



VII CONGRESO NACIONAL DE
NANOTECNOLOGÍA

12 AL 15 DE NOVIEMBRE 2023
PUCÓN, CHILE

LIBRO DE RESÚMENES

Prólogo

En el rol de presidente el comité organizador, he tenido el honor y privilegio de escribir estas líneas. Quiero comenzar agradeciendo a todas las personas que hicieron posible la realización de este VII Congreso Nacional de Nanotecnología – CNN7, llevado a cabo en la ciudad de Pucón, entre el 12 y el 15 de noviembre del 2023. Este evento bienal, que representa un espacio invaluable para intercambiar ideas, crear y estrechar lazos entre los diversos actores que desarrollan la nanotecnología en Chile, no podría ocurrir sin el compromiso y esmero de muchas personas trabajando por este propósito común.

Este libro contiene los resúmenes de los trabajos presentados en la VII versión de esta conferencia, la cual contó con la participación de 320 asistentes, de los cuales 182 fueron estudiantes, tanto de pre como de postgrado. Se seleccionaron 66 trabajos para ser presentados de forma oral y 189 se presentaron en formato póster. De estos últimos, el comité científico reconoció a 5 de ellos, destacándolos por su grado de innovación, aplicabilidad, impacto social y por su avance en conocimiento en ciencia básica. En este compendio, se aprecia como las distintas contribuciones reflejan la diversidad y profundidad de la investigación que se lleva a cabo en el país en el área de la nanotecnología.

Se incluyen además los resúmenes de las presentaciones realizadas por los destacados charlistas invitados, iniciando por los internacionales, para luego proseguir con los resúmenes de los invitados nacionales. Entre estos últimos, quisimos destacar de forma especial al Dr. Marcelo Kogan, que ha sido uno de los impulsores de la nanotecnología en Chile, desarrollando estrategias para la terapia y el diagnóstico de enfermedades crónicas en base a la utilización de nanomateriales.

En esta VII versión se otorgó un especial reconocimiento a los académicos Dr. Guillermo González y al Dr. Patricio Häberle, como también a la académica Dra. Mónica Pacheco, por su invaluable contribución al desarrollo científico de la nanotecnología en Chile. Destacados particularmente por sus investigaciones pioneras en el área, como también por su contribución a la formación de capital humano avanzado.

Con el propósito de consolidar una iniciativa que se ha discutido desde la primera versión de esta conferencia, en esta ocasión hemos dado pasos concretos para crear una sociedad científica. En el marco de un conversatorio se ha formado una comisión que tendrá la tarea constituir legalmente la “**Sociedad Chilena de Nanotecnología**”, buscando la mejor manera de llevar a cabo el proceso, con el espíritu de incluir a todas las personas de la comunidad científica del área interesadas en participar.

Finalmente, agradecemos a todos los autores por compartir sus conocimientos y contribuciones, así como a los revisores y organizadores por su arduo trabajo en la selección y organización de estos resúmenes. Esperamos que este libro sirva como un recurso valioso para la comunidad actual y como fuente de inspiración para las futuras generaciones que desarrollen la nanotecnología en nuestro país.



Samuel A. Hevia Zamora
Presidente del Comité Organizador

Comité Organizador

- **Samuel Hevia**, Presidente (Pontificia Universidad Católica de Chile)
- **Tania Sandoval**, Vice-presidenta (Universidad Técnica Federico Santa María)
- **Marcos Flores**, Secretario (Universidad de Chile)
- **Judit Lisoni**, Presidenta Comité Científico (Universidad Austral de Chile)
- **Eduardo Berríos**, Difusión (Universidad de Valparaíso)

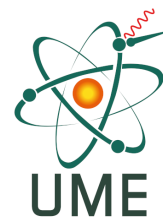
Comité Científico

- **Felipe Aguilar**, Universidad de Aysén
- **Juan Armijo**, Pontificia Universidad Católica de Chile
- **Noelia Benito**, Universidad de Concepción
- **Eduardo Cisternas**, Universidad de la Frontera
- **Mario Flores**, Universidad Austral de Chile
- **Luis Foà**, Universidad de Chile
- **Sandra Fuentes**, Universidad Católica del Norte
- **Victor Fuenzalida**, Universidad de Chile
- **Francisco Gracia**, Universidad de Chile
- **Patricio Häberle**, Universidad Técnica Federico Santa María
- **Natalia Hassan**, Universidad Tecnológica Metropolitana
- **Pedro Orellana**, Universidad Técnica Federico Santa María
- **Felipe Oyarzún**, Universidad de Chile
- **Simón Oyarzún**, Universidad de Santiago de Chile
- **Carolina Parra**, Universidad Técnica Federico Santa María
- **Rodrigo del Río**, Pontificia Universidad Católica de Chile
- **Patricia Rivas**, Universidad Austral de Chile
- **Carlos Rodríguez**, Universidad de La Serena
- **Roberto Rodríguez**, Pontificia Universidad Católica de Chile
- **Luis Rosales**, Universidad Técnica Federico Santa María
- **Dinesh Pratap Singh**, Universidad de Santiago de Chile
- **Ingrid Ponce**, Universidad de Santiago de Chile
- **Eulàlia Sans**, Universidad de la Frontera
- **Rodrigo Segura**, Universidad de Valparaíso

Patrocinadores



Auspiciadores



Invitados

- **Francesca Iacopi**, University of Technology Sydney, Australia
- **Stacey Bent**, Stanford University, Estados Unidos
- **Marta Hatzell**, Georgia Institute of Technology, Estados Unidos
- **Galo Soler Illia**, Universidad Nacional de San Martín, Argentina
- **Guillermo Mínguez**, Universitat de Valencia, España
- **Michael Kappl**, Max Planck Institute for Polymer Research, Alemania
- **Enrique Diez**, Universidad de Salamanca, España
- **Mónica Soler**, Universidad de Chile, Chile
- **José Antonio Gárate**, Universidad San Sebastián, Chile
- **Mauricio Isaacs**, Pontificia Universidad Católica de Chile, Chile
- **Marcelo Kogan**, Universidad de Chile, Chile
- **Fernando Lund**, Universidad de Chile, Chile

Tabla de Contenidos

Charlas Invitadas	18
Francesca Iacopi: More-than-Moore miniaturisation with graphene and cubic silicon carbide	19
Stacey Bent: Nanoscale materials synthesis for sustainable energy applications	20
Marta Hatzell: Electrifying the Synthesis of Nitrogen and Carbon-based Fuels and Fertilizers	21
Galo Soler Illia: Programmable nanosystems: a second generation of nanomaterials	22
Guillermo Mínguez: Solvent-free synthesis of Metal-Organic Frameworks: a route towards elusive materials	23
Michael Kappl: Silicone Nanofilament coatings for Supraparticle Formation and efficient Membrane Distillation	24
Enrique Diez: Broken symmetries in nanostructures based on quantum materials	25
Mónica Soler: Incorporation of curcuminoid ligands into different materials	27
José Antonio Gárate: Nanoconfinement: from nanotubes to biological channel	29
Mauricio Isaacs: Tandem electrocatalysis in electrochemical processes relevant to the environment and energy: Carbon Dioxide and Green Ammonia	30
Marcelo Kogan: From the nanomaterials fabrication to the development of strategies for therapy and diagnosis of chronic diseases	31
Fernando Lund: On the structure of glasses at the nanoscale: implications for mechanical properties and thermal transport	33
Tópico T1: Síntesis y caracterización de materiales nanoestructurados	34
T101: Innovative nanostructure synthesis for antimicrobial applications: Combining electrospinning, electrospraying and atomic layer deposition techniques	35
T104: Evaluación de estabilidad coloidal de nanopartículas de Ferrita de Bismuto recubiertas por polietilenglicol funcionalizado	36
T107: Modificación de los parámetros de juntura de un diodo Schottky de película delgada Ag/CdS mediante dopaje con Al	38
T108: Copper oxide films as resistive gas sensors	40
T109: Diseño de aerogeles de grafeno producidos por síntesis hidrotermal mediante la teoría DLVO	42
T110: Absorption of H ₂ and CO ₂ in graphene oxide-based semiconductor systems for photocatalytic purposes	44
T111: Synthesis of compositionally modulated FAPbI ₃ films by dual-source thermal evaporation	46
T112: Máscaras de oro para nanoestructurado de vidrio	48
T114: Síntesis y evaluación de nanoemulsiones cargadas con cannabidiol (CBD) sobre la viabilidad de células de carcinoma mamario y de células no neoplásicas caninas	49
T115: Síntesis de aleación multicomponente TiNbTaZrSn nanocrystalina mediante aleado mecánico de alta energía	51
T116 : Study of nanostructured lipid carriers and key variables through combinations of surfactants to modify the hydrophilic-hydrophobic balance	53
T119: Síntesis y caracterización de glico nanopartículas metálicas in situ en papel filtro con potenciales aplicaciones en remediación de contaminantes en matrices acuosas	55
T122: Pillar-layered architectures for the development of thin films coordination polymers	57
T123: A one-step microsynthesis method to produce high-quality gold nanoparticles for screening applications	59
T124: Hygromechanical properties of enzymatically digested cotton-based nanocellulose with modified wetting properties	60

T125: Grafeno como conductor transparente en celdas solares	61
T126: Nanocompósitos autorreparables por efecto Joule basados en una matriz polimérica de polimetilmetacrilato y policetonas con nanorrellenos grafiticos	62
T127: Síntesis y caracterización de aislantes topológicos nanoestructurados	64
T128: Growth and characterization of LMO thin films on flat substrates through electron beam deposition	66
T129: Electrosynthesis and characterization of rhenium nanoparticles and their evaluation in hydrogen evolution reaction	68
T130: Preparación de cerámicas nanoestructuradas bidimensionales para su aplicación como sensores de gases	69
T132: Graphite exfoliation into graphene-like nanostructures using polyketone modified with furan pendant groups	71
T133: Microwave-assisted synthesis and characterization of lanthanide metal organic frameworks constructed from a curcuminoid ligand for fluorescence sensing of organic contaminants	73
T134: Synthesis of ZnTe quantum dots obtained in aqueous medium and their incorporation into elastomers: computational and experimental analysis	75
T137: Effect of the oxidation on the surface of the thin copper films	77
T136: Desarrollo de recubrimientos de nanoestructurados en base a h-BN para el control de corrosión microbiana	78
T138: Optimization of the method for synthesis of albumin nanoparticles loaded with ciprofloxacin and evaluation of their stability	80
T140: Adsorción de (3-Aminopropil)trióxido de silano (APTES) en superficies de Silicio mediante fase vapor para crecimiento controlado de SURMOF	82
T142: Graphene quantum dots from biomass waste synthesized via microwave hydrothermal method	84
T143: Síntesis de nanotubos de carbono sobre TiO ₂ para el desarrollo de recubrimientos de titanio poroso con aplicaciones en implantes médicos	86
T144: Fabricación de estructuras metal orgánicas (MOFs) a través de síntesis no convencional	88
T145: Efecto de la adsorción de tioles sobre la resistencia eléctrica de películas de cobre	90
T146: Estudio de estabilidad y citotoxicidad de suspensiones de nanopartículas de ferrita de bismuto dopadas con samario y recubiertas con polietilenglicol, BiFeO ₃ :Sm ³⁺ -PEG	92
T147: Nanoestructuración de vidrios por litografía suave	94
T148: Nanoestructuras de Cu ancladas molecularmente a sustratos como catalizador para la reducción electroquímica de CO ₂	95
T149: Fabricación de material híbrido Zr-MOF/SnO ₂ para su aplicación como sensor de gas	97
T150: Fabricación de material híbrido Zr-MOF/compuestos de grafito laminares para su aplicación como sensor de gas	99
T151: Modificación de la superficie de nanofibras de celulosa con moléculas curcuminoides para la fabricación de películas delgadas para la detección de contaminantes en agua	101
T152: Propolis as a source of active chemical compounds of interest to be encapsulated in lipid nano-carriers	103
T153: Desarrollo de nanomateriales híbridos basados en nanopartículas de oro y MOF para mejorar la detección por fluorescencia de biomarcadores de la Enfermedad de Alzheimer	105
T154: Microstructure evolution of carbon films with increasing substrate temperature by using physical vapor deposition techniques	107
T156: Síntesis y caracterización de semimetales de Weyl	108
T158: Characterization and electrochemical studies of LiFe _x Zn _y Mn _{2-x-y} O ₄ (x, y= 0.25 or 0.75) cathode materials prepared by UA-TDN method	109
T159: Vidrio nanoestructurado como superficie autolimpiante hidrofóbica para módulos fotovoltaicos	111

T160: Metales y grafeno como barreras de difusión de cobre en la metalización de contactos eléctricos de celdas solares	113
T163: Incorporation of water-soluble quantum dots and formation of wrinkled patterns on acrylic and silicone elastomers	115
T165: Synthesis and characterization of copper nanoparticles supported on ferrocene functionalized chitosan with application in the thermal decomposition of solid composite propellants	117
T167: Morphology study of perovskites and its influence in solar cell performance	119
T169: Biosynthesis of nanoparticles by the antarctic thermophilic microorganism ID17 belonging to the Geobacillus genus	120
T171: Síntesis mecánica de perovskitas híbridas $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ con aplicación en concentradores solares de tercera generación	121
T172: Crecimiento de disulfuro de molibdeno nanocristalino	123
T173: Desarrollo de nanogeneradores triboeléctricos basados en polipirrol nanoestructurado como electrodo flexible 125	125
T175: Fabricación de esponjas multifuncionales de nanocelulosa-grafeno, inteligentes ligeras y con humectabilidad especial	127
T177: Síntesis de nanocelulosa hidrofóbica vía microondas en un solo paso, utilizando un solvente eutéctico profundo. 129	129
T178: Síntesis y caracterización de sistema de líquidos iónicos ácidos de Bronsted soportados en nanopartículas magnéticas para catálisis ácida	131
T181: Effect of the nature of the alkaline earth ion on the photoactivity of composites derived from niobium pentoxide 133	133
T182: Síntesis de nanoesferas de oro funcionalizadas con PEG, péptido D1 y quitosano para optimizar la administración intranasal.	134
T183: Design and development of self-healing polymeric materials functionalized with carbon nanotubes for cutting-edge applications	136
T185: Crecimiento de nanocables de permalloy utilizando especies perdidas en una fuente de condensación en fase gaseosa	138
T186: Non-enzymatic glucose sensor from NiO nanostructures synthesized sonoelectrochemically. Synthesis, characterization and determination of analytical merit figures.	140
T188: Propiedades mecánicas multiescala de membranas electrohiladas a base de PVA gelatina de salmón y quitosano 142	142
T190: Electrode design using Cu_2O catalysts stabilized on conductive polymers for the electrochemical reduction of nitrogen compounds to ammonia.	143
T191: Caracterización temporal de láminas delgadas de plata con equipos de bajo costo basados en arduino	145
T192: Mallados de nanofibras poliméricas de Poli(estireno-co-anhídrido maleico) (PSMA) modificado con aminoácidos para el control en la liberación de nanopartículas de plata (AgNPs) como agente antibacteriano, ensayos de liberación y pruebas antimicrobianas de agentes bioactivos.	147
T195: Obtención de nanopartículas de grafito mediante un molino de bolas	149
T196: Synthesis and evaluation of nanoemulsions loaded with cannabidiol (CBD) on the viability of canine breast carcinoma and canine non-neoplastic cells	150
T197: Efecto de nanopartículas de Renio sobre nanotubos de carbono en las reacciones asociadas a la producción de hidrógeno verde y peróxido de hidrógeno	151
T198: A simple electroanalytical methodology for determination of zaleplon by adsorptive stripping voltammetry in synthetic saliva	152
T199: Evidencia de porfirinas soportadas en carbono pirolizadas para la reacción de reducción de oxígeno manteniendo la integridad	153
T1001: Study of the growth mode of nanostructured metallic oxide thin films	155

T1002: Efficient defect passivation in CsPbX ₃ perovskite nanocrystals for 3D printing, stabilization in polar solvents and future solar-driven chemistry	156
T1003: Catalytically assisted synthesis of MoS ₂	157
Tópico T2: Nanoelectrónica, nanomagnetismo y nanoóptica	158
T201: Hybrid lanthanide complexes for nanomagnets	159
T203: Respuesta magnética de películas ultradelgadas de óxido de cobalto	160
T205: Bound states in the continuum in cross shape junctions formed by one-dimensional wave guides	162
T206: Bound states in the continuum in a one dimensional Aharonov-Bohm ring with impurities and Rashba spin-orbit interaction	163
T208: Vertical and in-plane electronic transport of graphene nanoribbon/nanotube heterostructures	164
T209: Quantum interference in photonic systems	165
T210: Creation of spin defects in h-BN monolayer by ion implantation	167
T211: Optical characterization of electronic spin defects in hexagonal boron nitride monolayers	169
T212: Substrate impact in the photostability of hexagonal boron nitride monolayer	171
T213: Fabrication and characterization of iron nanodiscs with vortex properties and their potential application in magnetic hyperthermia	172
T214: Au photonic crystals for high-sensitivity SERS molecular sensing	174
T215: Ultra-low thermal budget, BEOL-compatible, correlated electron random access memory (CeRAM) for harsh environment applications	175
T216: Computational macroscopic QED for vibrational polaritons in infrared nanocavities	177
T217: Bound states in the continuum and Majorana zero modes in a double quantum dot interferometer	178
T218: Spin-to-charge conversion in copper oxide heterostructures	179
Tópico T3: Nanobiología, nanomedicina y nanofarmacología	180
T302: Desarrollo de sistema microparticulado de tipo liposomal para la encapsulación de derivados de algas	181
T303: DNA delivery nanosystem by ionic interaction with metformin	183
T304: Characterization, optimization, and development of an amorphous solid dispersion that generates amorphous nanoparticles during dissolution	185
T306: Exploring the Influence of Traction Speeds on Nanoparticle Penetration through Molecular Simulation	187
T307: Estudio de la formación de la corona proteica en nanopartículas magnéticas en un régimen dinámico	189
T308: Synthesis and testing of biocompatible and photocurable resins for 3D printing by modifying TPMS structure for use in bone regeneration	191
T309: Evaluación hidrodinámica de nanopartículas de oro por microfluídica para cultivo celular	193
T310: Synthesis and characterization of lipid core micelles (LCM) loaded with peptides with therapeutic potential	195
T311: Trans-Cis switching of proline for peptide design on functional surfaces	197
T312: Evaluación de la ruta Internalización de nanopartículas poliméricas híbridas (lípidos-polímero) en líneas celulares de cáncer colorrectal	199
T313: Síntesis y caracterización de nanopartículas de oro recubiertas por nanoclusters de oro-albúmina conjugados con ácido fólico a través de microfluídica para aplicaciones en nanomedicina	201
T314: Desarrollo de un nanosistema termosensible para la liberación controlada del fármaco cardioprotector SAHA	203
T315: Turn-on nanogenosensor for on-site diagnosis of Leptospira interrogans serovar Hardjoprajitno through smartphone-based imaging	205

T316: Obtaining gold nanorods modified with folic acid, coated with albumin through microfluidics for applications in cancer	207
T317: Micelas de núcleo lipídico como sistema de entrega y liberación de ciprofloxacino	209
T318: Enhancing anticancer drug release through stimuli-responsive transferrin-gated silica nanocarriers: tuning a pH-sensitive framework versus pH-sensitive surface linker	210
T319: Formulación de dispositivos impresos en 3D destinados a liberación controlada de fármacos mediante la incorporación de nanopartículas de oro de diferentes morfologías a materiales fotosensibles utilizando la técnica de impresión estereolitografía	212
T320: Nanotransporters of therapeutic agents for colorectal cancer treatment: rational design of nanoparticles for drug encapsulation, transport, and release	214
T321: Nanorods with plasmonic properties in the second biological window (NIR-II) functionalized with peptides capable of inhibit and disaggregate β -amyloid aggregates.	215
T322: Desarrollo y optimización de un nanosistema liposomal híbrido como potencial plataforma para la liberación controlada del antioxidante epigallocatequina-3-galato	217
T323: Incorporación de una nanoválvula en nanopartículas core-shell GNR@mSiO ₂ para el control de la liberación de fármacos activada por calentamiento plasmónico en la ventana biológica	219
T325: Efecto antibacteriano de micelas de núcleo lipídico cargadas con ciprofloxacino sobre Escherichia coli y Staphylococcus aureus	221
T326: Micelas de núcleo lipídico funcionalizadas con cadena peptídica trifuncional como sistemas de transporte de moléculas de baja solubilidad acuosa hacia cardiomiocitos	223
T329: Synthesis, characterization, and antibacterial evaluation of a nanostructured lipid carrier against Helicobacter pylori	225
T331: Nanopartículas de oro conjugadas con el péptido AS4923 no afectan la viabilidad celular de macrófagos THP-1	227
T332: Formation of artificial membranes of lipid raft models by physical vapor deposition on silicon substrates	229
T334: FTIR and SRE spectra analysis for supported lipids bilayers (SLB's) with dry incorporation of Gramicidin A on different substrates	230
T336: Homogenization of DPPC phospholipid bilayers deposited from their vapor phase onto single-crystal silicon substrates through annealing under different conditions (air, N ₂ , and vacuum).	231
T337: Synthesis and characterization of ciprofloxacin-loaded albumin nanoparticles for the treatment of urinary tract infections	233
T338: Síntesis y evaluación de citotoxicidad de nanoesferas de oro funcionalizadas con PEG en fibroblastos cardíacos	235
T340: 3D printed scaffolds with multi-hierarchical structures based on biocompatible resins and insulin-loaded PLGA nanoparticles for tissue engineering purposes	237
T342: Nanopartículas de oro tipo Core-Shell para reducción de la toxicidad in vivo de especies solubles de β -amiloide	239
T343: Fabrication of biocompatible and bioactive photocurable resins through 3D printing for applications in bone regeneration	241
T344: Desarrollo de películas poliméricas híbridas con micelas de núcleo lipídico cargadas con doxiciclina incorporadas mediante impresión por inyección de tinta	242
T347: Study of the interaction of plasmonic nanoparticles with plasma proteins: a comparison between static and dynamic regime	244
T348: Multiple Beta-sheet breaker-functionalized gold nanoparticles as novel candidates in the treatment of Alzheimer's disease	246
T349: Melanoma cell-derived exosomes with inclusion of gold nanorods for potential photothermal therapy in metastatic cancer	248
T350: Adsorción de grupos aminos aromáticos en nanomateriales a base de carbono	250

T351: Desarrollo de un nanosistema lipídico vectorizado con péptido de reconocimiento de células tumorales de cáncer de ovario para la entrega controlada de Morina	251
T353: Biosynthesis of metallic silver, copper and zinc nanoparticles with antimicrobial properties by the thermophilic Antarctic bacterium <i>Geobacillus</i> sp. ID17	253
T354: Propolis combined with honey-copper nanoparticles enhance antibacterial activity: potential application in chronic wound healing	255
T355: Development of a microfluidic platform as an interaction interface for detection of exosomes derived from breast cancer cell lines	256
T356: Efecto de la funcionalización de poli(anhídrido maleico-co-estireno) con aminoácidos de distinto índice hidropático en la respuesta bioactiva de mallados poliméricos	258
T357: Síntesis y caracterización de nanopartículas de oro multifuncionalizadas con ciclodextrinas y péptido de reconocimiento de células tumorales de cáncer de ovario para la formulación y entrega controlada de epigallocatequina-3-galato (EGCG)	260
T358: Colloidal Nanomedicines with Prolonged Release Based on Interactions Involving Aromatic Groups	262
T359: Efecto de nanopartículas de Quitosano en la inhibición de la formación de biofilm oral in vitro de bacterias del género <i>Streptococcus</i>	264
T360: Comparing the effect of different type of nanofibers alignment methods on muscle cells development	265
T361: Nanopartículas Plasmónicas con derivado curcuminóide para detección de beta-Amiloide en la Enfermedad de Alzheimer	266
T362: microRNAs vehiculizados en Nanopartículas de oro direccionalizadas con FSH33, como agente antitumoral sinérgico sobre células de cáncer ovárico	268
T363: Tecnologías poco contaminantes para el atrapamiento/encapsulación de moléculas activas en vehículos de tamaño nanométrico y evaluación en diversos modelos patológicos: diseño, desarrollo, caracterización, evaluación in vitro y validación in vivo	270
T364: Improved Filtration Efficacy and Breathability of Eco-Friendly Biofilters against SARS – CoV 2 Virus Using Rotary Jet Spinning Technology	272
T365: Polyarginine nanocapsules as a carrier for Astaxanthin intranasal delivery to treat neuroinflammatory diseases	274
T366: Amlodipine entrapment by aromatic-aromatic drug-polymer interactions: a proof of principle testing poly (sodium 4-styrenesulfonate) and hydroxypropylmethylcellulose phthalate	276
T368: La naturaleza del agua en la zona de constricción del canal CiHv1 podría explicar elementos faltantes en el mecanismo de conducción de protones	278
T369: Combatiendo el cáncer de mama con terapia plasmónica fototérmica y quimioterapia in situ: Nanoestructuras de DOX-Au@SiO ₂ -NDs	280
T370: Desarrollo de un implante bioimpreso con nanopartículas poliméricas para la entrega controlada de péptidos hormonales en corvina (<i>Cilus gilberti</i>)	281
T371: Efficacy of Antifouling Additives in Materials	283
Tópico T4: Nanotecnología para la conversión y almacenamiento de energía	284
T402: Efecto magnetocalórico en una monocapa y bicapa de grafeno	285
T403: Desarrollo de un ánodo de óxido de níquel-cobre con topografía fractalica para baterías de ion-litio	287
T404: Effect of alkyl side chains on BDT derivative donor molecules in OPV devices fabricated by vacuum thermal evaporation	289
T406: Estudio de la fuerza de adhesión de partículas de soiling con microscopía de fuerza atómica	291
T407: Electrodo de nanotubos de carbono/ferrita de cobalto aglutinado con el líquido iónico N-octilpiridinio hexafluorofosfato. Actividad hacia la reacción de evolución de hidrógeno a pH neutro	293

