yucatán) de México. Las muestras de ADN fueron tomadas de la Genoteca del Instituto de Investigación en Genética Molecular del Centro Universitario de la Ciénega, Universidad de Guadalajara (Ocotlán, Jalisco). El estudio cumple con los lineamientos de la Declaración de Helsinki, y la NOM-012-SSA3-2012 que establece los criterios para la ejecución de proyectos de investigación para la salud en seres humanos.

El DNA fue cuantificado en el equipo NanoDrop 2000 (*Thermo scientific*). La SNV -24 C>T (rs717620) se genotipificó mediante la tecnología de TaqMan SNP Genotyping Assay en un equipo de Real-Time PCR, QuantStudio (QS5) (*ThermoFisher-Scientific*) de acuerdo con las instrucciones del fabricante. Para el análisis de la SNV se utilizó la sonda TaqMan Assay ID: C__2814642_10 (rs717620, ABCC2). En el análisis de los datos, se obtuvieron las frecuencias alélicas y genotípicas, el equilibrio de Hardy-Weinberg (EHW), un análisis molecular de varianza (AMOVA) y las distancias genéticas entre poblaciones. Para dichos análisis se emplearon los programas Arlequin v.3.11, GDA v.1.0 y SPSS Statistics v.20.

RESULTADOS

De las 193 muestras genotipadas pertenecientes a las 7 poblaciones seleccionadas se obtuvieron las frecuencias alélicas y genotípicas (Tabla 1), así como un análisis a nivel interpoblacional. En cuanto a las frecuencias alélicas encontramos, que las frecuencias del alelo C (0.90-0.76) son muy altas comparadas con las frecuencias del alelo T (0.24-0.10). A nivel poblacional, la mayor frecuencia del alelo mutado se encontró en la población de CDMX (0.24) y también el mayor número de individuos homocigotos para dicho alelo (0.12). Se observo una tendencia de homocigotos para el alelo silvestre C (0.81-0.62), una menor frecuencia de heterocigotos (0.33-0.19) y una escasa presencia de homocigotos para el alelo mutado T (0.12-0.02) (Figura 1).

Tabla 1. Frecuencias alélicas y genotípicas para la variante rs717620 del gen ABCC2 en siete poblaciones mestizas mexicanas.

Población	n	C	T	C/C	C/T	T/T
Monterrey	12	0.87 (21)	0.13 (3)	0.75 (9)	0.25 (3)	0
Chihuahua	21	0.90 (38)	0.10 (4)	0.81 (17)	0.19 (4)	0
Jalisco	50	0.83 (83)	0.17 (17)	0.68 (34)	0.3 (15)	0.02 (1)
CDMX	26	0.76 (40)	0.24 (12)	0.65 (17)	0.23 (6)	0.12 (3)
Puebla	20	0.87 (35)	0.13 (5)	0.75 (15)	0.25 (5)	0
Chiapas	39	0.78 (61)	0.22 (17)	0.62 (24)	0.33 (13)	0.05 (2)
Yucatán	24	0.87 (42)	0.13 (6)	0.75 (18)	0.25 (6)	0