T408: Estudio de XRD y EDS en películas delgadas de LNMO	295
T410: Geles como electrolitos para supercapacitores de estado sólido	297
T411: Síntesis de rGOAg para aplicaciones en supercapacitores	299
T412: Síntesis rápida de nanopartículas de CdMoO ₄ y CdWO ₄ para ser usadas junto a rGO en supercondensadores de alta eficiencia	301
T413: Electrodo de pastas nanocarbonosas, líquido iónico y nanopartículas de óxidos de metales de transición depositados sobre carbón vítreo. Actividad hacia la electrooxidación de hidracina	303
T414: Síntesis de nanopartículas de LiMn ₂ O ₄ utilizando nanocelulosa como agente reductor	305
T415: Electrosíntesis de poliindol nanoestructurado adornado con nanorod de MnO ₂ y evaluación de sus propiedades como supercondensador	306
T416: Síntesis de electrodos de FeMo para reducción de nitrógeno a amoníaco	308
T417: Surface functionalization of nanostructured vanadium pentoxide for lithium-ion batteries applications	310
T418: Electroreduction of nitrogen compounds to ammonia, using Cu ₂ O catalysts stabilized with conductive polymers	312
T419: Fluorescence Carbon dots (CQDs) produced via hydrothermal carbonization incorporated with Graphene Oxide	314
T420: Evaluation of thermal evaporation as deposition method for polymer-based OPV devices	315
T421: Effect of post-synthesis treatments on the activity of metal catalysts based on metal-organic compounds in CO ₂ hydrogenation reaction	316
T424: Synthesis and physicochemical characterization of aqueous nanofluids (ZnO/H ₂ O and ZnO-Ag/H ₂ O) for microscale heat transfer application	317
T425: Electrodo de carbón vítreo, modificados con pastas de nanotubos de carbono, líquido iónico y nanopartículas de óxido de cobalto, como potenciales electrocatalizadores hacia la oxidación de amoníaco	318
T426: Electrochemical synthesis and modifications of MoS ₂ -based nanometer surfaces as catalysts for electrochemical Nitrogen reduction	320
T427: Electrocatalytic reduction of nitrate to ammonia using copper nanocubes electrodes with preferential crystallographic orientation (1 0 0) in acid medium	322
T429: Quantum antidot with Aharonov-Bohm flux as a Quantum Otto Engine	324
T430: Estudio de la eficiencia de DSSC con tinte de maqui al incorporar AgNPs	325
T431: Basis controlled growth and electrochemical behavior of cobalt and 1,3,5 benzene-tricarboxylic acid-based MOFs for supercapacitor applications	326
T432: Formation of self-assembled monolayer on LNMO Surface	327
T433: Construcción de superficies nanoestructuradas de FePc para sistemas de conversión de energía: reacción de reducción de oxígeno	328
T434: Flexible self-adaptive thermal radiators using infrared thermochromic antennas	330
T436: Rhenium and rhenium-copper nanoparticles: evaluation of the catalytic activity for the decomposition of ammonium perchlorate	331
T439: Nanodomes substrates as a tool for tuning the magnetoelectro properties of a Co-based pseudo spinvalve.	333
T440: Use of VACNT as current collector in a V ₂ O ₅ -based lithium ion battery	334
T441: CsPbBr ₃ -based photoanode prepared by single-step Vapor Transport Deposition of perovskite films	335
T444: Reexaminación de propiedades electrocatalíticas de Pt/C 20% para las reacciones de reducción y evolución de oxígeno en medio ácido, neutro y básico	336
T445: Fabricación y funcionalización de películas delgadas de LNMO como material catódico para baterías de ion-litio	338
T446: Efecto de los aniones Br ⁻ , ClO ₄ ⁻ , NO ₃ ⁻ en la electrocatalisis de la reacción de reducción de oxígeno en electrodos modificados con fetalocianina de hierro enlazadas a nanotubos de carbono	340

T447: Development of bio-photo anodes using Ulvophyceae macroalgae	342
T448: Spin-selection control to improve the electrocatalysis for the oxygen reduction reaction in chiro-self-assembled FePc systems	343
T451: Graphene based electrodes for efficient supercapacitors	344
T452: Electrodo de $Ni_{1-x}Cu_x$ sobre acero inoxidable para la oxidación electroquímica de amoníaco	345
T453: Tandem photochemical cell based on nanostructured metal oxides	347
Tópico T5: Aplicaciones de nanotecnología para el medio ambiente y economía circular	348
T501: Nanocomposites based on molybdenum oxide and graphitized carbon nitride for the partial oxidation of guaiacol and the obtaining of added value molecules	349
T503: Síntesis y aplicación de compósitos ternarios con estructura core-shell para la remediación de antibióticos	350
T504: Natural-based nanocomposite reinforced by Hydroxyapatite nanoparticles as a water reservoir for agriculture use	352
T506: Anionic Zn(II) MOFs as new candidates for the removal of heavy metal in aqueous solutions	354
T508: Plasmonic and photothermal effects of CuS nanoparticles biosynthesized from acid mine drainage with potential biomedical applications	355
T509: Diseño, fabricación y prueba de cámara para medir resistividad en materiales sensores de gas	357
T510: Detección electroquímica simultánea de Bisfenol-A y Bisfenol-S en aguas utilizando un sensor híbrido de óxido de grafeno y nanopartículas de hierro	359
T511: Imogolita a partir de polvos de hornos de cemento para la remoción de arsenito	360
T512: Microesferas de nanocelulosa bacteriana multifuncionales funcionalizadas con nanopartículas magnéticas de ferrita y puntos de carbono para la adsorción de plomo en agua	361
T513: Lignin nanoparticles as a carrier for biopesticides: characterization and evaluation against a Chilean plague	363
T514: Nanopartículas de BTN@ZnO:Tierras Raras como fotocatalizadores para la degradación del sulfametoxazol	365
T515: 2D organic-inorganic nanostructures of mixed oxides applied to the degradation of pollutants and production of solar fuels	367
T515: Inhibición de biofilm mediante compósitos con nanotubos de carbono de pared múltiple	369
T517: Aplicación de nanopartículas de Fe_2O_3-Ni y $MgO-Ni$ para la degradación de florfenicol mediante procesos Fenton y foto-Fenton heterogéneo	371
T518: Micro and nanoencapsulation of a polyphenol-rich extract from Carménère grape pomace (<i>Vitis vinifera</i> L.) by Spray Drying and Ultrasonic Nanoemulsification	372
T519: Influencia del decorado con Pt de la cerámica $CaCu_3Ti_4O_{12}$ (CCTO) para su aplicación como sensor de gas	374
T522: Síntesis verde de nanopartículas metálicas: análisis sobre sus potenciales aplicaciones como fertilizantes y agentes antimicrobianos.	375
T523: Degradación de contaminantes orgánicos utilizando nanocompósitos híbridos de TiO_2 laminar sensibilizado con nanoflores de $ReSe_2$	377
T524: Superparamagnetic iron oxide nanoparticles (SPIONS) and their role in Chlorpyrifos degradation in water using TiO_2 and ZnO nanoparticles	379
T526: Síntesis verde de nanopartículas de cobre a partir de relaves y sus aplicaciones para la reducción eficiente de colorantes orgánicos	380
T527: Degradation of antibiotic florfenicol in contaminated water by $Fe_3O_4 @C@ZnO$ nanophotocatalyst	381
T528: Remoción de zinc soluble usando nanopartículas de magnetita sintetizadas a partir de desechos siderúrgicos	383
T529: Chitosan nanoparticles increase drought tolerance in <i>Solanum lycopersicum</i> L	385

T530: Cotton textile with antimicrobial activity and enhanced durability produced by L-cysteine-capped silver and copper Nanoparticles	386
Tópico T6: Nanotecnología aplicada a la industria, transferencia y regulación de seguridad	388
T601: Smartphone-based nano-genosensor for on-site detection of bovine tuberculosis using saliva as a diagnostic fluid	389
T602: Fe and Co adatoms on bilayer borophene as single-atom catalysts for oxygen reduction reaction: A DFT study	390
T603: Desarrollo, estudio y rendimiento de sensores de gas basados en compuestos CuO-rGO	392
T604: Aplicación industrial de productos de base nanotecnológica para el control microbiano en la industria alimentaria	394
T605: Nanostructured membrane based on <i>Didymosphenia geminata</i> for efficient adsorption of divalent metals present in lithium brine	396
T607: Patentamiento de la nanotecnología: panorama en Chile y el mundo	397
T610: Uso de nanopartículas de cobre como biocida en espacios hospitalarios	398
T611: Desarrollos recientes de Nanofármacos, Biocontrolled-Grupo LETI SAV. Vanguardia en Venezuela	400
Tópico T7: Modelamiento y simulación de materiales, estructuras y dispositivos nanométricos	401
T701: Fe and Co adatoms on bilayer borophene as single-atom catalysts for oxygen reduction reaction: A DFT study	402
T703: Exploring linkers and surfaces for enhanced environmental control with SURMOFs	404
T704: Structural and electronic properties of M-MOF74 (M = Mn, Fe, Co) and their interaction with small molecules	406
T705: Thermodynamics of the physisorption of capping agents on silver nanoparticles	408
T706: Majorana edge states in Josephson junctions	409
T707: Towards biocompatible nanoparticle coatings: utilizing amino acid-like agents for enhanced metal properties	410
T709: Arquitectura a nanoescala: diseño y modelado de nanopartículas bimetálicas para aplicaciones avanzadas .	412
T710: Modificando las propiedades termoeléctricas en nanocintas de siliceno dopadas	414
T711: Exploring electron-electron interaction in transition metals: a case study of CrI ₃	415
T712: Estudio teórico-computacional de MOF con nuevos ligandos de tipo curcuminoide para la detección de contaminantes emergentes	417
T713: Comportamiento mecánico de una lámina de óxido de grafeno bajo estrés: un estudio de los grados de oxidación y segregación	419
T714: Unraveling the delayed fluorescence mechanism of Copper(I) dyes from DFT calculations	421
T715: Topological bands in the PdSe ₂ pentagonal monolayer	422
T716: Simulations in graphene oxide: Benefits of molecular dynamics in nanotechnology	423
T717: Magnetocaloric effect in q-clock system	424
T718: Effects of random vacancies on the spin-dependent thermoelectric properties of silicene nanoribbon	425
T719: Surface favorable composition of [FA,Cs]PbI ₃ perovskite alloys for efficient and stable solar cells	426
T720: Modelling of the higher-order inclusion nanocomplexes of lurasidone HCl with β -cyclodextrin and hydroxypropyl- β -cyclodextrin	428
T723: Dinámica molecular ab-initio de metanol nanoconfinado entre láminas de grafeno	429
T724: Implementation a method of refining collective variables via dimensionality reduction techniques for use in molecular dynamics simulations	431
T726: A simple electrostatic model to predict the adsorption orientation of proteins on surfaces under external electric fields	433

T727: Electrostatic interactions of RNA and protein-like substrates with the non linear Poisson-Boltzmann equation	434
T730: Size matters: free-energy calculations of amino acid adsorption over pristine graphene	435
T733: Implementación de un método de refinado de variables colectivas vía técnicas de reducción dimensional para uso en simulaciones en Dinámica Molecular	436
T735: Adsorption of silane-based molecular inhibitors on tungsten surfaces: insights from first-principles calculations	438
T737: Construcción de bloques moleculares de hexa-peri-hexabenzocoroneno acoplado a porfirinas meso- y beta-sustituidas con -F, -CH ₃ y -NO ₂	439
Tópico T8: Otros tópicos de nanotecnología y nanociencia	440
T801: Study of the effect of side alkyl chains on the molecular stacking and charge transport of OPV devices based on 2D-BDT type electron donor molecules	441
T804: Estudio de la estabilidad coloidal y viabilidad celular de nanopartículas de titanato de bario dopadas con iones samario y gadolinio, como biomarcadores	443
T805: Enhanced efficiency at maximum power in a Fock-Darwin model quantum dot engine	444
T807: Lubricación sólida de recubrimientos nanocompuestos tipo sándwich de Ti ₃ C ₂ T _x -MoS ₂	445
T809: Controlling temperature-responsive bilayer actuators of Cs-MoS ₂ /PVDF using infrared light and laser	447
T810: Liposomal encapsulation of anti-freeze proteins with potential agricultural use	449
T813: Synergistic impact of nanoarchitected GQDs-AgNCs(APTS) modified glassy carbon electrode in the electrochemical detection of guanine and adenine	450
T814: Hierarchical surface texturing in stainless steel through Electron Beam Lithography as an alternative to prevent bacterial adhesion	451
T815: Diseño, implementación y puesta en marcha de equipo de fotolitografía sin máscara	452
T816: Formulation and characterization of solid lipid nanoparticles containing fleshed colored potatoes extract that has potential inhibitory activity against Rhizoctonia solani pathogen of Solanum tuberosum crops	453
T817: Caracterización de nanoestructuras de exoesqueletos en coleópteros del desierto de Atacama	454
T820: Higher-order obstructed atomic phase in centrosymmetric pentagonal monolayer PdSe ₂	455
T821: Síntesis y caracterización de nanopartículas de oro multifuncionalizadas con ciclodextrinas y péptidos de reconocimiento de células tumorales de cáncer de ovario para la formulación y entrega controlada de epigallocatequina-3-galato (EGCG)	457
T824: Citotoxicidad de nanomateriales: formación del primer Laboratorio de Nanoseguridad en Chile	459
T825: Diseño y construcción de electrospinning de campo cercano	460
T826: Perovskite-based X-ray detector for radiotherapy applications	462

Charlas Invitadas

Francesca Iacopi
University of Technology
Sydney, Australia.

More-than-Moore miniaturisation with graphene and cubic silicon carbide

It is well known that harnessing graphene's properties on a silicon platform could deliver a broad range of novel miniaturized and reconfigurable functionalities. It is less known that some key functionalities for MEMS/NEMS, nano-optics and metasurfaces can be uniquely unlocked by the combination of graphene and silicon carbide [1, 2, 3].

Over the last decade, we have developed an epitaxial graphene on silicon carbide on silicon technology that inherently delivers both capabilities. This platform allows to fabricate any complex graphene flat or 3D nanopattern in a site – selective fashion, ie without etching of the graphene, at the wafer -scale and with sufficient adhesion for integration [1, 4].

We will review the learnings from the development of this technology and some of its most promising applications. We show that the sheet resistance of epitaxial graphene on 3C-SiC on silicon is comparable to that of epitaxial graphene on SiC wafers, despite substantially smaller grains. We also indicate that the control of the graphene interfaces, particularly when integrated, can be a more important factor than achieving large grain sizes [5]. In addition, we show that well- engineered defects in graphene are preferable to defect -free graphene for most electrochemical applications. Promising examples of application of this technology in the More- than -Moore domain include integrated energy storage [6], MIR sensing and detection [7], and sensors for electro-encephalography [8, 9] for brain-computer interfaces [10].

References

- [1] Cunning B. et al. (2014), doi.org/10.1088/0957-4484/25/32/325301
- [2] Romero E. et al. (2020), doi.org/10.1103/PhysRevApplied.13.044007
- [3] Rufangura P. et al (2020), doi.org/10.1103/10.1088/2515-7639/ab9d10
- [4] Katzmarek D. et al. (2023), doi.org/10.1088/1361-6528/ace369
- [5] Pradeepkumar A. et al. (2019), doi.org/10.1021/acsanm.9b02349
- [6] Amjadipour M. et al. (2020), doi.org/10.1002/batt.201900204
- [7] Rufangura P. et al. (2021), doi.org/10.3390/nano11092339
- [8] Faisal S. et al. (2021), doi.org/10.1088/1741-2552/ac4085
- [9] Faisal S. et al. (2023), doi.org/10.1021/acsanm.2c05546
- [10] Iacopi F. et al. (2022), doi.org/10.1088/2516-1091/ac993d



Keynote speaker

Stacey F. Bent

*Department of Chemical
Engineering,
Department of Energy
Science and Engineering,
Stanford University
Stanford, CA 94305
USA*

Nanoscale Materials Synthesis for Sustainable Energy Applications

With the global need for alternative energy and fuels, there is strong interest in the development of more efficient energy conversion and storage technologies. The requirements to achieve these energy conversion processes with high efficiency has motivated the need to synthesize materials at the nanoscale. Among the many synthetic strategies that are being applied to create these nanoscale components, atomic layer deposition (ALD), a technique widely used for making computer chips, has now emerged as one of the most exciting tools for the study, design, and fabrication of energy materials with improved properties and performance. This talk will describe our research applying ALD to the study of energy conversion devices, including both catalysts and lithium metal batteries. We show that nanoscale films deposited by ALD on lithium battery electrodes can enable uniform and reversible Li plating, leading to improvements in battery cyclability. For catalysts used in chemical conversion, we show that atomically-precise ALD titration of additive components onto supported metal catalysts allows for the tuning of activity and selectivity and provides new insights into structure-property relationships in these systems. The outlook for ALD to synthesize nanoscale materials and engineer interfaces for sustainable energy applications will be discussed.

Marta C. Hatzell

*Associate Professor of
Mechanical Engineering,
Associate Professor of
Chemical and
Biomolecular
Engineering,
Georgia Institute of
Technology*

Electrifying the Synthesis of Nitrogen and Carbon-based Fuels and Fertilizers

Of the four major energy-use sectors (transportation, residential, commercial, and industrial), the industrial sector accounts for the largest amount of energy use (~32 quad/year). This energy use results in nearly 1500 million metric tons of carbon dioxide emissions yearly[1]. The large carbon footprint is because coal, natural gas, and petroleum are the primary energy sources utilized. With rising concerns related to global carbon emissions, there is a strong interest in displacing most of this hydrocarbon demand with renewable-derived electricity. However, displacing hydrocarbons directly with electricity is not always feasible, prompting the need to redesign many industrial separations and catalytic processes to enable widespread electrification.

Within the chemical commodity industry, movement away from thermocatalytic processes and toward electrocatalytic processes is one way to electrify catalysis. Likewise, movement away from thermal distillation-based separations and toward membrane-based processes is one way to increase electrification associated with separations. However, there are many thermodynamics and kinetic-based challenges with transitioning toward these electrified processes. Thus, there is a growing need to understand at a molecular scale the inefficiencies of these emerging technologies. The primary aim of this talk is to describe progress associated with the electrification of industrial catalytic processes, and detail efforts by the Hatzell lab aimed at elucidating molecular scale insights related to transport and kinetics within these technologies. Specifically, we will highlight our work aimed at electrifying the synthesis of carbon- and nitrogen-based fuels and chemicals.

Galo J. A. A. Soler-Illia
*Instituto de
Nanosistemas, Escuela
de Bio y
Nanotecnologías.
Universidad Nacional de
General San Martín.
Argentina.*

Programmable Nanosystems: a second generation of nanomaterials

In the last years, a natural evolution is taking place at high speed, from first generation nanomaterials with structure and morphology-controlled properties to nanosystems, in which properties can be programmed by precisely locating multiple functions in space. Today we aim at building multiscale nanoarchitectures with space-dependent properties that can adapt to the environment and present dynamic and vectorial responses to stimuli.

In this exciting field, chemical synthesis routes opened the path to complex nanomaterials that mimic the complexity of those found in Nature. Current efforts are directed to produce nanosystems with well-defined functional domains that can intercommunicate to obtain an emergent behavior derived from the local structure, the mesoscale architecture and the spatial location of different molecular, polymeric, biological or nanoscale functions.

Mesoporous materials (MM) with high surface area and controlled mesopore diameter (2-50 nm) constitute a highly tuneable platform. The pore architectures and dimensions can be finely tailored, and “decorated” with a variety of molecular, bioactive or nanoscale components. Chemical routes lead to pre-programmed nanosystems, in which confinement effects, responsivity, or collaborative functionality can be imparted into the structure through the control of positional chemistry of different nanobuilding blocks.

We will present examples based in MM in which sol-gel chemistry, self-assembly and localized reactivity are the basic topological toolkit that enables their construction. The combination and feedback of synthesis, characterization and modeling leads to nanosystems with responsive and autonomous behaviour programmed in their structure at the molecular, mesoscopic and interfacial length scales. We will illustrate this concept with examples in novel catalysts, remotely activated nanoparticles, responsive optoacoustic devices or perm-selective membranes.

The chemical strategies and tools at our disposal are key to design and produce a potentially infinite variety of programmable and intelligent matter presenting controllable behaviour, with wide applicability in bioinspired catalysis, environmental sensing, renewable energy, prosthetics, soft robotics or synthetic biology.

Guillermo Mínguez
Espallargas
*Instituto de Ciencia
Molecular (ICMol),
Universidad de Valencia
(Spain)*

Solvent-free synthesis of Metal-Organic Frameworks: a route towards elusive materials

Metal-organic frameworks (MOFs), also known as porous coordination polymers (PCPs), have emerged in the last 30 years as revolutionary molecular materials with applications in societal and industrially relevant domains such as storage of fuels (hydrogen and methane), capture of gases (e.g. greenhouse gases), separation, drug delivery and catalysis, among others [1]. Recent advances in this area in the past decade has resulted in an explosive growth in their preparation, characterization, and study, with more than 100.000 MOFs reported. The common property for all these open crystalline frameworks is their permanent porosity constructed from the assembly of inorganic sub-units and organic linkers, providing an assortment of topologies and different architectures that can be intended by chemical design.

Herein we will present an uncommon synthetic approach, very versatile, for the preparation of elusive porous materials, based on the absence of solvents. With this approach, we will first present the iron(II) analogue of ZIF-8 [1]. Then, we will extend this approach for the preparation of multivariate ZIFs, which is typically limited due to the absence of control of topologies when a mixture of ligands/metals is used [2,3]. We will show also its applicability to prepare iron(II) glasses, achieved through a series of solid-state transformations that result in a meltable iron based zeolitic imidazolate framework (ZIF) [4]. And finally, we will use this methodology for the inclusion of catalytically active Pd(II) centres in a highly robust MOF [5].

References

- [1] López-Cabrelles J. et al. (2019), doi.org/10.1021/jacs.9b02686
- [2] López-Cabrelles J. et al. (2022), doi.org/10.1039/d1sc04779e
- [3] León-Alcaide L. et al. (2023), doi.org/10.1021/jacs.3c08017
- [4] León-Alcaide L. et al. (2023), doi.org/10.1021/jacs.3c01455
- [5] Miguel-Casañ E. et al. (2023), doi.org/10.1039/d2sc05192c

Michael Kappl
*Max Planck Institute for
Polymer Research,
Germany.*

Silicone Nanofilament coatings for Supraparticle Formation and efficient Membrane Distillation

Silicone nanofilaments can be prepared from trichloromethylsilane using a spontaneous growth process in toluene in the presence of trace amounts of water. This allows the preparation of non-fluorinated superhydrophobic surfaces with water contact angles $> 160^\circ$ and roll-off angles of less than 5° . We use such surfaces for the evaporation driven formation of supraparticles from colloidal dispersions. The inner structure and outer shape of such supraparticles can be tuned by the colloidal interactions and the evaporation conditions. Another application of such nanofilament layer is the fabrication of highly efficient multilayer membranes for membrane distillation, that can be applied for water desalination or water recovery from waste water streams.

Enrique Diez

*Group of
Nanotechnology,
Nanolab, Universidad de
Salamanca. Spain.*

Juan

Salvador-Sánchez

Daniel Vaquero

Vito Clericò

Carlos Sánchez

J.A. González-Notario

Yahya Meziani

Jorge Quereda

Ana Pérez-Rodríguez

Mario Amado

*Group of
Nanotechnology,
Nanolab, Universidad de
Salamanca. Spain.*

Francisco

Domínguez-Adame

*GISC, Departamento de
Física de Materiales,
Universidad Complutense
de Madrid. Spain.*

Broken symmetries in nanostructures based on quantum materials

Two-dimensional (2D) crystals are particularly well suited for studying the interplay between symmetry and nonlinearity due to their high level of ordering. Remarkably, electronic states in these systems display quantum effects that give rise to novel and intriguing nonlinear effects simplifying further symmetry analysis.

In addition to the spin degeneracy, charge carriers in graphene have an additional degree of freedom called valley pseudospin. At the corners of the Brillouin zone (K and K' points), the electronic states on the two sublattices in pristine graphene are decoupled and have the same energy, giving rise to the so-called valley degeneracy. This degeneracy can be lifted, as for example, by stacking graphene with hexagonal boron nitride (hBN) and twisting properly the layers of the heterostructure leading to the appearance of an angle-dependent Moiré pattern. Such effect can break several symmetries and enhances collective interactions, providing the appearance of a plethora of exotic states of matter [1-9].

We have fabricated several hBN/graphene/hBN heterostructures where the relative rotation angle between the flakes has been controlled and released on a graphite back gate placed over standard SiO₂/Si substrates. We will present detailed local and non-local magneto-transport measurements at low-temperatures demonstrating the occurrence of exotic quantum edge states due to the angle-dependent Moiré pattern [10]. We will also present the capabilities of such heterostructures for THz detection [11]. Finally we will present preliminary measurements as evidence of unconventional photoresponse in other 2D heterostructures with broken symmetries.

Acknowledgment

We acknowledged financial support from the Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades of Spain and FEDER (European Regional Development Fund) under the Research Grants numbers PID2022-136285NB, PID2019-106820RB, PGC2018-094180-B-I00 and FEDER/Junta de Castilla y León Research Grant number SA121P20. AP-R acknowledges the financial support received from the Marie SkłodowskaCurie-COFUND -Horizon 2020-European Union within the framework of the USAL4Excellence program (grant agreement 101034371). D. V. acknowledges financial support from the Ministerio de Universidades (Spain) (PhD contract FPU19/04224), including funding from ERDF/FEDER. J. S.-S. acknowledges financial support³ from the Consejería de Educación, Junta de Castilla y León and ERDF/FEDER.

References

- [1] Cao, Y. et al. (2018), doi.org/10.1038/nature26154
- [2] Cao, Y. et al. (2018), doi.org/10.1038/nature26160
- [3] Cao, Y. et al. (2020), doi.org/10.1038/s41586-020-2260-6
- [4] Li, Y. et al. (2020), doi.org/10.1038/s42005-020-00495-y
- [5] Andrei, E.Y. et al. (2021), doi.org/10.1038/s41578-021-00284-1
- [6] Smoleński, T. et al. (2021), doi.org/10.1038/s41586-021-03590-4
- [7] Li, H. et al. (2021), doi.org/10.1038/s41586-021-03874-9
- [8] Zhou, H. et al. (2021), doi.org/10.1038/s41586-021-03926-0
- [9] Vaquero D. et al. (2023), doi.org/10.1038/s41467-023-35986-3
- [10] Salvador-Sánchez J. et al., doi.org/10.48550/arXiv.2206.04565
- [11] Delgado-Notario J. A. et al. (2021), doi.org/10.1515/nanoph-2021-0573

Mónica Soler Jaumá
*Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Ciencias Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile,
Santiago, Chile.*

Incorporation of Curcuminoid Ligands into different Materials

Development of novel ligands with optical properties and active sites for enhancing the sensing properties of materials has always been a challenge. The formation of nanostructures with these organic ligands can increase the sensitivity and selectivity of the resulting sensing platforms. Examples are reported of nanostructures formed by the combination of organic ligands with metal ions, resulting in crystalline materials such as Metal Organic Frameworks (MOF) or Coordination Polymers (PC). The ability to understand the interaction of the organic molecule with the metal ions or clusters, allows not only to comprehend the structural or functional properties of these molecular material, but also can be used to understand the selectivity or sensitivity during the sensing process.

Curcuminoid molecules (CCMoids) are conjugated organic ligands, which have been reported to behave as colorimetric and fluorometric chemosensors [1]. Their structure is composed of a conjugated carbon chain, with a central β -diketone group able to coordinate metal ions, and two terminal aromatic rings which can be designed with different donor or acceptor groups, changing their electronic properties. The first, and most well-known curcuminoid molecule, is the curcumin [2], which is a natural organic ligand, that exhibits inherent fluorescence. It has been reported as a standardized dye for the detection of boron in irrigation water, or when coordinated with a BF₂ group (CRANAD-1), it has been reported as a fluorometric probe for the detection in the Alzheimer Disease (AD). Several curcuminoid molecules have also been reported for the detection of other metal or organic molecules [3]. Some examples have also been reported of curcuminoid ligands as part of a CP [4], and only in the case of the ligand curcumin, a MOF has been reported for biomedical applications [5].

In our group we prepare different curcuminoid ligands, study their properties and try to incorporate them on materials, with the goal to prepare optical materials for detection studies. The preparation of the materials with curcuminoid ligands follow three different research lines: (i) CCMoid functionalization on different surfaces such as Si or cellulose to see how the anchoring to the surfaces can help on the properties of the hybrid material; (ii) CCMoid functionalization on nanoparticles, such as Au or SiO₂, to see the effect of the NP on the properties of the hybrid material; and (iii) consider the CCMoid molecules as building blocks for the preparation of PC or MOFs, to study its structure and possible active sites for sensing. Depending on the direction of the project, the structure of the curcuminoid molecule can be modified, incorporating a central chain for their functionalization on surfaces or incorporating terminal carboxylate groups to form different frameworks. In this work, will be presented the different research attempts to incorporate curcuminoid ligands on materials.

Acknowledgment

Proyecto FONDECYT Regular 1201962, Anillo ANID/ACT210059

References

- [1] Aznarez A. et al. (1983), doi.org/10.1039/AN9830800368
- [2] Hatcher H. et al. (2008), doi.org/10.1007/s00018-008-7452-4
- [3] Mahdiyeh Y. K. et al. (2019), doi.org/10.1016/j.msec.2019.109792
- [4] Rodríguez-Cid L. et al. (2021), doi.org/10.1039/d1dt00708d
- [5] Su H. et al. (2015), doi.org/10.1039/C4CC10159F

José Antonio Gárate
*Núcleo Milenio en
NanoBioFísica,
Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián*

Nanoconfinement: from nanotubes to biological channel

Nanoconfinement is the presence of small molecules within nanoscales cavities. In this talk we will explore the effects of nanoconfinement in synthetic and natural pores via molecular dynamics simulations. For the former we will show how narrow carbon nanotubes are able to load water and small alcohols due to entropic effects. For the latter, we will show how by just exploring the hydration profiles from the voltage sensors of the BK ion channel, one is able to predict the molecular determinants responsible for voltage sensing; finally we will show how relatively small changes in pore diameters of aquaporins due to changes in membrane tension can have macroscopic repercussions.

Mauricio Isaacs^{1,2,3}

¹Pontificia Universidad Católica de Chile.

Facultad de Química y de Farmacia.

Departamento de

Química Inorgánica.

Campus San Joaquín.

Vicuña Mackenna 4860

Macul. Santiago. Chile

²Millennium Institute on

green ammonia as

energy vector MIGA.

Campus San Joaquín.

Vicuña Mackenna 4860

Macul. Santiago. Chile.

³Centro de Investigación

en Nanotecnología y

Materiales Avanzados,

CIEN-UC. Campus San

Joaquín. Vicuña

Mackenna 4860 Macul.

Santiago. Chile.

Tandem electrocatalysis in electrochemical processes relevant to the environment and energy: Carbon Dioxide and Green Ammonia

The phenomenon of climate disruption that we are facing as a society has challenged us to understand how the world will function in the years to come.

One of these challenges is the use of renewable energy, which due to its intermittency forces us to store it either in devices such as batteries or chemical compounds, such as hydrogen, ammonia or synthetic fuels, this last strategy is also known as "power-to-x". All of the aforementioned electrochemical processes face both thermodynamic and kinetic challenges that can be addressed through electrocatalysis. In this context, tandem electrocatalysis is a phenomenon that includes more than one active center that allows breaking the linear scales of energy, thus improving the performance of the aboved described reactions.

Two cases are presented, the electrochemical reduction of CO₂, where copper nanocubes doped with Zn or Ag were used as electrocatalysts, which was effective in converting CO₂ selectively into 2-carbon chemical compounds.

In the second case, the electrochemical reduction of nitrogen, where transition metal chalcogenides were used, with special attention to Mo and Fe. These catalysts allowed the efficient production of ammonia from nitrogen, where the subsequent incorporation of ionic liquids increased the faradic efficiency of the systems studied.

Acknowledgments

The authors thank the support of FONDECYT program project # 1221179 and Millennium Institute on green ammonia as an energy vector MIGA # MIGA ICN2021_023

Marcelo Kogan
*Department of
Pharmacology and
Toxicology of the School
of Pharmacy at the
University of Chile.
Advanced Center for
Chronic Diseases. Chile*

From the nanomaterials fabrication to the development of strategies for therapy and diagnosis of chronic diseases

The advent of nanotechnology has radically changed the way we diagnose, image and treat diseases, with novel nanoplatforms capable clinically important functions, including detecting cancer at its earliest stages and location, as well as delivering therapeutics specifically to specific sites in the body.

The nanotechnology approach to chronic diseases has focused on three main avenues: early detection; imaging for diagnostics or assessment of targeted delivery. Also multifunctional therapeutics are of interest, whereby nanoplatforms are loaded with multiple functional moieties capable of selective targeting, imaging and delivery of specific drugs to malignant cells [1,2,3]. In relation with this is possible to mention the so called theranostics which consist in the diagnostic and treatment of pathologies in a unique procedure [4,5].

In the talk will be discussed the fabrication of nanomaterials of different compositions (gold, magnetic, liposomes, cyclodextrins, silica, proteins, etc) for drug delivery, diagnostic, therapy and theranostics of cancer [1], cardiovascular [6] and Alzheimer's diseases [4]. For the preparation of the nanoplatforms different methodologies as 3D impression have been used [7]. To evaluate efficacy and safety, in vitro systems as microfluidics [8] and Blood Brain Barrier on a chip [9] and in vivo assays have been assayed. Will be discussed the steps to reach the clinical applications of the developed nanomaterials.

Acknowledgment

Projects Fondecyt 1211482, FONDAP 15130011, ACT210068

References

- [1] Salas-Huneleu E. et al. (2022), doi.org/10.3390/pharmaceutics14050958
- [2] Zare I. et al. (2022), doi.org/10.1039/D1CS01111A
- [3] Cabrera P. et al. (2022), doi.org/10.1016/j.nano.2022.102569
- [4] Morales-Zavala F. et al. (2021), doi.org/10.1039/D0BM01825B
- [5] Lara P. et al. (2020), doi.org/10.1186/s12951-020-0573-0
- [6] Bejerano J. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.jconrel.2020.11.002
- [7] Real J. P. et al. (2023), doi.org/10.3390/pharmaceutics15051387
- [8] Orellana N. et al. (2021), doi.org/10.1039/D1NR03179A

[9] Palma-Flores S. et al. (2023), doi.org/10.1186/s12951-023-01798-2

Fernando Lund
*Departamento de Física,
Facultad de Ciencias
Físicas y Matemáticas,
Universidad de Chile*

On the structure of glasses at the nanoscale: implications for mechanical properties and thermal transport

It is well known that glasses lack long range translational order but that they do have short range order. Over several decades evidence has accumulated that points to the existence of coherent structures at the nm scale, i.e. medium range order, for many, if not all, glasses. The broad features of said structures do not depend on external parameters such as temperature, density, pressure, and chemical or thermal history. That is, they are “universal”.

A model is proposed to account for the behavior of these medium range structures. To take into account their universality, continuum mechanics is used as a theoretical framework, and a glass is described as a Debye solid endowed with many randomly oriented elastic strings or, more precisely, Volterra dislocations. The normal modes of these strings account, in general, for the excess of normal modes over the Debye density of states observed in glasses, as well as for the specific inelastic X-ray scattering data of glycerol and silica in the 2-14 meV range. The atomic motion associated with the string dynamics is consistent with the soft modes recently identified in large-scale numerical simulations of non-phonon modes in Lennard-Jones glass.

Speculations will be offered as to the role played by the elastic strings in the thermal transport, as well as other, properties of glasses.

Acknowledgment

This work has been carried in collaboration with E. Bianchi, D. Churochkin, V. Giordano, G. Gutierrez, M. Sepúlveda-Macías and B. Scheining-Hltschfeld. The support of Fondecyt Grant 1230938 is gratefully acknowledged

References

- [1] Bianchi E. et al. (2020), doi.org/10.1103/PhysRevB.101.174311
- [2] Lund F. et al. (2020), doi.org/10.3390/nano10091711

Tópico T1: Síntesis y caracterización de materiales nanoestructurados

Juan Escrig
*Departamento de Física,
Universidad de Santiago
de Chile; Centro para el
Desarrollo de la
Nanociencia y
Nanotecnología
(CEDENNA)*

Innovative nanostructure synthesis for antimicrobial applications: Combining electrospinning, electrospraying and atomic layer deposition techniques

Various research groups are exploring novel approaches to combat microorganisms using nanomaterials. Nanoparticles possess a small size and large surface area, which enables them to establish close contact with cell walls and catalyze chemical reactions that disrupt cellular function. For instance, under ultraviolet light exposure, titanium dioxide nanoparticles can generate reactive oxygen species that oxidize the lipids and proteins of the cell membrane. Consequently, nanomaterials are being investigated as bactericidal coatings for hospital surfaces and food processing equipment worldwide.

The search and synthesis of new antimicrobial nanostructures are vital in mitigating the incidence of infectious diseases and the crisis of antibiotic resistance, two pressing issues in global public health. In this presentation, we will introduce an innovative strategy that combines the electrospinning and electrospraying techniques with atomic layer deposition to develop controlled and homogeneous hollow nanospheres and nanotubes of different materials, such as TiO_2 [1-3], ZnO [3,4], Ni [5], and Fe_3O_4 [6]. We will also evaluate the antimicrobial properties of these nanostructures against various bacteria, including resistant strains of *E. coli* and *S. aureus*. We aim to demonstrate that the combination of these techniques holds great promise in creating novel antimicrobial materials.

Acknowledgments

The authors acknowledge financial support by Fondecyt 1200302 and Financiamiento Basal para Centros Científicos y Tecnológicos AFB220001.

References

- [1] López de Dicastillo C. et al. (2018), doi.org/10.3390/nano8020128
- [2] López de Dicastillo C. et al. (2019), doi.org/10.3762/bjnano.10.167
- [3] Guerrero M. et al. (2020), doi.org/10.3762/bjnano.11.129
- [4] López de Dicastillo C. et al. (2020), doi.org/10.3390/nano10030503
- [5] Pereira A. et al. (2018), doi.org/10.1116/1.5058706
- [6] Márquez P. et al. (2022), doi.org/10.3390/nano12183180

Maximiliano Andrés Díaz
Herrera

*Departamento de
Ciencias Farmacéuticas,
Universidad Católica del
Norte, Antofagasta*

Sandra Fuentes
Villalobos

*Departamento de
Ciencias Farmacéuticas,
Universidad Católica del
Norte, Antofagasta /
Center for the
Development of
Nanoscience and
Nanotechnology,
CEDENNA, Santiago,
Chile*

Evaluación de estabilidad coloidal de nanopartículas de Ferrita de Bismuto recubiertas por polietilenglicol funcionalizado

La introducción de nuevos nanomateriales en distintas áreas de la ciencia y tecnología han otorgado una serie de nuevas soluciones a problemáticas actuales, siendo una de ellas el uso de distintos nanomateriales en el diagnóstico de enfermedades oncológicas [1]. Estos nanomateriales tienen propiedades físicas y químicas particulares, las cuales junto con su tamaño pueden ser aprovechados para distintos usos en el campo de la nanomedicina [2].

Las nanopartículas de ferrita de bismuto (BFO-NP) han surgido como un nuevo nanomaterial con propiedades magnéticas y eléctricas, siendo de gran interés en ciencias aplicadas [3]. La aplicación de estas NPs en biomedicina es a través de la formación de suspensiones coloidales las cuales deben cumplir con cierta estabilidad, medida a través del tamaño hidrodinámico y la potencial zeta [4]. El uso de polímeros como recubrimiento ha demostrado ser beneficioso en mejorar parámetros de estabilidad y citotoxicidad en distintas nanopartículas, otorgándoles menor tasa de eliminación por parte del organismo y aumento de la vida media de ellos [5]. En la industria farmacéutica, el polietilenglicol es uno de los polímeros más utilizados para recubrimiento y funcionalización, debido a que favorece la farmacocinética de diversos fármacos, siendo una buena alternativa para el recubrimiento de NPs de BFO [5].

En este trabajo se presentarán los resultados obtenidos del estudio de estabilidad de las suspensiones coloidales de NPs de BFO dopadas con tierras raras (Sm^{+3} , Gd^{+3}) recubiertas con PEG funcionalizado en soluciones amortiguadoras a distintos pH (3-7). Las NPS de BFO dopadas y recubiertas fueron caracterizadas mediante las técnicas de difracción de rayos X (DRX), Espectrofotometría infrarrojo y Microscopio electrónico de transmisión de barrido (STEM). Además, se propone un método de dispersión de las NPS en solución acuosa utilizando ondas de ultrasonido. Las dispersiones obtenidas se estudiaron a través del análisis del tamaño hidrodinámico y potencial zeta para determinar su estabilidad coloidal. Las cuales dieron como resultado para NPS de BFO dopadas $\{\text{Sm}^{+3}$, $\text{Gd}^{+3}\}$ recubiertas con PEG 2000 en promedio un potencial zeta de -24 mV en medio buffer salino a un pH 6 correspondiendo a una naturaleza inestable [4].

Agradecimientos

Proyecto Fondecyt regular 1190721 y AFB220001 (CEDENNA).

Referencias

- [1] Kim BYS et al. (2010), doi.org/10.1056/NEJMra0912273
- [2] Pope-Harman A. et al. (2007), doi.org/10.1016/j.mcna.2007.05.008
- [3] Wu J. et al. (2016), doi.org/10.1016/j.pmatsci.2016.09.001
- [4] Merkus HG. (2014), doi.org/10.1007/978-3-319-00714-4_2
- [5] Kolate A et al. (2014) , doi.org/10.1016/j.jconrel.2014.06.046

Arturo Fernández Pérez
Universidad del Bío-Bío

Gerardo Cabello
Guzmán
Universidad del Bío-Bío

Cristian Navarrete
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Modificación de los parámetros de juntura de un diodo Schottky de película delgada Ag/CdS mediante dopaje con Al

En este trabajo se investiga el efecto del dopaje con Al en los parámetros de juntura de diodos Schottky de película delgada de Ag/CdS:Al y su respuesta eléctrica a la irradiación de microondas. Mediante deposición por baño químico, se prepararon películas delgadas nanocristalinas de CdS:Al con espesores comprendidos entre 109 y 173 nm mediante deposición en baño químico y, posteriormente, se hicieron crecer sobre ellas películas de Ag con un espesor medio de 102 nm mediante pulverización catódica. Las propiedades estructurales, químicas, morfológicas y ópticas de las películas de CdS:Al y Ag se caracterizaron mediante difracción de rayos X (DRX), microscopio electrónico de barrido, microscopio de fuerza atómica, espectroscopia de dispersión de energía de rayos X y espectrofotómetro UV-Vis, respectivamente. Los estudios de DRX muestran que las películas delgadas de CdS:Al y Ag tienen una estructura hexagonal y cúbica, respectivamente. El tamaño de los cristalitas disminuye con el contenido de Al en las películas de CdS:Al, encontrándose en el rango de 15-40 nm. Se observa una disminución en la intensidad del pico principal de DRX de las películas CdS:Al, causada por la inclusión de Al₂O₃ amorfo en la película CdS. También se obtuvieron las características corriente-voltaje (I-V) de diodos Ag/CdS:Al, con diferentes contenidos de Al. Basándose en las características I-V de los diodos, se calcularon su altura de barrera Φ_0 , el factor de idealidad n , y la resistencia en serie R_s , y se encontró que estos valores se modifican al aumentar el contenido de Al en las películas de CdS, en los rangos: Φ_0 : 0,7037-0,8426 eV; n : 3,485-4,213; R_s : 0,54-9,86 M Ω . Por último, se estudiaron las características I-V de los diodos Ag/CdS:Al bajo irradiación de microondas de banda X a temperatura ambiente en condiciones de oscuridad. Para un valor específico de dopaje de Al, se observó que la densidad de corriente a través del diodo durante la irradiación era inferior (0,87-11,6 mA/cm²) a la del diodo sin irradiar (1,14-15,6 mA/cm²), cuando la tensión de polarización era superior a un valor determinado (3 V). Este último resultado podría ser útil en un potencial sensor de microondas de película delgada en banda X.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo financiero de la Universidad del Bío-Bío, a través del proyecto DICREA 2220223 IF_R.

Referencias

- [1] Tomakin M. et al. (2011), doi.org/10.1016/j.physb.2011.08.067
- [2] Fernández-Perez A. et al. (2021), doi.org/10.1088/2053-1591/abdc51
- [3] Khan M. J. (2019), doi.org/10.1088/2053-1591/aaf5a8

Copper oxide films as resistive gas sensors

Leonardo Vergara Reyes

*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Ricardo Henriquez

*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Rodrigo Segura

*Universidad de
Valparaíso*

Sensors can be understood as devices that help human beings to expand their reality-sensing capabilities. Specifically, they collect stimulus or variations in the environment, and transduce them in electrical signals [1]. Among them, gas sensors have shown increasing interest due to wide use for environmental safety and healthcare applications. For example, a gas sensor based on CuO nanowire is proposed to detect volatile organic compounds in the person's breath with lung cancer [2]. For this reason, improvements in the understanding of its performance can directly impact people's daily lives. Copper thin films 20 nm thick were evaporated in high vacuum system on mica substrates. Once fabricated, the samples were oxidized by three hours at different temperatures (RT, 100, 200 and 300 °C) and at room conditions. Raman spectroscopy and UV-Vis spectrometry were performed in all samples. The characteristic Raman shift peaks corresponding to Cu₂O (110, 150 and 220 cm⁻¹) appear clearly in samples oxidized at RT and 100 °C; they can be weakly identified in those oxidized at 200 °C; and they disappear in the films oxidized at 300 °C. On the other hand, the characteristic peak corresponding to CuO (296 cm⁻¹) does not appear in samples oxidized at RT and 100 °C; it can be identified in those oxidized at 200 °C; and it clearly appear in the films oxidized at 300 °C. The UV-Vis spectra show an absorption peak in 310 nm approximately, for all samples. Also, the samples oxidized at RT and 100 °C present an edge in 580 nm approximately. The spectra were transformed using the Kubelka-Munk function as a function of the photon energy to determine the bandgap. The values decrease from 1.97 to 1.78 as the oxidation temperature increases. The value found for the films oxidized at 300 °C is similar to others reported for CuO nanostructured samples [3]. The electrical characterization of the samples was performed, determining the temperature dependence of the electrical resistance (between 300 and 390 K). The resistance behavior shows a change in the electrical transport mechanism depending on the oxidation temperature. The temperature dependence changes from a metallic type in samples oxidized at RT (positive slope) and 100 °C (slightly positive slope), to a semiconductor type in samples oxidized at 200 °C (negative slope, with an activation energy of 380 meV) and 300 °C (negative slope, with an activation energy of 467 meV). The analysis based on these three characterization techniques show that for oxidation temperatures of 100°C and RT, the samples are mainly composed by a Cu₂O layer on the Cu film, whereas for 200 °C and 300 °C, the CuO is the main constituent of the film. Finally, the performance of the samples as a gas sensor was tested, measuring the electrical resistance of the films in presence of ethanol gas at low pressure (from 10⁻³ to 10³ Pa). The resistance of samples oxidized at RT and 100°C present a slight increase of 2% approximately as the pressure rises. For an oxidation temperature of 200°C, the film resistance presents a decrease between 10⁻² and 100 Pa of up to 20%; while an increase appears between 101 and 103 Pa reaching changes of up to 30%. Finally, the sample oxidized at 300 °C, present a resistance

decrease between 10^{-2} and 100 Pa of up to 40%; while a slight increase appears between 101 and 10^3 Pa reaching changes of up to 5%. Results show that this last sample is the most sensitivity to the presence of the ethanol gas at low pressure.

Acknowledgments

Becas internas para Magister Científico-Tecnológicos, USM. Becas Programa de Incentivos a la Iniciación Científica (PIIC), USM. Proyectos Fondecyt 1231849. Proyectos Fondecyt 1181905. Fondequip EQM190179, Rodrigo Segura (equipo: ESEM Quattro S, ThermoFisher Scientific).

References

- [1] Ming-Shui Yao, et al., doi.org/10.3389/fchem.2021.608327
- [2] Saraswati Kulkarni (2021), doi.org/10.1016/j.snb.2021.129701
- [3] Muhammad Arif Khan, et al. (2020), doi.org/10.3390/nano10071298

Jorge Eduardo Sánchez
Mella

*Universidad Tecnológica
Metropolitana*

María Alejandra
Tamayo Medina

Universidad de Chile

Humberto Cristian
Palza Cordero

Universidad de Chile

Diseño de aerogeles de grafeno producidos por síntesis hidrotérmal mediante la teoría DLVO

Los aerogeles de grafeno han atraído enorme interés debido a sus propiedades sobresalientes promovidas por la organización de las nanoláminas tridimensionalmente. Comúnmente se sintetizan por el método sol-gel en condiciones hidrotérmicas, comenzando con la síntesis del precursor óxido de grafito (OGr), utilizando ácidos y oxidantes fuertes, para introducir grupos funcionales oxigenados en los bordes y el plano basal del grafeno apilado. Luego, el OGr es exfoliado en solución acuosa para formar una dispersión de nanoláminas de grafeno oxidado (GO), esto gracias a la polarización negativa de los grupos funcionales causando su mutua repulsión. Esta se introduce en un reactor hidrotérmal por un cierto tiempo para conseguir un hidrogel, el cuál es congelado y liofilizado para obtener el aerogel. Se ha teorizado que la repulsión electrostática inicial del GO disminuye producto de la remoción de los grupos funcionales y restitución parcial de la estructura conjugada durante la reducción hidrotérmal(rGO). Estos procesos también favorecen su apilamiento por interacciones π - π o hidrofóbicas, lo que induciría su entrecruzamiento para formar la red tridimensional porosa [1, 2]. Se ha demostrado que la carga superficial del GO/rGO depende fuertemente del pH polarizando sus grupos funcionales oxigenados y modulando a través de la fuerza iónica su apantallamiento, controlando la formación de los hidrogeles [1–3]. Se ha propuesto que estas interacciones hidrofóbicas y de repulsión electrostática pueden analizarse mediante la teoría DLVO para predecir la estabilidad de dispersiones de GO/rGO a distintos pH y fuerzas iónicas [3]. Tomando en cuenta estos antecedentes, además de parámetros cinéticos de reducción [4] y fisicoquímicos del ambiente hidrotérmal [5], el objetivo de este trabajo es utilizar la teoría DLVO para evaluar los cambios en los potenciales de interacción que sufre dos láminas de GO paralelas a medida que estas se reducen en condiciones hidrotérmicas bajo distintas condiciones de pH y fuerza iónica. Se encontró que a todos los pH's y fuerzas iónicas las láminas tienen una barrera de potencial que disminuye mientras el proceso de reducción se completa, aumenta con el pH y disminuye con el aumento de la fuerza iónica para todos los grados de reducción. Estos resultados fueron validados experimentalmente estudiando diferentes barreras de potencial, observándose morfologías irregulares de los aerogeles a bajos y altos potenciales. De esta manera, se encontró un rango de barrera de potencial en función del aumento del grado de reducción donde los hidrogeles se forman apropiadamente, asociándose a distintas condiciones de pH y fuerza iónica. Específicamente, a medida que el pH aumenta es necesario que la fuerza iónica sea mayor para que la barrera de potencia se encuentre en la banda. Esto permite por primera vez asociar un modelo numérico al proceso de formación propuesto de los hidrogeles hidrotérmicos, relacionándolo variables de síntesis

claves.

Agradecimientos

Agradecimiento al FONDECYT REGULAR 1200093.