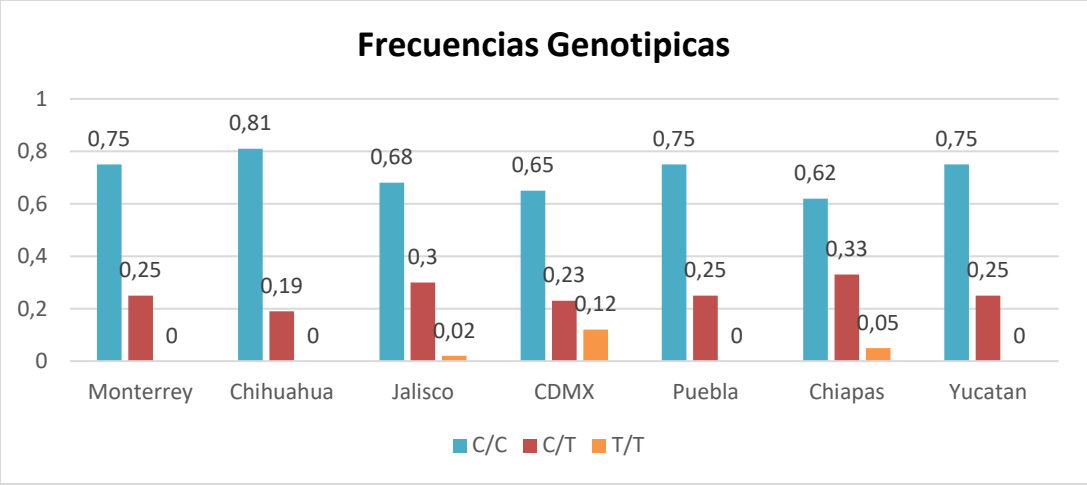


Figura 1. Frecuencias genotípicas para la variante rs717620 del gen ABCC2 en siete poblaciones mestizas de México.

La distribución de los genotipos observados para la variante -24 C>T (rs717620) se encontró en EHW en todas las poblaciones analizadas. La heterocigosidad observada mostró valores similares a la heterocigosidad esperada, lo que sustenta la ausencia de desviaciones significativas respecto al EHW como se confirma con las pruebas exactas (p> 0.05) (Tabla 2).

Tabla 2. Heterocigosidad observada, heterocigosidad esperrada y *p-value* de la prueba de EHW.

Población	Het. Obs.	Het. Esp.	P-value
Monterrey	0.25000	0.22826	1.00000
Chihuahua	0.19048	0.17654	1.00000
Jalisco	0.30000	0.28505	1.00000
CDMX	0.23077	0.36199	0.09059
Puebla	0.25000	0.22436	1.00000
Chiapas	0.35897	0.35964	1.00000

Yucatán	0.25000	0.22340	1.00000

El análisis de varianza molecular (AMOVA) reveló que la variabilidad genética entre las poblaciones mestizas estudiadas es del 0.8%, sin diferencias estadísticamente significativas (p= 0.35802). Por otra parte, las comparaciones pareadas y distancias genéticas entre las siete poblaciones mestizas mostraron bajos valores, lo que indica similitud genética entre las poblaciones analizadas. Los mayores valores de distancia se observaron entre Chihuahua y CDMX (0.04236), así como entre Chihuahua y Chiapas (0.04190) (Tabla 3), mientras que la CDMX y Chiapas mostraron una menor distancia genética como se observa en el árbol NJ (Figura 2). En adición, los *p-values* demuestran la similitud genética entre las poblaciones analizadas al no mostrar diferencias estadísticamente significativas (p> 0.05) (Tabla 3). En conjunto, estos resultados indican una baja estructura genética y una estrecha relación genética entre las poblaciones mestizas analizadas.

Tabla 3. Distancias genéticas de Nei (diagonal inferior) y *p-values* de F_{ST} (diagonal superior) entre las siete poblaciones mestizas de México.

	Monterrey	**Chihuahua**	**Jalisco**	**CDMX**	**Puebla**	**Chiapas**	**Yucatán**
Monterrey	**0.00000**	0.99902	0.74121	0.42676	0.99902	0.40332	0.99902
Chihuahua	-0.02902	**0.00000**	0.27930	0.13086	0.72949	0.09180	0.74805
Jalisco	-0.01880	0.00514	**0.00000**	0.42871	0.61035	0.35059	0.62109
CDMX	0.00444	0.04236	-0.00276	**0.00000**	0.32812	0.99902	0.24609
Puebla	-0.03448	-0.02038	-0.01004	0.01467	**0.00000**	0.19434	0.99902
Chiapas	0.00667	0.04190	0.00021	-0.01629	0.01623	**0.00000**	0.17480
Yucatán	-0.03226	-0.01825	-0.00784	0.01751	-0.02345	0.01912	**0.00000**

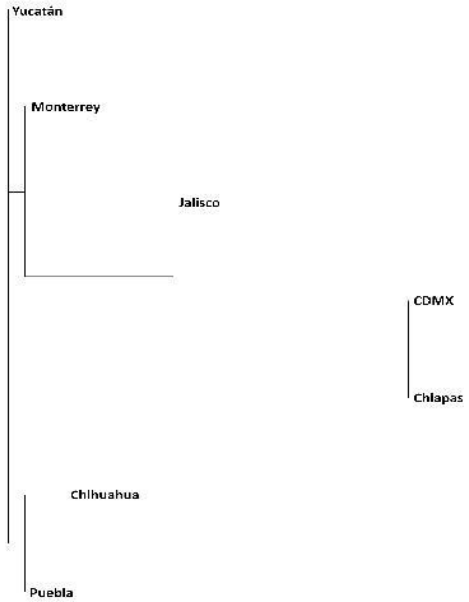


Figura 2. Distancias genéticas de Nei representadas en un árbol NJ, obtenidas a partir de la variación de la SNV -24 C>T (rs717620) del gen ABCC2 en población mestiza mexicana.