Referencias

- [1] Gudarzi M. et al. (2016), doi.org/10.1021/acs.langmuir.6b01012
- [2] Huang M. et al. (2019), doi.org/10.1016/j.diamond.2019.02.023
- [3] Sasikala S. et al. (2017), doi.org/10.1002/adma.201605473
- [4] Wasalathilake K. C et al. (2018), doi.org/10.1016/j.carbon.2018.05.036
- [5] Wojcik M. et al. (2017), doi.org/10.1021/jacs.7b00474

Absorption of H₂ and CO₂ in graphene oxide-based semiconductor systems for photocatalytic purposes

José Fernández Adell
Alejandro Cabrera
Donovan Díaz
Droguett
*Instituto de Física,
Facultad de Física,
Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago 7820436, Chile*

Gas absorption is a fundamental aspect in the photocatalytic reactions of pollutant gases. Photocatalysis offers a sustainable and environmentally friendly approach to address various challenges, such as air pollution, greenhouse gas emissions, and the synthesis of valuable chemical products. This investigation synthesizes and characterizes a heterostructure system based on graphene oxides (GO) to enhance its gas absorption capacity and, thus, its photocatalytic performance. This system was chosen based on previous studies confirming the use of GO in improving photocatalytic performance by using it as a support for photocatalysts [1].

The methodology adopted in this study was divided into three distinct stages: compound synthesis, characterization, and absorption studies. In the first stage, five samples with different degrees of GO oxidation (GO1-GO5) were synthesized using the Hummers method [2]. To decorate the GO, copper ferrites CuFeO₂ and CuFe₂O₄ were used, which were synthesized through hydrothermal methods for 12 hours at 180 °C using copper and iron nitrates as precursors and including the previously synthesized GO in the solution [3].

In the second stage, characterizations were performed using microscopy techniques (SEM), spectroscopy (UV-VIS and XPS), and elemental analysis (EDS). The objective was to establish the relationship between the proportions of GO and copper ferrites with their respective absorption capacities. Finally, the obtained systems will undergo absorption studies using a quartz microbalance to quantify the weight percentage absorbed by the different samples.

XPS analyses of the GO samples revealed oxidation degrees (O/C) ranging from 0.6 to 0.71. Furthermore, the absorption capacities reached maximum values of 1.30 wt% and 1.67 wt% for H₂ and CO₂, respectively. These maximum absorption values correlate with the degree of oxidation, obtaining higher values as the GO oxidation increases.

The obtained contribute to identify the absorption capacities of GO for provide a comparative reference in the current study of copper ferrite systems.

Acknowledgments

Agradezco a la Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID) por financiar mi programa de postgrado.

References

- [1] Li C. et al. (2019), doi.org/10.1039/c9ew00499h
- [2] Hummers W. et al. (1958), doi.org/10.1021/ja01539a017
- [3] Wang J. et al. (2017), doi.org/10.1038/s41598-017-09214-0

Synthesis of compositionally modulated FAPbI₃ films by dual-source thermal evaporation

Felipe Hernán Barría
Cáceres
*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Cristóbal Gaete
*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Felipe A. Angel
*Centro de
Nanotecnología y
Materiales Avanzados,
CIEN-UC, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile*

Organic-inorganic halide perovskite photovoltaics have witnessed an unprecedented increase in their photoconversion efficiencies, achieving levels comparable to conventional silicon solar cells in just fourteen years of research [1]. While significant efforts have been dedicated to enhancing the long-term stability of these devices, there is still ample room for improvement in the fundamental aspects of charge extraction, particularly at the interface. One promising approach in this regard is the implementation of graded junctions, specifically the utilization of perovskite-perovskite homojunctions, which can enhance charge extraction at the interface. These homojunctions leverage the self-compositional doping of perovskite materials [2], incorporating both n-doped and p-doped films. A suitable technique for depositing these junctions is vacuum thermal evaporation, which enables the deposition of films with subtle stoichiometric variations without solvents. However, the development of deposition methods for these types of junctions is not well-established, primarily due to the challenges associated with controlling the evaporation of organic precursors [3]. In our research, we have successfully developed a reproducible methodology for synthesizing compositionally modulated perovskite films using a dual deposition of organic and inorganic precursors, forming FAPbI₃-based perovskite materials. To characterize these films, we employed complementary techniques such as Energy-Dispersive X-ray Spectroscopy (EDS), X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS), and Glow Discharge Optical Emission Spectroscopy (GDOES). The combination of our deposition technique and comprehensive spectroscopic analysis provides valuable insights into the composition and properties of the resulting films. By employing this novel methodology, we aim to advance in the development of new processing methods for the synthesis of compositionally doped perovskite films and paving the way for their potential applications to fabricate solar cells that includes perovskite-perovskite homojunctions that enhances charge extraction at the interface.

Acknowledgments

Supported by BECA DOCTORADO NACIONAL 21201303 ANID and FONDECYT N°11181205.

References

- [1] NREL (2023) <https://www.nrel.gov/pv/assets/pdfs/best-research-cell-efficiencies.pdf>
- [2] Paul, G. et al. (2018), doi.org/10.1021/acs.jpcc.8b06968
- [3] Bhandari et al. (2018), doi.org/10.1016/B978-0-12-811479-7.00011-7

Juan Chiappe
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

Máscaras de oro para nanoestructurado de vidrio

Los vidrios tienen una variedad de uso en sistemas ópticos y optoelectrónicos, y el nanoestructurado del vidrio presenta la posibilidad de aumentar la transmitancia óptica y obtener características autolimpiantes, lo cual es favorable para estas aplicaciones. El uso de máscaras de nanopartículas de metal permite modificar la superficie del vidrio para mejorar estas propiedades [1, 2]. En esta investigación se buscó fabricar muestras de vidrio nanoestructurado con características autolimpiantes, específicamente hidrofóbicas. Para lograr esto, se depositó una lámina delgada de oro sobre vidrio limpio mediante sputtering, se recoció la muestra para generar nanopartículas de oro sobre su superficie y se utilizó esta capa como máscara para grabar el patrón de las nanopartículas a través de Reactive Ion Etching. Luego, se removió la máscara de oro para obtener muestras de vidrio nanoestructurado, las cuales se caracterizaron midiendo el ángulo de contacto con agua en un goniómetro. Durante la investigación, se logró generar máscaras de Au con un dewetting incompleto y se caracterizaron sus propiedades de mojabilidad, transmitancia óptica y morfología. Las películas depositadas eran de 20 nm de Au y se hornearon a 300, 400 y 500 °C, observándose agujeros en las muestras de 300 °C y estructuras fractales en las muestras de 500 °C. Sin embargo, las máscaras generadas mostraron variaciones que aún no se ha determinado si son significativas para la creación de vidrios hidrofóbicos. Además, se determinó que aún se necesita ajustar los parámetros utilizados para obtener vidrios con las características deseadas de manera consistente. Finalmente, se utilizó una de las máscaras para generar una muestra de vidrio nanoestructurado, la cual presentó un ángulo de contacto mayor que un vidrio sin nanoestructurar.

Agradecimientos

Se agradece el apoyo de los proyectos ANID-Fondecyt 1210490; ANID-ECOS210038-C21E08; ANID-FONDAP-1522A0006 and ANID - Millennium Science Initiative Program - NNBP # NCN2021_021.

Referencias

- [1] J. Son et al. (2012), doi.org/10.1016/j.solmat.2011.10.011
- [2] J. W. Leem et al. (2012), doi.org/10.1364/OE.20.004056

Síntesis y evaluación de nanoemulsiones cargadas con cannabidiol (CBD) sobre la viabilidad de células de carcinoma mamario y de células no neoplásicas caninas

Francisca Medina
*Doctorado en Ciencias
Silvoagropecuarias y
Veterinarias, Universidad
de Chile*

Cristian Torres
*Profesor Asistente
Facultad de Ciencias
Veterinarias y Pecuarias,
Universidad de Chile*

Felipe Oyarzun
Ampuero
*Profesor Asociado
Facultad de Ciencias
Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile*

Diversos estudios han mostrado que los cannabinoides como el cannabidiol (CBD) pueden inhibir la proliferación de ciertas líneas celulares de cáncer, como las de carcinoma mamario humano, mediante la su interacción con distintos receptores como, los receptores cannabinoides CB1 y CB2, los receptores 5HT1A, PPARs, GPR55 y TRPV1-4 [1]. Sin embargo, su aplicación clínica se ha visto obstaculizada debido su alta lipófila, inestabilidad tras la exposición a la luz y/o al oxígeno, y mala absorción por los tejidos [2]. Una alternativa que podría mejorar la compatibilidad acuosa es su incorporación en nanoemulsiones del tipo aceite en agua (O/W), haciendo que las moléculas lipofílicas sean solubles en el núcleo de aceite estabilizado mediante tensioactivos, aumentando su dispersibilidad en el medio acuoso [3]. El objetivo de este estudio fue desarrollar nanoemulsiones O/W que contuvieran CBD (CBD-NEM), mediante un método de baja energía (desplazamiento por solvente) para evaluar su seguridad y eficacia como antineoplásico en una línea de carcinoma mamario canino. Para la caracterización fisicoquímica de nanoemulsiones, el diámetro hidrodinámico, potencial zeta y el índice de polidispersión de las formulaciones se determinaron mediante dispersión dinámica de la luz (DLS) utilizando un ZetaSizer NanoZS (Malvern Instruments). La seguridad y eficacia de las nanoemulsiones se analizó en ensayos de viabilidad celular mediante la metodología de reducción de MTS, en una línea de carcinoma mamario canino (CF41.Mg) y en una línea de epitelio tubular renal canino (MDCK) respectivamente. Se obtuvieron nanoportadores en el rango de 146 - 154 nm, presentando un PDI bajo que oscila entre 0,13-0,17, con un potencial zeta negativo (-49 a -53 mV). CBD-NEM indujeron una disminución no selectiva en la viabilidad de células neoplásicas, no obstante, este efecto fue de menor intensidad al gatillado por CBD disuelto en etanol. Este es el primer estudio en analizar este tipo de nanoemulsiones sobre una línea celular de carcinoma mamario, lo que sustenta las bases de futuros estudios mecanísticos y ensayos clínicos con la formulación obtenida.

Referencias

- [1] Afrin, F et al. (2020), doi.org/10.3390/cancers12041033
- [2] Millar, S et al. (2020), doi.org/10.3390/ph13090219
- [3] Anuar, N et al. (2020), doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e04570

Matías Arenas Manríquez
Universidad Técnica
Federico Santa María

Síntesis de aleación multicomponente TiNbTaZrSn nanocrystalina mediante aleado mecánico de alta energía

Las aleaciones de alta entropía han llamado profundamente la atención del mundo académico desde su descubrimiento forma simultánea por Cantor y Yeh en el año 2004 [1][2]. Estas aleaciones se componen de al menos 5 elementos con concentraciones equimolares o cercanas a esta. Debido a la estabilización de formación de soluciones sólidas y las diferentes estructuras cristalinas que se pueden formar, generan estructuras altamente distorsionadas y con excelentes propiedades mecánicas.

Aleaciones de alta entropía base titanio, aleadas con diversos elementos con características biocompatibles como Nb, Zr, Ta, Mn, Co o Sn, se presentan como una alternativa de investigación para la síntesis de nuevas aleaciones con fines en aplicaciones biomédicas. La síntesis de estas aleaciones se puede alcanzar mediante el uso de aleado mecánico, logrando estabilizar fases metaestables como lo son el titanio y de estructura FCC [3]. Diversos estudios han logrado estabilizar esta fase en sistemas TiTa, TiTaSn, TiNbMn, TiNbTa y TiZr [4, 5]. Se reporta que la formación de esta fase se debe a la minimización de la energía libre cuando los tamaños de partícula se encuentran en un rango nanométrico, así como también cuando los polvos se someten a una deformación plástica severa, como ocurre en el aleado mecánico.

En el presente trabajo se muestra la síntesis y caracterización en la formación de una solución sólida de estructura cristalina FCC de la aleación 40Ti30Nb10Ta10Zr10Sn (%at) mediante aleado de 30 [h] de molienda en atmósfera inerte. Se caracterizó a través del análisis de perfiles de difracción de rayos X y refinamiento Rietveld con el software MAUD. Con los datos obtenidos, se cuantificó la estructura cristalina FCC base Ti, con un parámetro de red de 0.436 [nm], un tamaño de cristalita de 4.6 [nm] y un valor de cuadrado medio de microdeformaciones ($\langle \epsilon_2 \rangle^{1/2}$) de 3.07E-2. Mediante microscopía electrónica de barrido (SEM – EDS) se verificó la homogenización de los elementos que componen la aleación, confirmado la formación de una única solución sólida de estructura FCC.

Referencias

- [1] B. Cantor et al. (2004), doi.org/10.1016/j.msea.2003.10.257
- [2] B. J. Yeh et al. (2004), doi.org/10.1002/adem.200300567
- [3] I. Manna et al. (2003), doi.org/10.1063/1.1530718
- [4] C. Aguilar et al. (2019), doi.org/10.1007/s11661-019-05152-w
- [5] E. Chicardi et al. (2018), doi.org/10.1016/j.matdes.2018.02.042

Study of nanostructured lipid carriers and key variables through combinations of surfactants to modify the hydrophilic-hydrophobic balance

José Ignacio Ibarra
*Drug Delivery Laboratory,
Departamento de
Ciencias y Tecnología
Farmacéuticas,
Universidad de Chile*

Diego Ignacio Silva
*Advanced Center for
Chronic Diseases
(ACCDiS)*

Javier Octavio Morales
*Center of New Drugs for
Hypertension (CENDHY)*

Nanostructured Lipid Carriers (NLC), composed of pegylated medium-chain triglycerides such as Gelucire 44/14, have shown great potential for the transport of hydrophobic molecules due to their high loading capacity and low toxicity [1]. The use of nanoparticles for the administration of molecules through the buccal mucosa has been reported, where sizes around 200 nm have been found to achieve good permeation through the buccal mucosa [2].

In this study, we explored the optimization of nanostructured lipid carriers (NLC) using different surfactants to investigate the behavior of size and polydispersity index (PDI) by modifying the hydrophilic-hydrophobic balance (HLB). We employed a low-energy emulsification technique based on Ortiz. A [3], and five NLC systems were synthesized using different combinations of predominantly non-ionic surfactants with varying HLB values, such as Tween 80 and Span 80. Additionally, oleic acid was used as an ionic surfactant. The particle size, PDI and zeta potential (ZP) of the obtained NLC systems were evaluated. Subsequently, each NLC was loaded with 0.5% w/w curcumin, and the encapsulation efficiency (EE%) and drug loading were measured through ultracentrifugation and spectrophotometry at a wavelength of 419 nm after separating the curcumin using 5 kDa Amicon tubes.

The results revealed that the NLC systems formulated without curcumin exhibited a hydrodynamic diameter ranging from 270 to 158 nm, a PDI close to 0.1, and a ZP between -4 and -12 mV. Furthermore, loading curcumin into NLC showed an increasing trend in the hydrodynamic diameter, ranging from 11.74 to 37.14 nm depending on the surfactant used. The absorbance results indicated the absence of curcumin in the supernatant and thus a 100% encapsulation of curcumin in the different NLC formulations. This leads us to conclude that NLC systems offer great potential for developing formulations for hydrophobic molecules, and the observed size values hold promise for buccal mucosa permeation and the treatment of diverse pathologies.

Acknowledgments

This work was funded by Regular FONDECYT Project 1231154, ANID/PIA/ACT192144, FONDAP Project 15130011, all granted by Chilean National Agency for Research and Development (ANID).

References

- [1] Subramaniam et al. (2020), doi.org/10.1007/s11051-020-04848-0.
- [2] Teubl BJ. et al. (2015), doi.org/10.3109/17435390.2014.921343.
- [3] Ortiz AC. et al. (2021), doi.org/10.3390/pharmaceutics13040531.

Felipe Olivares Abarca

*Estudiante Magister de
Ciencia de la Ingeniería*

Nataly Silva

Doctora en Química

Ignacio Gonzalez-Solís

*Estudiante Magister de
Ciencia de la Ingeniería*

Síntesis y caracterización de glico nanopartículas metálicas in situ en papel filtro con potenciales aplicaciones en remediación de contaminantes en matrices acuosas

Las nanopartículas metálicas (NPM) han tomado gran relevancia en diferentes aplicaciones, como en remediación ambiental, medicina, el envasado de alimentos y catálisis, por nombrar algunas. Destacando las nanopartículas de cobre (NPCu) plata (NPAg) y oro (NPAu) debido a que además de ser biocompatibles presentan atractivas propiedades intrínsecas a su tamaño y gran relación área superficie/volumen lo que incrementa la reactividad y capacidad de adsorción. Adicionalmente, presentan excelentes propiedades catalíticas, ópticas y antimicrobianas [1].

La síntesis in situ de NPM en sustratos sólidos atrae cada vez más interés en términos de desafíos sintéticos y aplicaciones prácticas, como por ejemplo en dispositivos de detección o en membranas de filtración [1]. En este contexto, los materiales glucosídicos como la celulosa y ciclodextrina (CD) sirven como agentes estabilizantes y reductores verdes en la síntesis de NPM.

Cabe destacar el uso de celulosa en formato de papel como sustrato para la síntesis de NPM debido a que es un material que presenta diversas ventajas asociadas a su alta porosidad, versatilidad de formatos y aplicaciones, así como también a su precio económico.

Por otro lado, las CDs son oligosacáridos cíclicos no tóxicos que constan de seis (α -CD), siete (β -CD) u ocho (γ -CD) unidades de glucopiranosas. En medio básico las CDs promueven la reducción de los precursores metálicos y producto de sus diversos grupos hidroxilos externos y su tamaño, permiten la estabilización de las NPM formadas. Cabe considerar que producto de su forma de cono truncado desde el año 1952, las CDs han sido fuertemente estudiadas por su capacidad para incluir múltiples moléculas en función del tamaño de la cavidad [4], resaltando su uso en remediación medioambiental.

Este estudio tiene como objetivo generar glico nanopartículas metálicas in situ sobre papel filtro. Para ello, se utilizaron sales de cobre, plata y oro como agentes precursores, una solución de β -CD en medio básico como agente reductor y estabilizante y papel filtro como sustrato y agente estabilizante en la síntesis de las NPM. Los sistemas ternarios papel/ β -CD/NPM fueron caracterizados mediante espectroscopía UV-Vis, determinando la banda del plasmon superficial en 525 nm, 400 nm y 375nm, para las NPAu, NPAg y NPCu, respectivamente. Adicionalmente, los sistemas fueron caracterizados mediante SEM, FTIR,

DRX, entre otras mediciones.

Los resultados de esta investigación describen por primera vez la generación del sistema ternario conformado entre papel/CD/NPM, y ofrecen potenciales aplicaciones como sistemas de remediación de matrices acuosas contaminadas.

Agradecimientos

Agradecimientos al Proyecto Fondecyt de Iniciación n° 11221232.

Referencias

- [1] Sánchez, A (2011), doi.org/10.1016/j.trac.2010.11.011
- [2] Khin, M. M. (2012) , doi.org/10.1039/c2ee21818f
- [3] Onur, A. (2018), doi.org/10.3389/fchem.2018.00417
- [4] Szente, L. (2013), doi.org/10.1021/ac400639y
- [5] He, J. (2003), doi.org/10.1021/cm034720r

Pillar-layered architectures for the development of thin films coordination polymers

Pablo Mella

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile

Aldo Campos Olgún,
Nicole Parra, Mónica Soler

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile

Cecilia Bustamante,
Tania Sandoval

Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Santiago, Chile

The development of functional materials presents a significant challenge in modern science. Functional materials are intentionally designed or engineered to exhibit specific physical or chemical properties that make them highly suitable for particular applications. These materials possess functionalities beyond their inherent structural properties. They can be broadly classified into various types, including electronic, magnetic, optical, piezoelectric, and superconducting materials, among others [1].

Among the functional materials, porous frameworks (PFs) have garnered significant attention as sensing materials due to their structural diversity, customizable pore size, and robust thermal and chemical stability [2]. Specifically, luminescent metal-organic frameworks (LMOFs) or luminescent coordination polymers (LCPs) have emerged as prominent PFs. LMOFs or LCPs, by incorporating functional linkers and d¹⁰ metal or LnIII nodes, can be developed as fluorescent sensors. In sensing applications, the systematic combination of metal ion/clusters and organic linkers within porous or nonporous CPs/MOFs facilitates metal-organic charge transfer processes and enhances guest interactions, leading to luminescence through a variety of mechanisms. For instance, supramolecular interactions between PFs and an analyte can result in an increase or decrease in luminescence emission, in some cases corresponding to a "turn-on" or "turn-off" response, respectively. Usually, bulk MOFs are prepared by using a variety of strategies like hydrothermal/solvothermal reaction, solvent volatilization, microwave-assisted, sonochemical and electrochemical methods by mixing the solution of both components, nodes and linkers, resulting in the precipitation of a MOF powder by self-assembling process. The main hindrance of using these methodologies is to control the size, shape and homogeneity of the framework. An alternative to manage these factors is by anchor the MOF on a surface forming a surface-mounted MOFs (SURMOFs); by anchoring an MOF to a surface, the versatility and potential of this high surface area supramolecular material can be directly integrated into architectures specific to the desired application [3, 4]. Moreover, it is feasible to fabricate Layer-by-Layer (LbL) porous 3D pillar-layered frameworks on a functionalized surface using a convenient self-assembled monolayer (SAM), enabling a connection between the surface and the framework [5].

This work aims to present the steps for the development of novel luminescent curcuminoid-based pillar-layered porous frameworks grown on a surface for sensing ions or molecules in aqueous media. To achieve this, several essential aspects need to be addressed in detail, including synthetic pathways, the selection of suitable 2D coordination polymers, curcuminoid pillar ligands, self-assembled monolayers, and surface choice. Additionally,

comprehensive structural, morphological, and optical characterization will be presented.

Acknowledgments

The authors acknowledge the financial support provided by Project ANILLO ANID/ACT210059 and Project ANID FONDECYT 1201962.

References

- [1] Ashish Tiwari et al. (2023), doi.org/10.1016/B978-0-323-85788-8.00016-1
- [2] Parmar, B. et al. (2020), doi.org/10.1039/c9qj01549c
- [3] Semrau, A. L. et al. (2021), doi.org/10.1021/acs.langmuir.1c00245
- [4] Chang, L. M. et al. (2022), doi.org/10.31635/ccschem.022.202101708
- [5] Mao, Y. et al. (2017), doi.org/10.1016/j.snb.2017.05.081.

A one-step microsynthesis method to produce high-quality gold nanoparticles for screening applications

Astrid Haensgen

*Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián*

Braulio Contreras-Trigo

*Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián*

Víctor Díaz-García

*Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián*

Patricio Oyarzún

*Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián*

Gold nanoparticles (AuNPs) are widely used for technology applications in biomedical, sensing and industry fields, thanks to their excellent physicochemical and optoelectronic properties. Synthesis methods of AuNPs can be carried out based on physical, chemical, biological or combined processes, which often depend on complex and laborious protocols [1]. The standard approach described by Turkevich et al. [2] produces spherical gold nanoparticles (colloidal gold) via the reduction of tetrachloroauric acid (HAuCl_4) with trisodium citrate dihydrate in water.

In this study, we propose a modification of the Turkevich method for rapid screening applications, which simplifies the synthesis of AuNPs using microvolumes of HAuCl_4 and citrate solutions (from 200 μL). This new method produces AuNPs of 15-20 nm in the optimal pH range (5.0-5.5), showing a high yield of synthesis (resulting AuNPs concentration), excellent stability and monodispersity. The colloidal solutions generated were analyzed by zeta potential, energy dispersive spectroscopy (EDS), electronic microscopy (TEM) and colorimetric analysis, and were compared with AuNPs generated by standard Turkevich method and commercial AuNPs (Sigma). As a proof of concept, aptasensors for antibiotic detection were developed and compared between microsynthesized and control AuNPs in detection assays, proving the former to outperform Turkevich-based AuNPs in terms of their analytical behavior.

In summary, the method described herein showed a strong synthesis performance of AuNPs, as well as superior dispersion and shape uniformity. Other advantages include simplicity, short synthesis time, lesser reagents and materials requirements, and consequently lower costs, which are highly desirable features for screening applications.

Acknowledgments

Fondecyt Regular 1221434.

References

- [1] Liu, X.Y. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.drudis.2021.01.030.
- [2] Turkevich, J. et al. (1951), doi.org/10.1039/df951110005.

Hygromechanical properties of enzymatically digested cotton-based nanocellulose with modified wetting properties

Diego Jaramillo-Pinto
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile /
Millenium Nucleus in
NanoBioPhysics (NNBP),
Valparaíso, Chile*

Nicole Orellana
*Centro de Biotecnología,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Filipe Natalio
*Department of Plant and
Environmental Sciences,
Weizmann Institute of
Science, Rehovot, Israel*

Tomas P. Corrales
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile /
Millenium Nucleus in
NanoBioPhysics (NNBP),
Valparaíso, Chile*

Michael Kappl
*Max Planck Institute for
Polymer Research,
Mainz, Germany*

During the last decades, cellulose-based materials have rapidly gained importance due to their abundance and sustainability [1]. By combining the growth of cotton in tissue culture with molecularly-designed glucose building-block feeding, cotton fibers with tailored properties can be obtained [2]. Here we present a protocol to synthesize cotton fibers using enzymatic digestion based on cellulase (*Trichoderma reesei*), that yields nanofibrils. The enzymatically digested nanofibrils are then imaged using environmental-AFM (e-AFM), and their mechanical properties are measured under controlled relative humidity (rh) conditions. Our e-AFM is equipped with Supersharp tips (SSS-FMR), with a tip radius of around 2 [nm]. Modified samples were treated with the molecule 3-deoxy-3-fluoro-D-glucopyranose (3dfg), biologically incorporated to in-vitro fertilized cotton ovules. Fluorine atom instead of -OH group in Carbon-3 of Glucopyranose is expected to interfere with the wetting properties of the cellulose fibers. Preliminary results evidence that unmodified cellulose samples increase their Young's modulus with the decrease of rh. Meanwhile, modified samples were shown to be smaller than control ones, being more difficult to analyze mechanically. Future experiments will focus on comparing treated samples with non-treated ones at different moisture conditions.

Acknowledgments

DJP and TPC thank funding grant "Fondecyt Regular 1211901" and Millennium Nucleus in NanoBioPhysics project NNBP NCN2021_021.

References

- [1] H. Shaghaleh et al. (2018), doi.org/10.1039/C7RA11157F
[2] F. Natalio et al. (2017), doi.org/ 10.1126/science.aan5830

Grafeno como conductor transparente en celdas solares

Amanda Merino¹

Valeria del Campo^{1,2}

Sofía Flores¹

Ricardo Henríquez¹

¹Departamento de Física,
Universidad Técnico
Federico Santa María
²Núcleo Milenio en
NanoBioFísica

Actualmente nos enfrentamos a una crisis ecológica, el calentamiento global se ha intensificado y junto al aumento de industrias, aumenta el requerimiento energético como sociedad. Hasta hoy, se han utilizado combustibles fósiles, la principal fuente de energía, sin embargo, estos recursos son limitados y altamente contaminantes, lo que nos obliga a buscar fuentes de energía renovables. Entre las energías renovables no convencionales más populares se encuentra la energía solar, captada mediante celdas solares.

Las celdas solares de heterojuntura se fabrican mayoritariamente con óxido de indio y estaño (ITO) como su película conductora transparente (TCF), un material costoso, dada la escasez de indio. Para propagar el uso de energías limpias se debe encontrar la manera de volverlas más accesibles; en el caso de las celdas solares, buscando un TCF alternativo y económico. Un material económico y un buen candidato es el grafeno. Desde su síntesis, el grafeno ha sido un material muy llamativo en numerosos campos a causa de sus excelentes propiedades estructurales, ópticas y eléctricas [1]. Su fabricación no es demasiado costosa y permite tener un gran control en la calidad del material resultante.

El presente trabajo propone estudiar el potencial del grafeno como una alternativa económica de TCF para celdas solares de silicio de heterojuntura. Con este fin, se sintetiza grafeno utilizando deposición química en fase de vapor y, posteriormente, se caracterizan sus propiedades estructurales, ópticas y eléctricas. Para la caracterización, se transfieren películas de ~10 mm de diámetro sobre distintos sustratos, incluyendo dióxido de silicio, vidrio, y sustratos recubiertos de ITO. Se alcanzó un máximo de transmitancia de grafeno sobre vidrio de 83,8%. La resistencia de hoja del grafeno sobre dióxido de silicio alcanzó un mínimo de ~1,3 Ωsq^{-1} . Adicionalmente, la transferencia de grafeno sobre los sustratos recubiertos de ITO resultó en una disminución de la resistencia de ~9,5 Ωsq^{-1} a ~7,8 Ωsq^{-1} .

Agradecimientos

Se agradece el apoyo de los proyectos ANID-Fondecyt 1210490; ANID-ECOS210038-C21E08; ANID-FONDAP-1522A0006 y ANID - Millennium Science Initiative Program - NNBP # NCN2021_021.

Referencias

[1] Parvez K. et al. (2015), doi.org/10.1002/9783527680016.ch10

Nanocompósitos autorreparables por efecto Joule basados en una matriz polimérica de polimetilmetacrilato y policetonas con nanorrellenos grafíticos

Jaime Antonio Orellana
Oyanedel

*Doctorado en Ciencias
de Materiales e Ingeniería
de Procesos, Universidad
Tecnológica
Metropolitana, San
Joaquín, Santiago, Chile*

Ricardo Matías
Cisternas Ramírez

*Magíster en Química con
Mención en Tecnología
de los Materiales,
Universidad Tecnológica
Metropolitana, Santiago,
Chile*

Mario Flores Flores

*Laboratorio de Polímeros,
Instituto de Ciencias
Químicas, Facultad de
Ciencias, Universidad
Austral de Chile, Valdivia,
Chile*

Rodrigo Andrés Araya
Hermosilla

*Programa Institucional
de Fomento a la
Investigación, Desarrollo
e Innovación (PIDi),
Universidad Tecnológica
Metropolitana, San
Joaquín, Santiago, Chile*

Los materiales nanocompuestos son una combinación de dos o más materiales diferentes que logran una sinergia de propiedades en el material final [1]. En este contexto, se investiga el desarrollo de nanocompuestos conductores eléctricos y térmicos mediante la incorporación de nanoplacas de grafeno, grafeno de pocas capas y grafeno como relleno carbonoso en una matriz polimérica. Por otro lado, los polímeros autorreparables tienen la capacidad de transformar estímulos físicos en respuestas físicas y/o químicas, lo que les permite reparar el daño de manera autónoma. Esta capacidad de autorreparación puede prolongar la vida útil de los materiales plásticos y evitar su eliminación prematura. La energía requerida para desencadenar la autorreparación puede provenir de diversas fuentes, pero es crucial que estas sean capaces de estimular las reacciones químicas y los mecanismos físicos de autorreparación presentes en el material como la memoria de forma y la interdifusión macromolecular [2].

Uno de los estímulos energéticos utilizados en los procesos de autorreparación es el efecto Joule, que consiste en el calentamiento resistivo inducido por una corriente eléctrica externa [3]. Para que el material experimente el efecto Joule, debe poseer propiedades conductoras eléctricas y térmicas. En este sentido, los nanorrellenos carbonáceos grafíticos desempeñan un papel crucial en el desarrollo de materiales compuestos, ya que gracias a sus propiedades conductoras térmicas y eléctricas, es probable que estos materiales experimenten el efecto Joule. Sin embargo, esto solo ocurrirá si el relleno se encuentra en la cantidad, distribución y orientación adecuadas para formar una red nanoestructurada interconectada desde la zona "A" hasta la zona "B". Esta red interconectada, conocida como red de percolación, permitirá la conducción tanto eléctrica como térmica en la matriz polimérica que los contiene [4].

En este trabajo, nos enfocamos en el estudio de la conductividad eléctrica, la formación de la red de percolación antes, durante y después de ciclos de autorreparación de un material nanocompuesto utilizando nanoestructuras similares al grafeno, producidas mediante métodos top-down, combinadas con una matriz polimérica autorreparable basada en polimetilmetacrilato y policetonas. Se fabricaron barras de este material mediante moldeo por compresión, las cuales exhibieron un comportamiento anisotrópico en su conductividad eléctrica y demostraron ser capaces de autorrepararse de un corte por medio de memoria de forma inducida por el efecto Joule.

Agradecimientos

Fondecyt de iniciación N°11201111 y al Programa Intitucional de fomento a la I+D+i (PIDi) UTEM.

Referencias

- [1] Halpin, J. C. (1992). ISBN: 9780877627548
- [2] Wang, S. et al. (2020), doi.org/10.1038/s41578-020-0202-4
- [3] Orellana, J. et al. (2021), doi.org/10.3390/polym13040649
- [4] Otten, R. H. J.et al. (2009), doi.org/10.1103/physrevlett.103.225704

Síntesis y caracterización de aislantes topológicos nanoestructurados

Valentina Gallardo
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Barbara Arce
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Hari Manoharan
*Department of Physics,
Stanford University,
Stanford, California,
United States*

Carolina Parra
*Departamento de
Ingeniería Mecánica,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Un aislante topológico (TI) es un material que se comporta como aislante en el bulto, pero tiene estados electrónicos en su superficie [1]. Una problemática en el estudio de estos materiales es la aparición de defectos en la síntesis que provoca estados electrónicos de bulto que interfieren en los estados superficiales. Una forma de favorecer la presencia de estos estados superficiales es a través de nanoestructuras de TIs las que, gracias a su alta razón superficie-bulto, permiten reducir la contribución del bulto [2]. Adicionalmente, se ha reportado que en el rango de 5-30 [nm], es posible observar efectos de confinamiento electrónico que modifiquen los estados superficiales en estos materiales [3]. Asimismo, la síntesis de estos nanomateriales se puede realizar en una gran variedad de otros materiales, dando la oportunidad de obtener heteroestructuras que posibiliten un manejo de la estructura de bandas de los estados electrónicos superficiales y la aparición de efectos emergentes en estas heteroestructuras [4].

Motivados por esto, en este trabajo se presenta la síntesis y el estudio de heteroestructuras de TI/Grafeno compuestas de nanoplatos de 5-30 [nm] de espesor de los aislantes topológicos Bi_2Te_3 y Sb_2Te_3 crecidos sobre grafeno monocapa, de tal forma de favorecer la presencia de los estados superficiales y la aparición de efectos emergentes de la heteroestructura y de confinamiento electrónico

Para la caracterización de estas heteroestructuras, en términos de morfología, espesor, composición y calidad cristalina, se utilizó espectroscopía Raman, microscopía electrónica de barrido, fluorescencia de rayos X por energía dispersiva, microscopía de fuerza atómica y microscopía de efecto túnel. Se obtuvo que los NPs de TI presentan la forma característica a la orientación cristalina de estos materiales, es decir, con forma de triángulo o hexágono y en el rango de espesores deseado de 5-30 [nm]. Además, se observa que los NPs tienen una composición homogénea de sus elementos presentando una alta calidad cristalina, especialmente en los NPs de mayor espesor. Esta calidad cristalina va disminuyendo a medida que los NPs se vuelven más delgados, lo cual puede evidenciar defectos intrínsecos que afecten los estados electrónicos locales. Finalmente, se presentan estudios preliminares de sus estados electrónicos locales realizados por espectroscopía de efecto túnel de baja temperatura.

Agradecimientos

Se agradece a los proyectos ANILLO ACT 192023, FONDECYT regular 1220715, FONDECYT regular 1231487, FONDEQUIP EQM190177, FONDEQUIP EQM190179, FONDEQUIP EQM200085 y a la beca ANID de Magíster Nacional folio 22201487.

References

- [1] Kong, D. and Cui, Y. (2011), doi.org/10.1038/nchem.1171
- [2] Parra, C. et al. (2017), doi.org/10.1021/acs.nanolett.6b03506
- [3] R. Giraud and J. Dufouleur. (2021), doi.org/10.1002/pssb.202000066
- [4] Zollner, K. and Fabian, J. (2021), doi.org/10.1002/pssb.202000081

Growth and characterization of LMO thin films on flat substrates through electron beam deposition

Vicente Ignacio Díaz
Martínez

Universidad de Chile

Vinicio Cevallos

*Universidad YachayTech,
Ecuador*

Cristian Olguín

*Universidad de Santiago
de Chile*

Marcos Flores

Universidad de Chile

Transition metal oxides are a type of inorganic compound that have received great attention in recent years due to their unique physical and chemical properties. Lithium manganese oxide (LMO) is a specific type of transition metal oxide, which has been deeply studied due to its electrochemical properties, relevant for lithium-ion batteries applications. Morphological control has been proposed as a method to obtain LiMn_2O_4 cathodes with high voltage stability. This material has been obtained by different chemical routes of synthesis, but research on physical deposition techniques to obtain thin films is scarce.

In this work, LMO thin films were deposited onto flat substrates by e-beam evaporation technique.

The nominal thickness ranged from 0.8 up to 3.5 nm with a deposition rate of 0.07 nm/min in ultrahigh vacuum conditions. The topography of the LMO thin film samples was studied using atomic force microscopy (AFM). The images show that the substrate is gradually covered by islands of LMO until a smooth thin film covers the substrate completely. The RMS roughness of the film decreases as more material is deposited. This indicates an initial stage in which islands are formed and a stage where the islands coalesce to form a continuous film.

Fractal properties of LMO films grown on silicon dioxide wafers were studied using the theory of Dynamic Scaling. The Auto-correlation function (ACF), Power spectral density function (PSDF), and Height-height correlation function (HHCF) were used to determine the lateral and vertical correlation lengths of the surface of the samples. The roughness exponent indicates the presence of super-roughness and anomalous dynamic scaling.

Further work with Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy (UPS) and Scanning Tunneling Microscopy (STM) will allow to obtain information of the valence band and electronic density of states near the surface of the samples.

Acknowledgments

This work has been supported by Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID) FONDECYT project N°1191799, Millennium Nucleus MultiMat.

References

- [1] Fereydoon Family (1990), [doi.org/10.1016/0378-4371\(90\)90409-L](https://doi.org/10.1016/0378-4371(90)90409-L)
- [2] Ruffino, F. et al. (2009) <http://dx.doi.org/10.1007/s11671-008-9235-0>
- [3] Heinz Hövel et al. (2006), doi.org/10.1016/j.progsurf.2006.01.002
- [4] Pelliccione, M., & Lu, T. M. (2008), doi.org/10.1007/978-0-387-75109-2

Electrosynthesis and characterization of rhenium nanoparticles and their evaluation in hydrogen evolution reaction

Ana E. Vergara P.
Centro de nanotecnología Aplicada, Facultad de Ciencias, Ingeniería y Tecnología, Universidad Mayor, Chile

Andrés Rámirez
Departamento de Ciencias Químicas y Recursos Naturales, Facultad de Ingeniería y Ciencias, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile

María Belén Camarada
Institute of Nanotechnology, Karlsruhe Institute of Technology (KIT), Karlsruhe, Germany

This work proposes the electrosynthesis of rhenium nanoparticles (ReNP) on a glassy carbon electrode (GC) previously modified with graphene oxide (GO), evaluating it as a cathode in the production of H₂ from the division of water in PEM cells. During the last years, rhenium has shown interesting catalytic properties [1], a low activation energy for the adsorption and desorption of H₂ [2], and a low cost compared to platinum group metals. In addition, obtaining ReNP by electrochemical means will allow a better distribution and control of the size, which implies an increase in the available surface area [3]. The GO bracket features a good surface-to-volume ratio, high thermal and electrical conductivity, and good chemical stability. A synergistic effect between the two materials is expected to produce H₂.

The GO was obtained by the Hummer methodology modified by Marcano [4][5]. Subsequently, the GC electrode was modified by the drop-casting method. For electrochemical measurements, a cell was occupied using Ag/AgCl (saturated KCl) as the reference electrode, Pt as the counter electrode, and the modified electrode as the working electrode. For GC electrosynthesis| GO| ReNP, a fixed potential pulse of -0.86 V was applied in 0.01 mol L⁻¹ NH₄ReO₄ with the addition of 0.1 mol L⁻¹ of H₂SO₄ with different perturbation times 5 ≤ t ≤ 90 s. HER measurements were carried out in 0.5 mol L⁻¹ of H₂SO₄ through linear scanning voltammetry (LSV) between 0.2 to -1.5 V vs. Ag/AgCl at 50 mV s⁻¹ and an iR compensation of 90%. Overpotentials were obtained between -0.16 to -0.43 V and a Tafel slope of 52 to 137 mV dec⁻¹. Studies were complemented with SEM, XPS, and EDS analyses.

Acknowledgments

The authors are grateful for the financial support of ANID-Chile through the Fondecyt Regular 1230426, and with the internal scholarship from the Universidad Mayor.

References

- [1] Veerakumar P. et al. (2017), doi.org/10.1016/j.jcis.2017.07.065
- [2] Garcia-Garcia, R. et al. (2015), doi.org/10.1007/s12678-014-0240-z
- [3] Kim H. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.jiec.2021.01.008
- [4] Marcano DC et al. (2010), doi.org/10.1021/acsnano.8b00128
- [5] Marcano DC et al. (2018), doi.org/10.1021/acsnano.8b00128

Preparación de cerámicas nanoestructuradas bidimensionales para su aplicación como sensores de gases

Daniela Balbontín
Campomanes
*Departamento de
Ingeniería Civil Química,
Biotecnología y
Materiales, Universidad
de Chile*

Rodrigo
Espinoza-González
*Departamento de
Ingeniería Civil Química,
Biotecnología y
Materiales, Universidad
de Chile*

Viyayabhaskara Rao
*Departamento de
Ingeniería Civil Química,
Biotecnología y
Materiales, Universidad
de Chile*

Ximena Villa Benavides
*Departamento de
Ingeniería Civil Química,
Biotecnología y
Materiales, Universidad
de Chile*

El desarrollo industrial de sectores como la minería o la manufactura, junto a la combustión de combustibles fósiles, producen la emisión de gases contaminantes denominados Compuestos Orgánicos Volátiles (VOCs), junto con compuestos como monóxido de carbono (CO), óxido nitroso (NO_x), ácido sulfhídrico (H₂S), entre otros. Los largos tiempos de exposición a estas sustancias pueden ocasionar efectos negativos crónicos para la salud humana; los que adicionalmente, reaccionan formando compuestos neurotóxicos y cancerígenos [1].

Este tipo de problemáticas ha promovido el desarrollo de sensores de gas, los que son dispositivos que determinan posibles perturbaciones causadas por los gases en el ambiente, procesándolo como señales electrónicas [2]. Los requisitos iniciales que deben cumplir los sensores son: generar una señal nítida, dada por la abundancia de sitios de adsorción, y una alta conductividad que disminuya la existencia de ruidos eléctricos [3].

Los sensores de gas son generalmente elaborados a partir de materiales semiconductores metálicos, sin embargo, estos compuestos requieren una alta temperatura para presentar una señal nítida y distinguible, lo que limita su aplicación y acelera la degradación [3]. En esta línea los materiales bidimensionales (2D) han demostrado ventajas notables; en particular, recientemente ha ganado interés el estudio de MXenes para el desarrollo de sensores de gases.

Los MXenes son nanomateriales bidimensionales compuestos por carburos y nitruros de metales de transición, enlazados a grupos funcionales orgánicos. Debido a su alta área superficial, conductividad eléctrica, estabilidad térmica y estructural, y buena relación entre señal y ruido, se posiciona como un material prometedor en el ámbito del sensado de gases, especialmente a temperatura ambiente [4].

En este estudio se fabricaron MXenes como materiales bidimensionales de Ti₃C₂T_x a partir de precursores en fase MAX compuestos por carburos y nitruros metálicos, con la finalidad de evaluar sus capacidades como sensor de gases; esto a partir de 2 rutas de síntesis. La primera corresponde a la técnica de grabado químico utilizando ácido fluorhídrico (HF) [2], mientras que la segunda técnica trata de un tratamiento hidrotermal alcalino usando hidróxido de sodio (NaOH) [5]. Posterior a la síntesis el análisis de microscopía de barrido electrónico (SEM) mostró la formación de compuestos delaminados en dos dimensiones, conformados principalmente por titanio, carbono y oxígeno. Estos materiales serán probados inicialmente como sensores en atmósfera oxidante y reductora para evaluar la influencia de la ruta de síntesis en la respuesta a dichos gases.

Agradecimientos

Proyecto Fondecyt Regular N° 1231474 y anillo FunSeD ACT210059.

Referencias

- [1] Kim et al. (2018), doi.org/10.1021/acsnano.7b07460
- [2] Pei et al. (2021), doi.org/10.1021/acsnano.1c00248
- [3] Nandy et al. (2020), doi.org/10.1021/acssensors.0c01287
- [4] Riazi et al. (2021), doi.org/10.1021/acsomega.0c05828
- [5] Li et al. (2018), doi.org/10.1002/anie.201800887

Graphite exfoliation into graphene-like nanostructures using polyketone modified with furan pendant groups

Ricardo Cisternas

*Magíster en Química con
Mención en Tecnología
de los Materiales,
Universidad Tecnológica
Metropolitana, Santiago,
Chile*

Jaime Antonio Orellana
Oyanedel

*Doctorado en Ciencias
de Materiales e Ingeniería
de Procesos, Universidad
Tecnológica
Metropolitana, San
Joaquín, Santiago, Chile*

Jonathan

Correa-Puerta

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Esteban Alejandro

Araya Hermosilla

*Facultad de Ciencias
Físicas y Matemáticas.
Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Universidad
de Chile, Santiago, Chile*

Rodrigo Andrés Araya
Hermosilla

*Facultad de Ciencias
Físicas y Matemáticas.
Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Universidad
de Chile, Santiago, Chile*

Graphitic materials display remarkable properties which make them unique in numerous applications. In particular, graphene shows exceptional properties such as mechanical strength, conductivity, and lightness. Given its versatility, it finds applications in diverse fields such as electronics, medicine, and the manufacturing of composites materials. However, producing graphene on a large scale at low-cost remains a challenge due to expensive methods and complex processing [1].

To address this challenge, we have produced graphite nanoplatelets through the in-situ exfoliation of micrometric graphite assisted by polymers. Both materials are abundant and inexpensive. The method initially involved the chemical modification of an alternating aliphatic polyketone with furan groups through the Paal-Knorr reaction [2]. Secondly, the furan pendant groups anchored on graphite particles by forming reversible covalent linkages through the Diels-Alder (DA) reaction during melt mixing (in bulk) using shear force. The process allows the progressive reduction of micrometric graphite into nanostructures via in-situ mechano-chemical exfoliation.

The characterization of the polymer and the composite was carried out using Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR), Proton Nuclear Magnetic Resonance (¹H-NMR), Thermogravimetric Analysis (TGA), rheology, Dynamic Light Scattering, Raman spectroscopy, Scanning Electron Microscopy and Scanning Transmission Electron Microscopy.

Infrared and Raman spectroscopy corroborated the proposed interfacial interaction between the components via DA reaction. Additionally, electron microscopes demonstrated the size reduction of graphite from 20 μm to 0.4 μm² and 15-30 nm thickness, thus forming the so-called graphite nanoplatelets [3].

After exfoliation, it is possible to recover the polymer via the retro Diels-Alder (r-DA) reaction [4] that separate the components at higher temperatures, thus rendering graphite nanoplatelets. Notably, the integrity of the polymer is retained after separation and it can be reused for a new pristine graphite exfoliation process.

This in-situ polymer-assisted graphite exfoliation method is a promising alternative for low-cost mass production of graphite nanoplatelets in a circular green chemistry perspective.

Acknowledgments

Rodrigo Araya Hermosilla thanks to Fondecyt de Iniciación N° 11201111 and Programa Institucional de Fomento a la I+D+i (PIDi-UTEM). Esteban Araya Hermosilla thanks to Fondecyt Postdoctorado N° 3230016.

References

- [1] Sivasambu Bohm et al. (2021), doi.org/10.1098/rsta.2020.0293
- [2] Soheila Khaghaninejad et al. (2014), doi.org/10.1016/B978-0-12-420160-6.00003-3
- [3] Alberto Bianco et al. (2013), doi.org/10.1016/j.carbon.2013.08.038
- [4] Alessandro Gandini (2013), doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2012.04.002

Microwave-assisted synthesis and characterization of lanthanide metal organic frameworks constructed from a curcuminoid ligand for fluorescence sensing of organic contaminants

Manuel Reyes Guerra
*Laboratorio de Materiales
Moleculares, Facultad de
Ciencias Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

Aldo Campos Olguín
*Laboratorio de Materiales
Moleculares, Facultad de
Ciencias Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

Monica Soler Jaumá
*Laboratorio de Materiales
Moleculares, Facultad de
Ciencias Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

During the second half of the 20th century, human activity has generated an alarming amount of pollutants that have significantly affected the environment. From the emission of toxic gases to the generation of non-biodegradable waste, pollution has negatively affected the quality of air, water and land.

Therefore, it is becoming increasingly necessary to have an effective method of measuring these pollutants. Metal-organic networks (or MOFs), are high-porosity nanoporous coordination polymers with the potential to detect organic molecules, these MOFs when synthesized with lanthanide ions, specifically europium and terbium, can detect variations in concentrations of pollutants by changing their fluorescent properties via various photophysical phenomena. To maximize these qualities, it is necessary that the MOF has a ligand that can absorb and transfer energy to the metal ion, which is known in the literature as the “antenna effect” [1]. Among these potential ligands are the curcuminoids, a family of molecules consisting of a linear diarylheptanoid skeleton with a beta diketone center, whose aromatic extremes may have different functional groups with which the absorption, emission spectra and coordination affinity can be modified [2], in such a way that it is possible to make an intelligent design of the material. The linker to be used in this work is the curcuminoid with carboxylic acid attached to the rings, the flexibility of the central chain of this ligand is expected to lead to smaller crystals compared to more rigid ligands.

Until now, most MOFs synthesis are carried out under solvothermal setting, where a solution of salt and ligand is heated in a pressured container. The main problem with this synthesis is its long reaction times. One of the alternatives that allows for a faster synthesis is the microwave-assisted synthetic methodology, which uses the help of microwaves to obtain a rapid and homogeneous heating of the mixture, which usually leads to reaction times in the order of minutes instead of days [3] and also size reduction from the order of micrometers to nanometers [4].

The present work aims to combine these two innovations, first, the use of the flexible curcuminoid diacid ligand and secondly, the use of microwave-assisted methodology, to achieve a coordination polymer which will be characterized and evaluated as an organic pollutant sensor.

Up until this point, several reaction conditions have been tried and when XRD analysis is performed some of them shows peaks indicating the presence of a crystalline material, the FTIR characterization shows the symmetric and assymmetric stretching of the dicarboxylate anion (1390, 1520, 1580 cm^{-1}), and of the Lanthanide-Oxygen bond (550 cm^{-1}). Finally, there is an increase in intensity of the peaks of the absorption bands of the ligand (286 and 394 nm) indicating that in fact the material formed has the desired coordination environment.

Acknowledgments

ANID Fondecyt Regular 1201962 and Proyecto Anillo ANID/ACT ACT210059.