CONCLUSIONES

Nuestros resultados mostraron que el alelo C y el genotipo CC de la variante -24 C>T (rs717620) del gen ABCC2 son los más frecuentes en la población mestiza de México. Asimismo, la distribución genotípica de la SNV rs717620 se encuentra en equilibrio de Hardy-Weinberg en todas las poblaciones analizadas (p>0.05). Los análisis de AMOVA, las comparaciones pareadas y las distancias genéticas de Nei mostraron una baja variabilidad entre las siete poblaciones (Monterrey, Chihuahua, Jalisco, Ciudad de México, Puebla, Chiapas y Yucatán), sin diferencias estadísticamente

significativas (F_{ST}= 0.08%; *p*= 0.35802). En conjunto, estos hallazgos indican ausencia de estructura genética, lo que sugiere homogeneidad genética basada en la variabilidad de la SNV rs717620, entre las siete poblaciones mestizas de México.

BIBLIOGRAFÍA

1. Alam, A., & Locher, K. P. (2023). Structure and Mechanism of Human ABC Transporters. *Annual Review of Biophysics*, *52*(1), 275–300. https://doi.org/10.1146/annurev-biophys-111622-091232
2. Kamisako, T., Leier, I., Cui, Y., König, J., Buchholz, U., Hummel-Eisenbeiss, J., & Keppler, D. (1999). Transport of monoglucuronosyl and bisglucuronosyl bilirubin by recombinant human and rat multidrug resistance protein 2. *Hepatology (Baltimore, Md.)*, *30*(2), 485–490. https://doi.org/10.1002/hep.510300220
3. Koide, E., Pietz, H. L., Beltran, J., & Chen, J. (2025). Structural basis for the transport and regulation mechanism of the multidrug resistance-associated protein 2. Nature Communications, 16(1), 484. https://doi.org/10.1038/s41467-024-55810-w
4. Pote, M. S., & Gacche, R. N. (2023). ATP-binding cassette efflux transporters and MDR in cancer. *Drug Discovery Today*, *28*(5), 103537. https://doi.org/10.1016/j.drudis.2023.103537
5. Wang, Y., Gan, X., Cheng, X., Jia, Y., Wang, G., Tang, X., Du, H., Li, X., Liu, X., Xing, X., Ji, J., & Li, Z. (2024). ABCC2 induces metabolic vulnerability and cellular ferroptosis via enhanced glutathione efflux in gastric cancer. Clinical and Translational Medicine, 14(8), e1754. https://doi.org/10.1002/ctm2.1754
6. Xue, T., & Lu, Z. N. (2016). Association between the polymorphisms in the ATP-binding cassette genes ABCB1 and ABCC2 and the risk of drug-resistant epilepsy in a Chinese Han population. *Genetics and Molecular Research: GMR*, *15*(4). https://doi.org/10.4238/gmr15048752
7. Zhao, T., Li, H., Zhang, H., Feng, J., Yu, J., Wang, T., Sun, Y., & Yu, L. (2023). Impact of ABCC2 1249G>A and −24C>T Polymorphisms on Lacosamide Efficacy and Plasma Concentrations in Uygur Pediatric Patients With Epilepsy in China. *Therapeutic Drug Monitoring*, *45*(1), 117–125. https://doi.org/10.1097/FTD.0000000000001003

EDITORAS

Gloria Verónica Vázquez García
Amalia Martínez García
Cristina E. Solano Sosa
María del Socorro Hernández Montes
Laura Elena Rosales Zárate
María Eugenia Sánchez Morales
Alexandra Monsetrrat García

9 786078 821662

ISBN TOMO I
BIOLOGÍA Y QUÍMICA

9 786078 821655

ISBN OBRA COMPLETA
AVANCES CIENTÍFICOS Y TECNOLÓGICOS EN MÉXICO III

Ciencia y Tecnología
Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación

CENTRO DE INVESTIGACIONES EN ÓPTICA, A.C.