References

- [1] Brunet, E. et al. (2007), doi.org/10.2174/2212796810701010011
- [2] Wang, Y. et al. (1997), doi.org/10.1016/S0039-9140(97)00028-3
- [3] Kumar A et al. (2020), doi.org/10.1016/j.mtnano.2020.100076
- [4] Khan N et al. (2015), doi.org/10.1016/j.ccr.2014.10.008

Synthesis of ZnTe quantum dots obtained in aqueous medium and their incorporation into elastomers: computational and experimental analysis

Juan Pablo Melo
*Centro de
Nanotecnología Aplicada
Universidad Mayor,
Facultad de Ciencias,
Huechuraba, Santiago,
Chile*

Diego Guzmán
*Centro de
Nanotecnología Aplicada
Universidad Mayor,
Facultad de Ciencias,
Huechuraba, Santiago,
Chile*

Fabián Ávila
*Centro de
Nanotecnología Aplicada
Universidad Mayor,
Facultad de Ciencias,
Huechuraba, Santiago,
Chile*

Camilo García
*Facultad de Recursos
Naturales, Departamento
de Ciencias Biológicas y
Químicas, Temuco, Chile
/ Núcleo de Investigación
en Bioproductos y
Materiales
Avanzados, Temuco, Chile*

The development of intelligent materials with combined properties is crucial for the development of new products and applications. Quantum dots (QDs) are semiconductors with unique optical properties due to their size comparable to the Bohr radius of the exciton, allowing for control of their optoelectronic properties for various applications. On the other hand, elastomers exhibit mechanical properties that make them ideal for applications as electroactive polymers (EAPs), such as transducers and actuators. The combination of QDs and elastomers offers the opportunity to obtain materials with combined mechanical and optical properties for applications like smart drug delivery pumps, and their potential for use in medical applications.

In this study, ZnTe QDs were prepared in an aqueous medium using a pH-controlled hydrothermal method. Ligands such as Cysteine (Cys), Mercapto Succinic Acid (MSA), and PSS-(3-Mercapto)propyl-Heptaisobutyl substituted (MPS) were included as coating agents for the QDs [1], improving their stability in aqueous medium and their optoelectronic properties. Subsequently, these QDs were incorporated into elastomers such as polydimethylsiloxane (PDMS), natural rubber (latex), and VHB™ 4910 acrylic elastomers (VHB), generating polymeric nanocomposites (NPs) [2].

The incorporation of QDs into elastomers was carried out in two different ways: through incorporation into the matrix (NP-S), and through UV-ozone (UVO) treatment on the surface, followed by functionalization with a self-assembled monolayer of (3-aminopropyl) trimethoxysilane (APTMS) to covalently bond the QDs to the elastomer surface (NP-U). The modified elastomers and the effect of each type of modification were characterized using UV-visible absorption spectroscopy, fluorescence spectroscopy, atomic force microscopy, and mechanical property testing. Both methods allowed for the modification of the photophysical properties of the elastomers depending on the size of the incorporated QDs [3].

In the formation of NP-U, ZnTe QDs influenced the photophysical properties, with a fluorescence peak around 370-420 nm. Additionally, morphological, and topographical changes were observed on the elastomer surface, such as wrinkled patterns and porosities, which affected the homogeneity of the surface coating with the QDs. On the other hand, NP-S showed comparatively more homogeneous incorporation. The incorporation of QDs into the elastomers resulted in changes in the photophysical properties of the NPs and their surface morphology [4].

Additionally, computational simulations were performed to investigate the interactions and mobility of QDs and ligands in the polymer matrix. Simulations were carried out using QD systems with ligands in an aqueous medium and their subsequent incorporation into the polymer matrix, considering the three types of elastomers. These simulations provided additional information about the interactions and behavior of QDs and ligands in the polymer system [5].

Acknowledgments

[1] Centro de Nanotecnología Aplicada (CNAP), Universidad Mayor [2] Proyecto CONICYT PAI, Convocatoria 2019 N°77190086.

References

- [1] Patra, S. K. et. al (2016) , doi.org/10.1039/c5dt04142b.
- [2] Silva Caroline, D. et. al. (2017), doi.org/10.1002/app.45459
- [3] Prudnikau, A. et. al. (2021), doi.org/10.1039/D0NA01012J
- [4] Nogales, A. et. al (2017), doi.org/10.1021/acsami.7b03161
- [5] Adnan, R. H. et. al. (2017), doi.org/10.1071/CH17078

Effect of the oxidation on the surface of the thin copper films

Tamara Beltrán
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

Gabriel Gray
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

Claudio
González-Fuentes
*Departamento de Física,
Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Ricardo Henríquez
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

One of the most used materials to transport electrical current is copper. In addition to its low electrical resistivity, its high thermal conductivity, and low cost, make it an ideal material to use in the manufacturing industry of sensors, semiconductors, or solar panels. However, this material is very reactive at atmospheric conditions, suffering an oxidation process that damages its properties, especially those related to the electrical transport. In this work, the effect of the oxidation process at low pressure on the surface morphology was studied. Copper films 20 nm thick were thermally evaporated from a tungsten basket in a High Vacuum System (HV), on muscovite mica. This sample fabrication chamber has a needle valve that allows the inlet flow and the gas pressure control, then a controlled oxidation process can be performed. In addition, the HV chamber is connected to an Ultra High Vacuum chamber (UHV) equipped with a scanning tunneling microscopy. Then, once the film has been evaporated, it can be transferred to UHV chamber without exposing it to ambient conditions. The morphological properties of the surface sample were characterized through the height-difference correlation function g , and its dependency on the scale of distances R . At least eight topographic images were obtained for each oxidation condition in different positions of the surface (250x250 nm², 512x512 pixels), they are analyzed with WSxM software [1], and $g(R)$ is obtained. Then, this function is adjusted by a representation of a self-affine surface, determining the parameters that describe the height difference correlation function of the surface: d (surface roughness), x (correlation length), y H (roughness exponent) [2]. The samples were exposed to three oxidation conditions to characterize their surface. These are labeled by the air pressure reached in the chamber for 3 minutes: 1E-4, 1E-2 and 1E0 [Pa]. Results shown that $g(R)$ and its parameter were modified from a representation of a standard copper surface to a "much smoother" one (as a Gaussian representation), due to the oxidation process. This result appears quantified through a significant change in the roughness exponent.

Acknowledgments

This research was partially supported by Fondecyt 1231849.

References

- [1] I. Horcas et al. (2007), doi.org/10.1063/1.2432410
- [2] Barabasi L, Stanley H. Fractal (1995), doi.org/10.1017/CBO9780511599798

Desarrollo de recubrimientos de nanoestructurados en base a h-BN para el control de corrosión microbiana

Helen Figueroa, Juliet Aristizabal, Elsie Zurob, Carolina Parra

Laboratorio de Nanobiomateriales, Universidad Técnica Federico Santa María

Juliet Aristizábal

Departamento de Física, Universidad Técnica Federico Santa María

Helen Figueroa

Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad técnica Federico Santa María

La corrosión es uno de los problemas más importante de la industria, de la cual se estima que entre un 20% y un 50% es causada por la corrosión inducida por microorganismos (MIC) [1]. Este tipo de corrosión afecta principalmente a sistemas industriales de transporte de aguas naturales, ricas en microorganismos que colonizan las superficies y que producen deterioro de 1000 a 10000 veces más rápido que el generado por la corrosión electroquímica [2]. La principal solución a la corrosión microbiana es el empleo de métodos químicos (biocidas) que no son selectivos y que generan un gran impacto ambiental. Adicionalmente los microorganismos se ambientan a los biocidas empleados. Motivados por esto hemos propuesto el uso de recubrimientos nanoestructurados en la búsqueda de alternativas más eficientes y de menor impacto ambiental. Una de las ventajas de estos nanomateriales radica en que sus dimensiones permiten controlar la interacción entre los microorganismos responsables de la corrosión microbiana y las superficies metálicas a la misma escala en que esta se produce. Uno de estos materiales nanoestructurados es el nitruro de boro hexagonal (h-BN), que presenta un espesor de una monocapa, con una estructura similar al grafeno, pero con propiedades aislantes, además de alta resistencia química y demostrada acción de antifouling [3]. En este trabajo presentamos un estudio sobre la influencia de las condiciones de síntesis de h-BN y transferencia del recubrimiento, y la caracterización del recubrimiento. Para la síntesis de este recubrimiento se empleó el método de deposición química en fase vapor a presión atmosférica (APCVD), usando como precursor amonio de borano y un sustrato de cobre. Dentro de las variables estudiadas está la cantidad de precursor, la temperatura de síntesis y la preparación del sustrato. Por otro lado, la transferencia se realizó por el método de delaminación electroquímica comparándolo con el método de transferencia de liberación en húmedo. La caracterización de las muestras sintetizadas y/o transferidas se realizó por medio de microscopía óptica, microscopía de fuerza atómica y espectroscopía Raman. Posteriormente se estudió el desempeño como agente antifouling del recubrimiento de h-BN, utilizando Escherichia Coli MG 555 como cepa modelo.

Agradecimientos

Fondecyt 1220715, Fondecip EQM200095 y Fondecyt Postdoctorado 3210536

References

- [1] Rajala P. et al. (2015), doi.org/10.3389/fmicb.2015.00647
- [2] Singh, A. K. (2020), doi.org/10.1007/978-981-15-8019-2
- [3] Zurob E. et al. (2019), doi.org/10.3390/nano9010049

Optimization of the method for synthesis of albumin nanoparticles loaded with ciprofloxacin and evaluation of their stability

Ricardo G. Vasquez,
Sofía V. Sánchez, Javier
O. Morales

*Drug Delivery Laboratory,
Departamento de
Ciencias y Tecnología
Farmacéuticas,
Universidad de Chile*

Ricardo G. Vasquez,
Sofía V. Sánchez,
Javier O. Morales

*Advanced Center for
Chronic Diseases
(ACCDiS)*

Ricardo G. Vasquez,
Sofía V. Sánchez,
Javier O. Morales

*Center of New Drugs for
Hypertension (CENDHY)*

Eva C. Arrua

*Centro de Investigación y
Desarrollo en Materiales
Avanzados y
Almacenamiento de
Energía de Jujuy
(CIDMEJu),
CONICET-Universidad
Nacional de Jujuy,
Argentina*

Ciprofloxacin (CPF) is an antibiotic widely used in clinical practice for urinary tract infections [1]. However, several characteristics of the drug, such as low half-life and low absorption, force the administration of high doses increasing the probability of adverse effects and toxicity. Nanotechnology has emerged as a potential alternative to overcome these common antibiotics limitations. Within nanosystems, albumin nanoparticles (BSA NPs), have shown low immunogenicity and cytotoxicity, and high bioavailability [2]. In the present study, a method for optimizing the synthesis of CPF-loaded BSA NPs (CPF-BSA NPs) was designed to improve their physicochemical characteristics such as particle size, polydispersity index (Pdl), Zeta potential (ZP), morphology, stability, and encapsulation efficiency (EE) [3]. A design of experiments (DoE) was carried out to optimize a modified phase inversion-based synthesis method for desirable characteristics (small, monodisperse and high drug encapsulation). The DoE included a screening and an optimization phase. The screening phase was done to select the significant variables, through a Plackett-Burman model to identify the effect of CPF, BSA, Tween, Glutaraldehyde, and pH (4, 5). The optimization phase was conducted through a central composite design to estimate the most important factors leading to the best compromise between lower size, Pdl, ZP changes, and high EE. Then the optimized CPF-BSA NPs were characterized by dynamic light scattering (DLS), laser-Doppler electrophoresis and transmission electron microscopy (TEM). The CPF %EE into BSA NPs was determined by an indirect fluorescent quantification method. According to this model, the relevant factors for the 3 evaluated responses were CPF, BSA and Tween amounts. Based on the screening phase results, the optimization process was carried out using a response surface design obtaining the best conditions to get CPF-BSA NPs with an adequate desirable function value (0.864). The theoretical characteristics of the optimized CPF-BSA NPs were: size (133,9 nm), Pdl (0,120), mg of encapsulated CPF (882,5 mg). The experimental results were size $122,9 \pm 2,2$ nm, Pdl $0,139 \pm 0,039$, and $857,1 \pm 2,0$ mg of encapsulated CPF. The ZP of CPF-BSA NPs was $-31,6 \pm 2,0$ mV and particles exhibited a spherical shape. Finally, the storage stability of optimized CPF-BSA NPs was assessed at 3 different temperatures 4 °C, 25 °C and 40 °C for two months. CPF-BSA NPs showed no significant differences at any tested temperature in size, Pdl, and ZP after two months of storage ($p=0.05$). Smaller, monodisperse and highly encapsulating BSA NPs were obtained through the development of the optimization process. This model permitted to control the factors that affected the physicochemical characteristics of the systems and produce attractive delivery systems. Optimized CPF-BSA NPs could potentially be a promissory treatment for urinary tract infections.

Acknowledgments

This work was funded by Regular FONDECYT Project 1181689, ANID/PIA/ACT192144, ANID/PCI/REDI170653, FONDAP Project 15130011, National Doctoral Scholarship 21201831, all granted by Chilean National Agency for Research and Development (ANID).

References

- [1] González MJ (2020), doi.org/10.3389/fcimb.2020.542755
- [2] Arriagada (2019), doi.org/10.1208/s12249-019-1419-7
- [3] Kumar PV (2007), doi.org/0.1208/pt0801017
- [4] Sun S (2018), doi.org/10.1016/j.jddst.2018.07.018
- [5] Paik SYR (2013), doi.org/0.1016/j.foodchem.2013.04.059

Cecilia Bustamante
Andrade, Tania Sandoval
*Departamento de
Ingeniería Química y
Ambiental, Universidad
Técnica Federico Santa
María, Santiago, Chile*

Nicole Parra, Mónica
Soler
*Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Ciencias Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile,
Santiago, Chile*

Adsorción de (3-Aminopropil)triétosisilano (APTES) en superficies de Silicio mediante fase vapor para crecimiento controlado de SURMOF

Debido a la presencia de distintos contaminantes emergentes en nuestro país, principalmente en las denominadas “zonas de sacrificio”, y a los potenciales daños que ellos podrían producir en los ecosistemas y en la salud de la población en Chile, se hace necesario fabricar dispositivos que permitan la detección temprana y eficiente de ellos. Una estrategia atractiva a desarrollar es la utilización de estructuras metal orgánicas (MOF) ya que presentan diversas características de interés como alta porosidad, gran capacidad de ajuste y cambio en sus propiedades ópticas, eléctricas y mecánicas como respuesta al contacto con el analito.

Es relevante crear dispositivos de detección que aumenten la capacidad de la interacción entre el MOF y el analito, por lo tanto, se plantea utilizar estructuras metal orgánicas MOFs montadas en superficies o SURMOF como sensores, debido a que permiten controlar la densidad, homogeneidad y cobertura de crecimiento sobre la superficie, posibilitando el uso de MOFs idénticos o distintos.

Parte crítica del crecimiento inicial del SURMOF en la superficie es el proceso de funcionalización, ya que en esta etapa es posible controlar la cobertura en la superficie y así establecer la nanoestructura del MOF. En este trabajo se plantea estudiar, analizar y controlar la funcionalización de superficies en fase vapor en obleas de Silicio con (3-Aminopropil)triétosisilano (APTES) mediante monocapas autoensambladas (SAMs) lo que permite trabajar en el desarrollo de una metodología estándar, optimizada y replicable que permita utilizar otras superficies y grupos silanos, como [(3-triétosisilil)propil] anhídrido succínico (TSP) o (3-aminopropil)di-isopropilétosisilano (APDIPES) y de esta forma evaluar los mejores materiales y formas de detección de contaminantes.

Para ello, se utilizarán distintos métodos de caracterización como Fourier Transform Infrared (FTIR), Atomic Force Microscopy (AFM), ángulo de contacto y cuantificación de los grupos aminos mediante Ensayo Kaiser, los cuales en conjunto permiten evaluar el proceso de funcionalización y relacionan la cobertura obtenida con las condiciones de la reacción. Utilizando la metodología de funcionalización de superficie en solución como método de calibración para la fase vapor, se ha observado mediante la caracterización que el compuesto APTES se adsorbe en una monocapa, estable y sin polimerizar.

En base a estos resultados, el proceso de funcionalización de silicio con APTES se encuentra en proceso de optimización para lograr un mayor control sobre la cobertura sub-monocapa de la molécula silana en SiO_2 mediante la modificación de las condiciones de deposición

(temperatura, presión y tiempo de reacción). Esto permite una comprensión aún mayor del fenómeno de adsorción de grupos funcionales de interés sobre la superficie, permitiendo controlar y mejorar la interacción entre el MOF y el analito, generando dispositivos eficientes en la detección de contaminantes emergentes.

Agradecimientos

Se agradece el financiamiento proveniente del Proyecto Anillo ANID/ACT210059.

Referencias

[1] Ahmadi M. et al (2021), doi.org/10.1016/j.heliyon.2021.e0691

Graphene quantum dots from biomass waste synthesized via microwave hydrothermal method

Marcela Sagrilo Frizzo

*Universidad San
Sebastián*

Gonzalo Recio

*Sánchez
Universidad San
Sebastián*

Johanna Marcela

*Castaño Agudelo
Universidad de
Concepción*

João Batista

*Rodrigues Neto
Universidade Federal de
Santa Catarina*

Graphene quantum dot (GQDs) is a zero-dimensional luminescent nanomaterial member of the carbon family and is typically considered a chopped fragment of a graphene sheet [1]. However, the high cost of GQDs and low yield remain open challenges for practical applications. An easy, economical, and high-yield synthesis of GQDs remains a necessity for its real-world application. Various synthesis techniques have been adopted, such as hydrothermal [2], electrochemical [3], microwave cutting [1], etc. Among these approaches, microwave treatment is indeed advantageous due to its uniform and rapid heating, which leads to an extremely short reaction time. The use of microwave treatment has already been reported for the rapid synthesis of GQDs; however, most of these reports used expensive precursor materials, complex processes, highly toxic chemicals, or showed very low product yield. In this regard, biomass waste, which is green, cheap, abundant, easily available and carbon-rich, can be considered as a potential precursor for GQDs synthesis. Moreover, the disposal and recycling of biomass waste is becoming a major challenge of the modern world. Thus, the use of biomass waste would solve the recycling problem as well as fill the need for a cost-effective precursor for GQDs synthesis. Biochar is a highly porous and very stable carbonaceous residue obtained from the pyrolysis of biomasses such as wood, crop residues, sewage sludge, kitchen waste, and algae, all of which are abundantly available. The material has numerous physicochemical properties that prove essential for its wide applications. These properties include high porosity, adequate surface area, very high stability, excellent carbon content, remarkable cation exchange capacity, and appreciable water holding capacity. Recently, it has gained recognition for its applications in soil and water contamination remediation, carbon sequestration, energy production, waste management, substrate for super capacitors and energy storage cells [5]. Based on the presented, this work was used a low-cost, green and renewable biomass resources for the synthesis of GQDs via microwave hydrothermal treatment. As a characteristic property, GQDs are highly hydrophilic, exhibit a unique excitation-independent photoluminescence emission, a property which is attributed to their unique emission fluorescence center.

References

- [1] Abbas, A., et al (2020), doi.org/10.1038/s41598-020-78070-2
- [2] Kang, C., et al (2020), doi.org/10.3390/nano10112316
- [3] Ahirwar, S., et al (2017), doi.org/10.1021/acsomega.7b01539
- [4] Yunjie Zhou, et al (2022), doi.org/10.1016/j.materresbull.2022.111908

Síntesis de nanotubos de carbono sobre TiO₂ para el desarrollo de recubrimientos de titanio poroso con aplicaciones en implantes médicos

Fernanda Olivares Salgado
Universidad Técnica Federico Santa María

Carolina Parra Gonzalez
Universidad Técnica Federico Santa María

Sheila Lascano Farak
Universidad Técnica Federico Santa María

Rodrigo Segura del Río
Universidad de Valparaíso

Los avances en tecnología y el constante progreso en medicina han favorecido el aumento de la esperanza de vida humana generando el envejecimiento de la población lo que tiene como consecuencia una gran cantidad de habitantes con pérdida de densidad y resistencia ósea. Esto implica una mayor probabilidad de fractura del hueso, y, por lo tanto, un aumento de la demanda de implantes a un ritmo alarmante.

Este estudio se centra en el desarrollo de un sustrato poroso recubierto por un compuesto de TiO₂, usado como catalizador para el crecimiento de nanotubos de carbono (CNTs) preparados por la técnica deposición química en fase vapor para evaluar su potencial aplicación como implante. Esta estrategia presenta una combinación de modificaciones superficiales macro-micro-nano para la fabricación de un biomaterial compuesto que sea más eficiente desde un punto de vista mecánico y biológico, que los materiales utilizados actualmente. Para lograr esto, se utilizaron sustratos de titanio fabricados con macroporosidad por medio de la técnica FAST/SPS los cuales fueron recubiertos con un compuesto de TiO₂(micro)/CNTs(nano-rugosidad). El TiO₂ es utilizado como soporte del nanomaterial y como unión entre el nanotubo y el sustrato de titanio, además es un material que presenta propiedades antimicrobianas [1]. Los CNTs se utilizaron para otorgarle la nano-rugosidad lo cual podría potencialmente mejorar el fenómeno de osteointegración, sumado a las propiedades antibacterianas [2] y propiedades anticancerígenas [3] que aporta. Para la caracterización tanto de los materiales por separado como en su conjunto se emplearon técnicas como espectroscopía Raman, SEM, EDS y BET, para determinar las propiedades estructurales y morfológicas.

Agradecimientos

Fondecyt Postdoctorado 3230716, Fondecyt 1220715, Fondecyt 1231834, Fondecyt EQM170156, Fondecyt grant EQM190179.

Referencias

- [1] Chung, C. J. et al. (2007), doi.org/10.1557/JMR.2007.0388
- [2] Xin, Q. et al. (2019), doi.org/10.1002/adma.201804838
- [3] Wahab, R. et al. (2018), doi.org/10.1016/j.vacuum.2018.02.025

Fabricación de estructuras metal orgánicas (MOFs) a través de síntesis no convencional

Carmen Castro-Castillo
*Universidad de Chile,
Facultad de Cs. Físicas y
Matemáticas,
Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Santiago,
Chile*

Josefa Caamaño
*Universidad de Chile,
Facultad de Cs. Físicas y
Matemáticas,
Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Santiago,
Chile*

Mónica Soler
*Universidad de Chile,
Facultad de Cs. Físicas y
Matemáticas,
Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Santiago,
Chile*

Rodrigo
Espinoza-González
*Universidad de Chile,
Facultad de Cs. Físicas y
Matemáticas,
Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Santiago,
Chile*

La síntesis de estructuras metal orgánicas (MOFs) ha atraído una gran atención durante las últimas décadas debido a la posibilidad de obtener una gran variedad de estructuras morfológicamente interesantes, que también son de gran interés para aplicaciones en una serie de campos relacionados con materiales porosos y con sitios activos dispersos atómicamente. Esto incluye las áreas más tradicionales de almacenamiento, separación y catálisis, que se basan en el tamaño y la forma de los poros, así como en las interacciones hospedador-huésped involucradas. Además, actualmente se investigan intensamente las aplicaciones biomédicas o el uso como materiales sensores [1].

Con respecto a la fabricación convencional de MOFs, el objetivo principal es establecer las condiciones de síntesis que conducen a bloques de construcción inorgánicos definidos sin descomposición del enlazador orgánico. Al mismo tiempo, la cinética de cristalización debe ser adecuada para permitir que tenga lugar la nucleación y el crecimiento de la fase deseada. Además, se ha demostrado que es una síntesis compleja y forman grandes cantidades de desechos. Para acelerar el descubrimiento de MOF, se han desarrollado métodos de alto rendimiento, como las técnicas electroquímicas de síntesis, los cuales han demostrado que disminuyen los costos y efectivamente mejoran las propiedades fisicoquímicas de la matriz, como el comportamiento de las partículas ante diferentes acciones externas. Además de ser procesos heterogéneos que crean cantidades mínimas de materiales tóxicos y desechos, y se pueden llevar a cabo a una escala de microlitros, consumiendo así solo pequeñas cantidades de reactivos. Este estudio muestra que la síntesis electroquímica de MOFs, favorece las rutas y tiempos de preparación. Además, la novedad de este estudio es la síntesis del MOF-derivado en la superficie de un electrodo sin ningún aglutinante [2]. Este método muestra una nueva ruta para fabricar materiales MOF de alto rendimiento sobre un electrodo con una gran velocidad de producción. La electrosíntesis se llevó a cabo a través de una solución electrolítica de H_2SO_4 y CuSO_4 (o ZnSO_4) aplicando un potencial de $-0,25$ V vs SCE, donde el cobre metálico se depositó uniformemente sobre la superficie. Para la síntesis de Cu-BTC (o Zn-BTC), se preparó una solución que contenía BTC como enlazador y MTBS como electrolito. Luego, al electrodo recubierto de Cu (o Zn), se le aplicó un potencial de $+0,7$ V vs SCE. Se formó, Cu-BTC y Zn-BTC en la superficie del electrodo. Para la electrosíntesis e inmovilización de Cu/Pt-BTC y Zn/Pt-BTC en la superficie del electrodo, el Cu y Pt se depositaron simultáneamente, aplicando dos potenciales $-0,6$ V vs SCE y $0,0$ V vs SCE para formar un electrodo modificado de Cu/Pt. Luego, el electrodo de Cu/Pt se sumergió en la solución del MOF y se aplicó un potencial de $+1,5$ V vs SCE. Por lo tanto, se obtuvieron Cu/Pt-BTC y Zn/Pt-BTC en la superficie del electrodo sin ningún aglutinante.

Agradecimientos

Proyecto Anillo Functionalized surfaces for environmental detection (FunSED) ACT210059.

Referencias

- [1] N. Stock and S. Biswas (2012), doi.org/10.1021/cr200304e
- [2] M. Malakzadeh, et. al (2021), doi.org/10.1016/j.jelechem.2021.115716

Efecto de la adsorción de tioles sobre la resistencia eléctrica de películas de cobre

Ricardo Henriquez
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Gabriel Gray
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Francisca Marin
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Valeria del Campo
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Claudio
Gonzalez-Fuentes
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Patricio Häberle
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

One of the most used materials to electric transport is copper. In addition to its low electrical resistivity, its high thermal conductivity, and low cost, make it an ideal material to use in the manufacturing industry of sensors, semiconductors, or solar panels. However, this material is very reactive at atmospheric conditions, suffering an oxidation process that damages its properties, especially those related to the electrical transport. Seeking to modify the contribution of the different scattering mechanisms responsible of the electrical resistance, thin copper films (20 nm) were deposited by thermal evaporation, varying the substrate temperature TS (RT, 330, y 390 K). The effect of this change was determined on the electrical resistance during the sample fabrication, the aging in vacuum, and the oxidation process at ambient conditions. On the other hand, the sample morphology was measured through AFM, determining the parameters that describe the high difference correlation function of the surface: d (surface roughness), λ (correlation length), and H (roughness exponent). Also, the oxide layer formed on the films was characterized by Raman spectroscopy. The results of this first stage show that for TS = 330 K, films present “a more compact morphology” (the lowest d and λ), correlating with the smallest percolation thickness (12 nm), and the lowest aging rate. On the other hand, from the resistance behavior during the oxidation process, it can be ensured that the oxide layer is thin, therefore diffusion through it is modified by the presence of an electric field [1]. This layer is composed by Cu_2O (from the Raman spectra). Once samples were removed from vacuum system, they were immersed in a solution of dodecanethiol (1mM) in ethanol. The electrical resistance shows an increase higher than that produced by the oxidation process. Also, the highest resistance increase was measured in samples with TS = 330 K. Essentially, results from first and second stage, indicate that for TS = 330 K, the “more compact morphology” decreases the effect of the grain boundaries on the film resistance, resulting in an increase in sensitivity to surface phenomena. To account the effect of electron surface scattering on the electrical resistivity, the semiclassical Mayadas-Shatzkes theory (MS) [2] was used, showing consistence between the morphological and electrical parameters, and the resistance change due to the thiol adsorption. However, lamentably, the MS theory does not give “keys/clues” about the mechanisms that produces the change in the specularly parameter. Finally, it is proposed that the adsorption of the negative S-head of the thiols on the copper oxide, modify the electric field through Cu_2O layer, producing a change in the charge distribution in the interface $\text{Cu}/\text{Cu}_2\text{O}$. This modification affects the ratio of electron surface scattering of the conduction electrons of the copper film (the not-oxidized part), and it results in the resistance increase.

Acknowledgments

This research was partially supported by Fondecyt 1231849 and Fondecyt 1210490.

References

- [1] N. Cabrera et al. (1948), doi.org/10.1088/0034-4885/12/1/308
- [2] A. F. Mayadas et al. (1970), doi.org/10.1103/PhysRevB.1.1382

Jennifer León¹

Sandra Fuentes²

Andrea Ortega²

José Gallo²

Grace Anza²

¹Departamento de
Química de los
Materiales, Facultad de
Química y Biología,
Universidad de Santiago
de Chile

²Departamento de
Ciencias Farmacéuticas,
Facultad de Ciencias,
Universidad Católica del
Norte

Estudio de estabilidad y citotoxicidad de suspensiones de nanopartículas de ferrita de bismuto dopadas con samario y recubiertas con polietilenglicol, BiFeO₃:Sm³⁺-PEG

El estudio de los materiales a escala nanométrica ha tenido un gran auge, principalmente porque este tipo de nanoestructuras muestran propiedades y características físicas y químicas distintivas respecto a su versión de mayor tamaño que resultan atractivas para su aplicación en diversas áreas. Su utilización y aplicación se ha diversificado en áreas tan compleja como la biomedicina, con usos ya comprobados en imagenología, tratamientos clínicos y entrega dirigida de fármacos. En relación con lo anterior, las nanopartículas de ferrita de bismuto (BFO) destacan como nanomateriales con propiedades magnéticas, eléctricas y ópticas que podrían ser beneficiosas para su aplicación en biomedicina [1]. Sin embargo, se requiere que estos materiales sean estables en entornos hidrofílicos evitando la degradación prematura o eliminación por parte del sistema inmunitario [2]. Por esta razón, se ha implementado el proceso de recubrimiento de las nanopartículas con polímeros como el PEG a través de la PEGilación, lo que mejora su estabilidad, desempeño y biocompatibilidad en entornos biológicos [3]. Este trabajo presenta los resultados obtenidos de la síntesis de BFO y BFO dopado con iones Sm³⁺ (BFO:Sm) utilizando la técnica hidrotermal, que fueron sintetizadas a partir de los precursores nitrato de bismuto y nitrato de hierro en medio básico. Las NPs de BFO y BFO:Sm fueron recubiertas con polietilenglicol y dispersadas en solución acuosa a distintos pH utilizando homogeneizador ultrasónico, lo anterior para analizar su tamaño hidrodinámico y estabilidad coloidal a través del estudio de potencial-z, para finalmente evaluar la citotoxicidad de las nanopartículas dispersas en solución en células HEK293T. Se investigó su estabilidad y compatibilidad con los sistemas biológicos. Los resultados principales se obtuvieron a través del análisis de difracción de rayos X, donde fue posible observar que las nanopartículas sintetizadas con y sin dopar, presentaron iguales patrones de difracción mostrando picos definidos y agudos conformes a la estructura cristalina estándar de BFO romboédrica. Por otra parte, en los espectros de infrarrojo de las nanopartículas de BFO sin recubrir y recubiertas con PEG, se puede reconocer la presencia del polímero debido a que están presentes las bandas características de grupos hidroxilos, metilos, glicolatos y enlaces tipo éter, lo cuales se pueden observar de igual forma en el espectro del PEG.

Agradecimientos

Proyecto Fondecyt regular 1190721 y AFB220001, Centro de Nanociencia y Nanotecnología, CEDENNA.

Referencias

- [1] Staedler D. et al. (2015), doi.org/10.1016/j.nano.2014.12.018
- [2] Komsthöft T. et al. (2022), doi.org/10.1016/j.coche.2022.100849
- [3] Suk J. S. et al. (2016), doi.org/10.1016/j.addr.2015.09.012

Nanoestructuración de vidrios por litografía suave

Martín Ampuero¹

Valería del Campo^{1,2}

Ricardo Henríquez¹

Luciano Bravo¹

María Saavedra^{1,2}

¹Universidad Técnica
Federico Santa María

²Núcleo Milenio de
Nanobiofísica

Las superficies hidrofóbicas presentan la propiedad de ser autolimpiantes, un hecho que puede ser una solución viable para el ensuciamiento de módulos fotovoltaicos instalados en desiertos, los cuales se ensucian debido a la gran cantidad de polvo y suciedad acarreada por fuertes vientos, disminuyendo su transmitancia y eficiencia.

En este trabajo se buscará obtener una superficie hidrofóbica a partir de una nanoestructura en un vidrio, generada por medio de litografía suave. Mediante este método, se copiará el patrón ordenado de un disco DVD utilizando máscaras de PMMA (Polimetilmetacrilato, polímero termoplástico transparente) y películas delgadas de oro, grabando esta plantilla con Reactive Ion Etching (RIE) utilizando Argón. Mediciones de ángulo de contacto son realizadas en un goniómetro para monitorear la hidrofobicidad de las muestras.

Nuestros resultados muestran un aumento en el ángulo de contacto del vidrio respecto de la referencia (vidrio liso con $43.2 \pm 0.2^\circ$), obteniendo ángulos de contacto de $62.0 \pm 6.5^\circ$ y $63.1 \pm 3.1^\circ$, para muestras grabadas con máscara de PMMA y muestras grabadas con máscara de oro, respectivamente. Esto nos indica que las superficies con nanoestructuras ordenadas aumentan su rugosidad e hidrofobicidad, respecto a superficies lisas.

Agradecimientos

Los autores agradecen el financiamiento proporcionado por: ANID-Fondecyt 1210490; ANID-ECOS210038-C21E08; ANID-FONDAP-1522A0006 and ANID - Millennium Science Initiative Program - NNBP # NCN2021_021.

Referencias

- [1] Baquedano E. et al. (2017), doi.org/10.3390/nano7120437
- [2] Baquedano E. et al. (2017), doi.org/10.3390/nano7050109
- [3] Larraín T. et al. (2012), doi.org/10.1016/j.renene.2011.10.015

Nanoestructuras de Cu ancladas molecularmente a sustratos como catalizador para la reducción electroquímica de CO₂

Fernando Díaz
Universidad de Santiago de Chile

Sara Ramírez
Centro de Estudios e Investigación en Salud y Sociedad (CEISS), Facultad de Ciencias Médicas, Universidad Bernardo O'Higgins.

Carlos Silva
Universidad de Santiago de Chile

Jorge Pavez
Universidad de Santiago de Chile

J. Francisco Silva
Universidad de Santiago de Chile

La reducción electroquímica de CO₂ (CO₂RR) se presenta como una alternativa interesante para transformar el CO₂ en compuestos derivados del carbono. Sin embargo, debido al alto sobrepotencial que requiere y la baja selectividad de productos, resulta necesario buscar un catalizador que pueda mejorar estos aspectos. El cobre es el único elemento que permite obtener productos basados en carbono más desarrollados (productos C₂-C₃) que pueden ser utilizados como combustibles o reactivos [1]. Sin embargo, la alta actividad del cobre a la oxidación presenta un desafío, por lo que se requiere una ruta sintética para aumentar la estabilidad de este material. El diseño de nuevos nanoelectrodos basados en la incorporación efectiva de nanoestructuras de cobre (CuNEs) a sustratos metálicos mediante monocapas autoensambladas (SAMs) como el 4-aminotiofenol (4-ATF), mejoraría la actividad catalítica a través de un aumento de la velocidad de transferencia electrónica [2].

Se sintetizaron CuNEs utilizando el método de micela directa (DM) descrito por Silva et al [3], y el método de micela inversa (RM) descrito por Liu et al [4]. Las CuNEs se caracterizaron por UV-VIS, DLS y TEM. Se obtuvieron suspensiones de CuNEs (DM) y CuNEs (RM) de estrecha dispersión y tamaños aprox. de 40 y 60 nm respectivamente. Se observa una mejora considerable en la estabilidad frente a la oxidación de las nanoestructuras sintetizadas por RM.

El electrodo de trabajo (Au) se modificó en tres pasos: una orientación cristalográfica del sustrato a través de una llama reductora de H₂, obteniendo la superficie Au(111). En segundo lugar, una modificación con SAMs realizada mediante una inmersión en soluciones de 4-ATF. Finalmente, la funcionalización con CuNEs se realizó por inmersión en suspensión de CuNEs. Se llevó a cabo técnicas como CV, EIS y AFM para caracterizar la superficie nanoestructurada. La micrografía AFM muestra el correcto anclaje molecular de las nanoestructuras al sustrato por medio de la SAM, permitiendo además una dispersión de estas nanoestructuras en la superficie.

La actividad catalítica para CO₂RR se evaluó en KHCO₃ 0,1 M (pH 6,8). Los estudios electroquímicos indican una disminución de la resistencia a la transferencia de carga y un aumento de la densidad de corriente solo al incorporar los CuNEs. Se observa una considerable disminución en el potencial de reducción de CO₂RR al incorporar CuNEs en comparación con el sustrato Au(111). Finalmente se aprecia un impacto de la naturaleza de la nanoestructura, en términos de tamaño, forma y desactivación por oxidación en el desempeño

catalítico de la reacción.

Agradecimientos

F. Díaz agradece a ANID por la beca doctorado nacional No. 21211764 y a la Vicerrectoría de Postgrado de la Universidad de Santiago de Chile.

Referencias

- [1] Zhang S. et al. (2020), doi.org/10.1021/acs.accounts.9b00496
- [2] Young S. et al. (2016), doi.org/10.1021/jacs.6b07674
- [3] Silva N. et al. (2019), doi.org/10.3390/ma12050804
- [4] Liu K. et al. (2014), doi.org/10.1016/j.jpowsour.2014.06.054

Fabricación de material híbrido Zr-MOF/SnO₂ para su aplicación como sensor de gas

Tamara Ávila Gutiérrez

*Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Cs. Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

Amanda Pavez Parra

*Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Cs. Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

Rodrigo Espinoza G.

*Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Cs. Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

Monica Soler J.

*Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Cs. Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

Ximena Villa B.

*Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Cs. Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

En la actualidad, es crucial innovar en tecnologías para la detección de gases, tanto para monitorear la calidad del aire como para la detección de gases tóxicos nocivos para la salud. Los sensores más ampliamente utilizados son los quimio-resistivos a base de óxidos metálicos. Sin embargo, estos presentan diversas desventajas como son su baja selectividad y alto consumo energético, ya que la mayoría operan por sobre los 200 °C. Además, la operación a dichas temperaturas reduce la estabilidad y vida útil del material debido al crecimiento de los granos del óxido metálico [1].

Los MOFs son redes metalo-orgánicas cristalinas de alta porosidad, fabricados a partir de núcleos metálicos y ligandos orgánicos. Los MOF destacan en su gran área superficial y potenciales sitios activos para interactuar con moléculas gaseosas. Sin embargo, su limitada conductividad limita su uso directo como sensores de gas. Con esta motivación, el presente trabajo tiene como objetivo la preparación de materiales híbridos MOF/SnO₂ [2], que es un material ampliamente usado en sensores de gas. La combinación de nanoestructuras del óxido metálico y MOF en base a Zr, permitirá obtener un material híbrido con mayor selectividad y funcional a temperatura cercanas al ambiente.

Se sintetizó el MOF UIO-66 obteniendo cristales de tamaño submicrométrico mediante síntesis solvotermal, el que fue caracterizado mediante DRX, SEM y FTIR para confirmar la remoción del solvente [3]. Posteriormente, se sintetizaron partículas de SnO₂ mediante síntesis hidrottermal en la superficie del MOF buscando obtener proporciones 10, 20 y 30% del óxido. Los resultados han mostrado un crecimiento inhomogéneo de nanoestructuras cristalinas de SnO₂ en la superficie del MOF, con una tendencia a tamaños mayores al aumentar la proporción del óxido metálico. La respuesta sensora de los materiales híbridos será probada en atmósfera oxidante y reductora para determinar la influencia de la composición en la respuesta sensora.

Acgradecimientos

Proyecto Anillo Functionalized surfaces for environmental detection (FunSED) ACT210059.

Referencias

- [1] Joshi, N. et al. (2018), doi.org/10.1007/s00604-018-2750-5
- [2] Jayaramulu, K. et al. (2021), doi.org/10.1039/D1TA03246A
- [3] Li, Z. et al. (2022), doi.org/10.1039/D1RA08376G

Fabricación de material híbrido Zr-MOF/compuestos de grafito laminares para su aplicación como sensor de gas

Amanda Pavez P.
*Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Cs. Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

Rodrigo Espinoza G.
*Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Cs. Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

Mónica Soler J.
*Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Cs. Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

Tamara Ávila G.
*Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Cs. Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

Ximena Villa B.
*Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Cs. Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

En Chile, las comunidades que viven en zonas de sacrificio ven afectada su salud por los contaminantes emergentes a los que están expuestos. Esto constituye un problema endémico que enfrentan las personas, por lo que es de suma relevancia el desarrollo de sistemas de detección eficientes para este tipo de contaminantes [1].

Los sensores de gas son dispositivos que cuando entran en contacto con contaminantes responden mediante perturbaciones físicas o químicas. En este proyecto, el enfoque es en sensores quimio-resistivos, cuyo mecanismo de detección se atribuye principalmente a la transferencia de electrones durante las reacciones superficiales de moléculas de gas en los materiales de detección, lo que provoca cambios en la resistividad. Para un sensado efectivo, se espera que la respuesta genere una perturbación nítida, junto con alta recuperación y selectividad al gas de interés [2,3].

Los MOFs son redes cristalinas de porosidad medible, diseñados a partir de iones metálicos y moléculas orgánicas, en la que la elección de sus componentes define su aplicación. Tienen como ventaja una gran área superficial para interactuar con moléculas de gas, sin embargo, en la mayoría de los casos son aislantes y por tanto poseen baja conductividad para la detección. Por esto se requiere de un material híbrido que permita una conductividad deseable para su uso como sensor de gas [1]. En este trabajo, se presentan los primeros resultados de síntesis del Zr-MOF estables térmicamente y en agua, por lo cual se espera sensar en condiciones de humedad a temperatura ambiente.

Para este trabajo el enfoque es en materiales híbridos de Zr-MOF con compuestos derivados del grafeno, ya que poseen excelentes propiedades mecánicas, térmicas y eléctricas, deseables para la detección. El óxido de grafeno (GO) y el óxido de grafeno reducido (rGO) son compuestos laminares de grafito similares al grafeno que presentan una estructura en capas, pero que tienen en su superficie algunos grupos funcionales. Se espera que la interacción entre el compuesto laminar de grafito y el Zr-MOF aumente la conductividad permitiendo su uso en el sensado de gases [4,5].

Entre los resultados a la fecha se tiene la síntesis solvotermal del Zr-MOF UiO-66 obteniendo cristales de tamaño entre 600-800 nm, con área superficial BET de aproximadamente 1700 m²/g, patrones de DRX acordes a su cristalinidad y una correcta remoción del solvente comprobado por FTIR. Además, se sintetiza GO y se caracteriza mediante SEM y Espectroscopia Raman. Junto con esto, se sintetiza material híbrido entre UiO-66 y óxido de grafeno, obteniéndose un recubrimiento inhomogéneo del MOF sobre el GO, por lo que se evalúa una activación del MOF y/o funcionalización de la superficie del GO para mejorar la

interacción.

Como última etapa del trabajo, se tiene prueba de la aplicación, para la cual se medirá en una cámara de gases los cambios de resistividad eléctrica del material al someterlo a contaminantes oxidantes y reductores.

Agradecimientos

Proyecto Anillo ACT 210059 “Functionalized surfaces for environmental detection (FunSED)”.

Referencias

- [1] Fang, X. et al. (2018), doi.org/10.1007/s40820-018-0218-0
- [2] Lustig, W. P. et al. (2017), doi.org/10.1039/C6CS00930A
- [3] Koo, W. T. et al. (2019), doi.org/.1016/j.chempr.2019.04.013
- [4] Jayaramulu, K. et al. (2021), doi.org/0.1039/D1TA03246A
- [5] Tung, T. T. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.carbon.2019.12.010

Modificación de la superficie de nanofibras de celulosa con moléculas curcuminoides para la fabricación de películas delgadas para la detección de contaminantes en agua

Deborah Marín, Nicole Parra, Andres Franco, Franck Quero, Mónica Soler
Departamento de Ingeniería Civil Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias y Matemáticas, Universidad de Chile

Actualmente se vive una grave crisis hídrica a nivel mundial donde los escasos recursos de agua disponibles han aumentado sus niveles de contaminación debido al cambio climático, el aumento de la población y el desarrollo económico e industrial, con lo que es cada vez más urgente contar con métodos rápidos y eficaces de detección y remoción de contaminantes [1]. Para la detección de contaminantes se requiere de materiales capaces de adsorber y/o interactuar con estos compuestos químicos, tales como membranas, nanopartículas o películas delgadas, entre otros. La celulosa es un polímero cuya estructura permite la modificación de su superficie, funcionalizándola con diferentes componentes según la aplicación deseada, y con el que se pueden confeccionar películas o filtros para el campo de tratamiento de aguas. Está reportada la obtención de nanofibras de celulosa oxidada con TEMPO (TOCNF) mediante la oxidación mediada por 2,2,6,6-tetrametilpiperidin-1-oxilo (TEMPO) que transforma de manera selectiva los grupos hidroxilos primarios C6 en grupos carboxílicos (COOH). A la vez, también se ha reportado la reacción de estos grupos con moléculas terminadas en grupos amina para formar amidas, usando carbodiimidias e hidroxisuccinimida (NHS) como catalizador y agente de amidación [2].

Los curcuminoides (CCM) son colorantes de la familia de la curcumina que, gracias a sus propiedades ópticas, actúan como sensores colorimétricos y fluorimétricos, mostrando un cambio de color o luminiscencia al interactuar con analitos [3]. La curcumina es un colorante estandarizado para la detección de iones de boro en aguas de riego, pero también existen publicaciones de curcuminoides que detectan otros iones, tanto metálicos o metaloides, o que detectan moléculas orgánicas como nitrofenoles en aguas [4]. La estructura de los curcuminoides contiene una cadena conjugada de carbonos con extremos terminales aromáticos, un grupo beta dicetona central el cual puede ser modificado para generar cadenas laterales con grupos funcionales capaces de reaccionar con los grupos superficiales de las TOCNF y formar enlaces covalentes. Por ello, los CCM representan un buen candidato para la detección de contaminantes en agua al integrarlo a un sustrato de celulosa para su aplicación.

Este trabajo describe la fabricación de películas delgadas compuestas por celulosa y CCM para la detección de contaminantes en agua. Para ello, se presenta la preparación de nanofibras de celulosa (TOCNF), la reacción de los grupos COOH con un curcuminóide con terminal hidrazida usando carbodiimida/NHS, para la formación de enlace covalente amida.

Las nanofibras de celulosa obtenidas TOCNF presentan un contenido de grupos carboxilatos de 1,6 mmol/g celulosa, contabilizados por titulación conductimétrica e identificados por FTIR. La reacción de las TOCNF con el CCM se ha caracterizado mediante diferentes técnicas tales como espectroscopía UV vis y de emisión fluorescente, FTIR, TGA, entre otras.

Agradecimientos

Proyecto ANID FONDECYT Regular 1201962, Proyecto FONDECYT Postdoctorado 3200610.

Referencias

- [1] Liu, J. et al. (2019), doi.org/10.1016/j.jhydrol.2019.124096
- [2] Krathumkhet, N. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.carbpol.2020.117536
- [3] Paden, R. R., et al. (2021), doi.org/10.1016/j.matpr.2020.07.374
- [4] Khorasani, M., et al. (2019), doi.org/10.1016/j.msec.2019.109792

Propolis as a source of active chemical compounds of interest to be encapsulated in lipid nano-carriers

Felipe Navarrete, Jose Ibarra, Fernanda Sotomayor

Drug Delivery Laboratory, Departamento de Ciencias y Tecnología Farmacéuticas, Universidad de Chile, Chile

Felipe Navarrete y Gabriela Valenzuela

Natural Products Laboratory, Departamento de Farmacología y Toxicología, Universidad de Chile, Chile

Javier Morales M

Drug Delivery Laboratory, Departamento de Ciencias y Tecnología Farmacéuticas, Universidad de Chile, Chile / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Chile / Center of New Drugs for Hypertension (CENDHY), Chile

Due to the method of production by bees, the chemical composition of propolis varies depending on the weather, genotype of bees and the surrounding flora. This composition is comprised mainly of phenolic acids (PA) and flavonoids and has been attributed many pharmacological properties [1]. Nevertheless, these active compounds have many issues with oral bioavailability, which may be improved by their nanoencapsulation [2].

This study was aimed at developing lipid nano-carriers (NCs) loaded with propolis, to determine the active chemical compounds, and analyzing how this is affected by the origin (and hence the chemical composition) of different samples.

To assess the concentration of the compounds of interest in Propolis, a global ethanolic extraction (EEG) was produced, overall, for the elimination of wax that come with this natural product [1]. Because each propolis is significantly different from each other, the chemical characterization was made with the method Folin-Ciocalteu (F-C), to know the percentage of PA in the sample. The sample from Melipilla, Región Metropolitana, Chile had a 44% and the sample from Lampa, Región Metropolitana, Chile had a 48%. These differences will have a later impact in the physicochemical properties of the NCs such as particle size, polydispersity index (Pdl), zeta potential (ZP) and the encapsulation efficiency (EE).

For the study, 2 types of nanostructured lipid carriers (NLC) were synthesized through homogenization of the lipidic compounds, later addition of milli-Q water and finally refrigeration. To the active compounds, EEGs were added 5 minutes before the addition of water. The NCs were characterized by dynamic light scattering (DLS) to determinate particle size, Pdl and ZP. The EE was determined by F-C.

The EE in all the samples was above 99%. The first NLC was made with Tween 80 (NLC1) and the second with oleic acid (NLC2). For the LCM was done with Tween 20. The results for the sample from Melipilla in the DLS and F-C, in the NLC1 were size $130,6\pm 3,1$, Pdl $0,046\pm 0,0$, ZP $-3,89\pm 0,1$ and a EE of 99,14%, in the NLC2 were size $172,1\pm 1,1$, Pdl $0,088\pm 0,0$, ZP $-9,39\pm 1,6$ and a EE of 99,51%, in the LCM were size $15,44\pm 0,2$, Pdl $0,225\pm 0,0$, ZP $-5,41\pm 1,0$ and a EE of 99,14%. For the sample from Lampa, in the NLC1 were size $197,6\pm 1,9$, Pdl $0,079\pm 0,0$, ZP $-11,47\pm 0,2$ and a EE of 99,59%, in the NLC2 were size $180,3\pm 2,0$, Pdl $0,096\pm 0,0$, ZP $-10,97\pm 0,4$ and a EE of 99,57%, for the LCM were size $15,17\pm 0,5$, Pdl $0,219\pm 0,0$, ZP $-6,78\pm 1,7$ and a EE of 99,42%.

This showed that propolis can be encapsulated in lipidic NCs, with a high EE, and acceptable parameters of size, Pdl and ZP. Further studies will delineate the identity of active molecules encapsulated and their release kinetics.

Acknowledgments

This work was funded by Regular FONDECYT Project 1231154, ANID/PIA/ACT192144, ANID/PCI/REDI170653, FONDAP Project 15130011, all granted by Chilean National Agency for Research and Development (ANID).

References

- [1] Castro C, et al. (2014), doi.org/10.1016/j.foodres.2014.08.050
- [2] Uner M. (2006) PMID: 16724531

Desarrollo de nanomateriales híbridos basados en nanopartículas de oro y MOF para mejorar la detección por fluorescencia de biomarcadores de la Enfermedad de Alzheimer

Mónica Soler

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile

Marcelo Kogan

Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago de Chile

Pablo Cabrera

Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago de Chile

Nicole Parra

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile

Catherine Araneda

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile / Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago de Chile

Debido a la necesidad de un diagnóstico precoz de la Enfermedad de Alzheimer, este trabajo consiste en el desarrollo de nanomateriales híbridos, basados en nanopartículas de oro (NPsAu) y redes metal orgánicas (en inglés Metal Organic Frameworks (MOF)), para mejorar la detección por fluorescencia de biomarcadores biológicos, como el péptido beta amiloide A β 1–42, y la presencia de iones metálicos (Mn⁺, Al³⁺, Cd²⁺, Zn²⁺, etc.).

Las nanorods de oro (NRsAu), se utilizan debido a su gran capacidad de amplificar señales mediante el efecto SEF. En estudios previos se ha logrado emplear NRsAu para mejorar la detección de A β -amiloides, empleando la sonda fluorescente CRANAD [1]. No obstante, el CRANAD no se encuentra directamente unido a la superficie del oro, por lo que se utiliza un bioreceptor peptídico, sin embargo, este bioreceptor no permite controlar la distancia entre el NRAu y el CRANAD para obtener el efecto SEF [1].

Esta investigación está enfocada principalmente en el desarrollo de un nanomateriales NRAu@MOF/CRANAD basado en el MOF Fe–MIL–88NH₂ formado por el ligando ácido 2-aminotereftálico (NH₂–BDC) e iones Fe³⁺, recubriendo la NRAu. Los MOFs a su vez cumplen el rol de poder ser funcionalizados con las sondas fluorescentes CRANAD, las cuales finalmente interaccionan con A β 1–42-amiloides, formando así nanomateriales que presentan emisión fluorescente intensificada en contacto con los A β -amiloides. En este nanomaterial, la distancia generada por el recubrimiento del MOF entre la NRAu y la sonda es controlada por las dimensiones del MOF. Por otra parte, este proyecto también pretende estudiar la capacidad de otro nanosistema, NRAu@MOF/CCM, donde el CRANAD es substituido por el ligando curcuminoide (CCM), para capturar iones metálicos como el Al³⁺ y Cd²⁺, entre otros, relacionados con la Enfermedad de Alzheimer [2,3], aprovechando la gran cantidad de sitios activos que presentan los MOF, su alta área superficial y su porosidad [4,5].

Este trabajo describe los avances en la formación del nanomaterial. Primero se presentará la síntesis del MOF Fe–MIL–88NH₂ [4] y su caracterización mediante espectroscopía FT–IR, difracción rayos X en polvo ((002)/9,0°, (101)/10,3° y (103)/16,5°), espectroscopía UV–vis (220 y 340 nm), Emisión (440 nm), TGA y SEM (~200 nm), entre otras. Posteriormente, también se presentarán los intentos de funcionalización de los MOFs con las sondas CRANAD y sus correspondientes CCMs (curcuminoides), y los estudios de interacción con A β 1–42-amiloides

e iones metálicos que se hayan realizado. Estos resultados se utilizan como base de comparación una vez se logre obtener el tamaño del MOF adecuado alrededor de la NRAu, lo que finalmente permitirá generar las estructuras NRAu@MOF/CRANAD y NRAu@MOF/CCM esperadas.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo financiero brindado por Proyectos ANID FONDECYT Regular 1211482, y FONDECYT Regular 1201962 y la Beca ANID de Doctorado Nacional ANID.

Referencias

- [1] Jara, P., A., et al.(2020), doi.org/10.3390/nano10040690
- [2] Pithadia, A., et al.(2012), doi.org/10.1016/j.cbpa.2012.01.016
- [3] Zhong, T., et al. (2022), doi.org/10.1039/D2AY00849A
- [4] Yin, L., et al. (2021), doi.org/10.1007/s00604-021-04710-7
- [5] Evans, J., et al. (2019), doi.org/10.1016/j.ccr.2018.10.002

Microstructure evolution of carbon films with increasing substrate temperature by using physical vapor deposition techniques

Sindry Torres

Facultad de Ciencias
Exactas, Ingeniería y
Agrimensura, Universidad
Nacional de Rosario –
Instituto de Física Rosario

Giuliano Frattini

Facultad de Ciencias
Exactas, Ingeniería y
Agrimensura, Universidad
Nacional de Rosario

Leonel I. Silva

INTEMA, Facultad de
Ingeniería, Universidad
Nacional de Mar del Plata

Bernardo J. Gómez

Facultad de Ciencias
Exactas, Ingeniería y
Agrimensura, Universidad
Nacional de Rosario –
Instituto de Física Rosario

Ariel Dobry

Facultad de Ciencias
Exactas, Ingeniería y
Agrimensura, Universidad
Nacional de Rosario –
Instituto de Física Rosario

We study how the substrate temperature influences the structural properties of carbon films deposited by PVD (physical vapor deposition) techniques. We adapted a heating system inside the deposition chamber, with temperatures up to 700 °C. Here we develop an experimental setup that allows us to obtain large films of the desired material on any substrate, with deposition times of the order of a minute. The characterization is based mainly on the analysis of the Raman spectra, where the evolution of the G and D peaks corresponding to the material in its amorphous phase is observed. With increasing substrate temperature, the sp^2 zones grow. A displacement to the right of the G peak and an increase in the I(D)/I(G) ratio is seen. At 700 °C a 2D zone at a frequency greater than 2000 cm^{-1} appears. Four Lorentzian-shaped bands are necessary to account for the peaks at this zone, whose centers correspond to different combinations of first order ones. This indicates that we have a highly disordered sample and we are at the transition zone from amorphous carbon to a graphene layer. The Tauc gap energy ratio decreases as temperature increases indicating that there is a graphitization of the sample. Transmission FTIR study is carried out at some of the intermediate temperatures, determining the type of bond at low frequencies. These bonds are consistent with the ones of the hydrogenated amorphous carbon (a-C:H) structure.

References

- [1] Chen Y N, Ma T B, Zhu P Z, Yue D C, Hu Y Z, Chen Z and Wang H 2014 Surface and Coatings Technology 258 901–907
- [2] Al-Ani S K J 1993 Journal of Electronics 75 1153–1163
- [3] Jarosiński L, et al. (2019), doi.org/10.1016/j.optmat.2018.12.041
- [4] Tauc J. (1968)., doi.org/10.1016/0025-5408(68)90023-8
- [5] Frattini G, et al. (2021), doi.org/10.1088/1402-4896/abe583
- [6] Epeloa J, et al. (2019), doi.org/10.1088/2053-1591/aaed7a
- [7] Ferrari, Andrea C., and John Robertson (2000), doi.org/10.1103/physrevb.61.14095
- [8] Sadezky A, et al. (2005), doi.org/10.1016/j.carbon.2005.02.018
- [9] Wu J B, et al. (2018), doi.org/10.1039/C6CS00915H
- [10] Ferrari, A. C. and Basko, D. M. (2013), doi.org/10.1038/nano.2013.46

Síntesis y caracterización de semimetales de Weyl

Rodolfo San Martín
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

Bárbara Arce
*Laboratorio de
Nanobiomateriales,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

Dana Gentil
*Laboratorio de
Nanobiomateriales,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

Paula Giraldo-Gallo
*Laboratorio de Materiales
Cuánticos, Departamento
de Física, Universidad de
los Andes, Colombia*

Carolina Parra
*Laboratorio de
Nanobiomateriales,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

Enmarcados en el área de materiales cuánticos, los semimetales de Weyl son materiales que poseen exóticas propiedades topológicas que se presentan como una plataforma para el estudio de nuevos fenómenos físicos. Entre sus posibilidades más destacables está que pueden ser usados como precursores de aislantes topológicos y para el desarrollo de nuevos dispositivos de información cuántica basados en la espintrónica [1].

En este trabajo presentamos nuestros resultados en la síntesis de dos de estos materiales, MoTe₂ y WTe₂, utilizando el método de transporte de vapor (CVT). Para esto se diseñó y construyó un sistema de sellado en vacío de polvos metálicos en tubos de cuarzo para obtener cristales de estos materiales en distintas fases, tamaños, espesores (de hasta pocos nanómetros) y purezas. Los parámetros de síntesis CVT empleados son los gradientes de temperatura, el tiempo de síntesis y la cantidad de portador (yodo). En conjunto a este trabajo se ha estudiado el efecto de la temperatura y relación peso entre los elementos durante el proceso de sinterización, dada la importancia de la formación de la aleación antes del proceso de síntesis. Se han explorado también, distintos tipos de sinterizaciones.

Los cristales de los semimetales obtenidos han sido caracterizados por microscopía de barrido electrónico (SEM, EDS) y espectroscopía Raman para estudiar su morfología, composición y estructura. En la actualidad se están estudiando las propiedades electrónicas locales de estos materiales por medio de microscopía de barrido túnel (LT-STM).

Agradecimientos

Agradecimientos a Fondecyt 1220715, el Fondecyt EQM200085, al fondecyt 1231487 y al anillo 192023.

Referencias

[1] Zhao, B., et al. (2020), doi.org/10.1002/adma.202000818

Characterization and electrochemical studies of $\text{LiFe}_x\text{Zn}_y\text{Mn}_{2-x-y}\text{O}_4$ ($x, y = 0.25$ or 0.75) cathode materials prepared by UA-TDN method

Javiera Vargas

*Departamento de Física,
Facultad de Ciencia,
Universidad de Santiago
de Chile, Estación
Central, Santiago, Chile.
//Centro del Desarrollo
de la Nanociencia y la
Nanotecnología,
CEDENNA, Estación
Central, Santiago, Chile.*

Loreto Troncoso

*Instituto de Materiales y
Proc. Termomecánicos,
Universidad Austral de
Chile, Valdivia Chile.*

Patricia Rivas

*Instituto de Materiales y
Proc. Termomecánicos,
Universidad Austral de
Chile, Valdivia Chile.*

Juan Escrig

*Departamento de Física,
Facultad de Ciencia,
Universidad de Santiago
de Chile, Estación
Central, Santiago, Chile.
// Centro del Desarrollo
de la Nanociencia y la
Nanotecnología,
CEDENNA, Estación
Central, Santiago, Chile.*

Daniela Alburquenque

*Departamento de Física,
Facultad de Ciencia,
Universidad de Santiago
de Chile, Estación
Central, Santiago, Chile.
// Centro del Desarrollo
de la Nanociencia y la
Nanotecnología,
CEDENNA, Estación
Central, Santiago, Chile.*

Renewable energy sources are becoming increasingly important due to our dependence on fossil fuels. However, these fossil fuel resources are limited, non-renewable, and highly polluting, contributing to climate change [1]. Among the cleanest and most sustainable energy sources are Lithium-Ion batteries, which emit zero CO_2 emissions [2]. In this study, we conducted a series of experiments to investigate the impact of iron and zinc substitution in spinel-structured manganese-based materials on their physicochemical and electrochemical properties.

The materials under examination are LiMn_2O_4 (LMO), $\text{LiFe}_{0.25}\text{Zn}_{0.25}\text{Mn}_{1.5}\text{O}_4$ (LFZMO 0.25-0.25), and $\text{LiFe}_{0.75}\text{Zn}_{0.25}\text{MnO}_4$ (LFZMO 0.75-0.25). These oxides were synthesized at 800°C using the ultrasound-assisted thermal decomposition of nitrates (UA-TDN) method, and subsequently characterized using various techniques. XRD data revealed that all the materials crystallize in the spinel structure $Fd\bar{3}m$ space group, with cell parameters of 8.2379 \AA (LMO), 8.33776 \AA (LFZMO 0.75-0.25) and 8.2556 \AA (LFZMO 0.25-0.25). Furthermore, no impurity peaks were detected in the XRD patterns of LFZMO 0.25-0.25 and LMO oxides.

The morphology characterization was conducted using SEM images, which revealed an irregular polyhedral morphology with sizes in a range approximately between 600–800 nm and a high degree of agglomeration [3]. The atomic ratios Fe/Mn, Zn/Mn, and Fe/Zn for the LFZMO 0.25-0.25 sample, as obtained from EDS measurements, were consistent with the stoichiometry of each material, considering the formula Mn/M cations $1.5/0.25 = 6$. Similarly, for the LMO oxide, the atomic percentage where also in agreement with the manganese content specified in the formula.

The electrochemical measurements provided evidence that the presence of Zn and Fe atoms in the LMO spinel structure, induces an electronic rearrangement that impacts the electrochemical responses. The contribution of each atom in the final oxide can be understood in terms of the Jahn-Teller effect within the crystalline structure [4]. Consequently, an electron withdrawing effect is observed when the iron content is increased to 0.75 in LFZMO 0.75-0.25, favoring lithium insertion. Conversely, a more electron-donating effect is observed with a low amount of iron, such as in LFZMO 0.25-0.25, compared to LMO, which hinders energetically favorable lithium insertion into the available positions within the crystalline structure.

The capacity of the LFZMO 0.25-0.25 cathode material (86%) is similar to that of LMO (69%).

However, the substituted samples demonstrate improved performance and stability during cycling compared to LMO, as the discharge capacity of LMO drops abruptly after 15 cycles. Based on the obtained results, it can be concluded that LFZMO 0.75-0.25 and LFZMO 0.25-0.25 oxides exhibit superior properties compared to the reference LMO. Therefore, they represent promising candidates for implementation as cathode materials in lithium-ion batteries.

Acknowledgments

The authors acknowledge financial support by Fondecyt 11230889 and 1200302, and Financiamiento Basal para Centros Científicos y Tecnológicos AFB220001.

References

- [1] Moses Jeremiah Barasa Kabeyi, Oludolapo Akanni Olanrewaju (2022), doi.org/10.3389/fenrg.2021.743114
- [2] Benedetto Nastasi, et al. (2021)., doi.org/10.1016/j.renene.2021.04.137
- [3] Axiang Li, et al. (2020), doi.org/10.1007/s11581-019-03432-4
- [4] Zhang, S. et al. (2023), doi.org/10.1002/adfm.202210731

Vidrio nanoestructurado como superficie autolimpiante hidrofóbica para módulos fotovoltaicos

Luciano Bravo
Yovanovich

María Saavedra

Jonathan Correa

Valeria del Campo
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso*

Natalia Hassan
*Núcleo milenio en
NanoBioFísica,
Universidad Tecnológica
Metropolitana, Santiago*

Rodrigo Segura
*Facultad de Ciencias,
Universidad de
Valparaíso, Valparaíso*

En la búsqueda de diversificar la matriz energética es conveniente construir plataformas solares en el Desierto de Atacama, debido a la alta exposición solar de 2000 kW/m^2 por año. Sin embargo, debido a las condiciones climatológicas del lugar, un problema importante a considerar es el ensuciamiento. El ensuciamiento es la deposición del material particulado presente en la atmósfera sobre las superficies expuestas. Esto ocasiona un impacto negativo en la eficiencia y confiabilidad de los módulos fotovoltaicos, ya que reduce la transmitancia de la luz incidente. Existen diferentes métodos de limpieza de los módulos fotovoltaicos, pero no son suficientes para remover el material particulado que se adhiere a la superficie expuesta y requieren un alto consumo de agua. Es por esto que buscamos evitar el ensuciamiento a través de la fabricación de un vidrio nanoestructurado que funcione como superficie autolimpiante cada vez que reciba la camanchaca (tipo de neblina costera que se genera el lugar) de las mañanas desérticas.

En este trabajo hemos estudiado el efecto de la nanoestructuración de vidrio con máscaras metálicas en sus propiedades de humectabilidad. Primero se depositaron películas delgadas de plata y oro, con distintos espesores nominales, sobre vidrio. Luego la muestra se somete a un proceso térmico donde las muestras pasan por un mecanismo de maduración de Ostwald [1]. Aquí es donde las nanopartículas de metal resultantes pueden ser utilizadas como nanomáscara para el grabado de vidrio con "reactive ion etching" (RIE). Posteriormente se elimina la nanomáscara metálica.

Nuestro resultado más destacado es el aumento en los ángulos de contacto en la nanoestructura del vidrio al utilizar películas calentadas a $300 \text{ }^\circ\text{C}$ en vez de 600°C como máscara, sin una pérdida considerable de transmitancia. Este hallazgo difiere de lo reportado en la literatura, donde se observan ángulos de contacto más bajos que los del vidrio original. Investigadores como Leem et al. [2] y Jaesung Son et al. [3], entre otros, han documentado estos resultados contrastantes. También encontramos que, a medida que aumenta el espesor depositado, los ángulos de contacto aumentan al emplear oro como máscara, pero disminuyen al usar plata.

Agradecimientos

Se agradece el apoyo del Proyecto ANID Fondecyt Regular #1210490
ANID-FONDAP-15110019 and ANID - Millennium Science Initiative Program - NNBP #
NCN2021_021.

Referencias

- [1] Infante D. et al. (2013), doi.org/10.1007/s12274-013-0320-z
- [2] Leem J. et al. (2012), doi.org/10.1364/OE.20.004056
- [3] Son J. et al. (2012), doi.org/10.1016/j.solmat.2011.10.011

Metales y grafeno como barreras de difusión de cobre en la metalización de contactos eléctricos de celdas solares

Jonathan Correa-Puerta

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Pablo Ferrada

*Centro de Desarrollo
Energético Antofagasta,
Universidad de
Antofagasta,
Antofagasta, Chile*

Natalia Hassan

*Programa Institucional de
Fomento a la
Investigación, Desarrollo
e Innovación, Universidad
Tecnológica
Metropolitana, Santiago,
Chile*

Ricardo Henríquez

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Valeria del Campo

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

La energía solar ha ganado cada vez más importancia como una solución a los desafíos energéticos y ambientales [1]. En este contexto, Chile se ha destacado por su potencial en este campo y los esfuerzos realizados para aprovecharlo [2,3]. En este contexto, el uso de un metal abundante en Chile, como es el cobre, es atractivo para reemplazar los contactos de plata en celdas solares [4]. Sin embargo, el cobre difunde en el silicio provocando pérdidas de corriente [5]. En este trabajo, se exploró el uso de nanomateriales como barreras de difusión de cobre en la metalización de contactos eléctricos de celdas solares [5,6].

Los materiales estudiados como barrera fueron níquel y grafeno. El estudio de difusión de cobre se realizó sobre silicio y nitruro de silicio. El grafeno fue crecido por evaporación química en fase de vapor y transferido al sustrato para luego depositar el cobre por deposición física de vapor o pulverización catódica. Asimismo, se investigó el uso de níquel como barrera de difusión y cobre como capa conductora, con el fin de comprender cómo este metal funciona como barrera de difusión. Las características topográficas se evaluaron mediante técnicas como la microscopía electrónica de barrido, mientras que las propiedades eléctricas se analizaron mediante el método de cuatro contactos.

Los resultados muestran que las capas de grafeno actúan de manera efectiva como barreras de difusión, logrando un buen contacto eléctrico entre el sustrato y el contacto de cobre, a pesar de su menor espesor en comparación con otros materiales depositados. Este resultado evidencia una mayor eficiencia en comparación con el níquel, el cual requiere mayor espesor para cumplir la misma función. Además, se observó una adecuada conductividad en los electrodos de cobre depositados, gracias a la baja resistencia de línea sobre las diferentes barreras de difusión empleadas.

Estos resultados permitirían reducir la dependencia de la plata en las tecnologías actuales de celdas solares de silicio, lo que reduce los costos de los paneles solares. De esta forma el uso de la nanotecnología busca promover la masificación de la energía solar fotovoltaica.

Agradecimientos

A los proyectos ANID/FONDECYT/11190239, ANID/FONDECYT/11190289, ANID/FONDECYT/1210490, ANID—Millennium Science Initiative Program—NNBP #NCN2021_021 “Millennium Nucleus in NanoBioPhysics”, CONICYT/FONDAP/15110019 “Solar Energy Research Center” SERC-Chile.

Referencias

- [1] Sheng Yuan. et al. (2017), doi.org/10.1039/c7cc02838e
- [2] Jonathan Correa-Puerta. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.solener.2021.10.003
- [3] Pablo Ferrada. et al. (2017), doi.org/10.1016/j.solener.2017.01.053
- [4] Achim Kraft (2015)
freidok.uni-freiburg.de/fedora/objects/freidok:10422/datastreams/FILE1/content
- [5] Achima Kraft. et al. (2015), doi.org/10.1016/j.egypro.2015.03.292
- [6] Carolina Parra. et al (2015), doi.org/10.1021/acsami.5b01248

Incorporation of water-soluble quantum dots and formation of wrinkled patterns on acrylic and silicone elastomers

Diego Guzmán
*Centro de
Nanotecnología Aplicada
Universidad Mayor,
Facultad de Ciencias,
Huechuraba, Santiago,
Chile*

Pedro Pablo Jofré
*Facultad de Química,
Pontificia Universidad
Católica de Chile, Macul,
Santiago, Chile.*

Carmen
González-Henríquez
*Universidad Tecnológica
Metropolitana, Facultad
de Ciencias Naturales,
Matemáticas y del Medio
Ambiente, Departamento
de Química, Macul,
Santiago, Chile.*

Juan
Rodríguez-Hernández
*Polymer Functionalization
Group, Instituto de
Ciencia y Tecnología de
Polímeros - Consejo
Superior de
Investigaciones
Científicas (ICTP - CSIC),
Departamento de
Química Macromolecular
Aplicada, Madrid, Spain*

Gloria Vera Rojas
*Centro de
Nanotecnología Aplicada
Universidad Mayor,
Facultad de Ciencias,
Huechuraba, Santiago,
Chile*

The need for multifunctional materials capable of operating with adaptive characteristics has grown in the last decade. Quantum dots (QDs) have been widely recognized as functional elements in polymer-based devices due to their excellent optical stability, size-dependent properties, significant biocompatibility, and their potential synthesis in environmentally friendly media [1]. The incorporation of QDs into elastomeric materials would enable the development of nanocomposites based on smart polymers with adjustable optical spectral parameters for a wide range of applications, including actuators and sensors [2].

The objective of this study is the fabrication and characterization of polymeric nanocomposites using QDs synthesized in an aqueous medium and incorporating them into a matrix of polydimethylsiloxane (PDMS) or polyacrylate 4910 (AR), which could open up a new range of optical devices and transducers.

CdTe-MSA QDs were synthesized using the one-pot method in an aqueous medium, controlling the size of the nanoparticles by varying the reflux time. Samples were prepared at two different time intervals, resulting in QDs named Q2 and Q9 (2 hours and 9 hours). The hydrophobicity of PDMS and AR was modified by ultraviolet ozone treatment (UVO), followed by functionalization with 3-Aminopropyltrimethoxysilane (APTMS 10% v/v). Finally, for the fabrication of the nanocomposites, the elastomers were immersed in the QD solution for 24 hours. The modified and unmodified elastomers were characterized using UV-visible absorbance spectroscopy, emission spectroscopy, diffuse reflectance spectroscopy (DRS), Raman spectroscopy, and scanning electron microscopy with energy-dispersive spectroscopy (SEM-EDS).

The obtained nanocomposites exhibited emission peaks similar to the QDs in solution, with peaks at 531.5-585.5 nm for PDMS nanocomposites and 537.0-597.5 nm for AR nanocomposites (Q2 and Q9, respectively). Additionally, the incorporation of QDs resulted in the formation of wrinkled patterns in both elastomers. The PDMS exhibited a swelling-induced mechanism with a width of 76.5 ± 7.7 and 104.6 ± 11.0 μm , while the AR showed a stretching/compression mechanical mechanism with a width of 127.5 ± 21.2 and 114.6 ± 30.5 μm . The binding of APTMS to the elastomers was confirmed through SEM-EDS and Raman spectroscopy, which showed the formation of an amide functional group ($1500\text{-}1570$ cm^{-1}). In conclusion, hydrophobic commercial elastomers were successfully modified with water-soluble CdTe-MSA QDs of different sizes.

References

- [1] Y. Guo and M. G. Moffitt (2007), doi.org/10.1021/cm7024119
- [2] C. A. Hanley, et. al. (2014), doi.org/10.1088/0964-1726/23/1/015009

Synthesis and characterization of copper nanoparticles supported on ferrocene functionalized chitosan with application in the thermal decomposition of solid composite propellants

Cristóbal
Hormazábal-Campos
*Department of Inorganic
Chemistry, Faculty of
Chemistry and
Pharmacy, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago*

María Belén Camarada
*Cluster of Excellence
livMatS @ FIT – Freiburg
Center for Interactive
Materials and Bioinspired
Technologies, University
of Freiburg, Freiburg,
Germany*

Composite solid propellants (CSPs) are materials responsible for propelling certain rockets primarily used in space exploration and military weaponry [1]. CSPs commonly comprise an inorganic oxidizing compound, a binder, a metallic fuel, and additives. The main characteristic of this type of propellant is that approximately 70% by mass corresponds to the oxidant ammonium perchlorate (AP), so one of the most critical objectives in the development of new CSP formulations is to improve the rate of thermal decomposition of AP using additives in the form of catalysts [2]. Since it has been demonstrated that metallic nanoparticles have beneficial properties compared to bulk materials for catalyzing AP decomposition reactions, the focus of research has recently been on the use and development of metallic nanoparticles for the fabrication of new nanostructured materials capable of improving CSP-based rocket propulsion [3].

This research work proposed the synthesis, characterization, and evaluation of novel copper nanoparticle catalysts supported on a ferrocene functionalized chitosan matrix (Chi-Fc[CuNPs]). With this catalyst, it was expected to decrease the critical temperatures of the AP decomposition process. This nanomaterial was obtained in two steps; firstly, the chitosan polymer was functionalized with ferrocene units, then copper ions were stabilized in the polymeric matrix, and copper nanoparticles were obtained by chemical reduction. Thus, the Chi-Fc[CuNPs] catalyst was characterized by techniques such as TGA, UV-Vis, FESEM, and XRD, evidencing the presence of spherical copper nanoparticles supported on the polymeric matrix.

To quantify the effect of the catalyst on the thermal decomposition of AP, the decrease in the low and high decomposition temperatures of AP (LTD and HTD, respectively) and the energy released in each of these processes were studied. Thermogravimetric analysis (TGA) and differential scanning calorimetry (DSC) studies were carried out. The HTD was lowered by 85 °C, while the decomposition curves indicate a rapid gas generation and energy release. A kinetic study of the decomposition reaction was also carried out, where it was determined that the catalyst was able to decrease the activation energy of the LTD and HTD processes.

Acknowledgments

Fondecyt Regular Project 1180023; FONDEQUIP Project EQM 150101.

References

- [1] Pasquale M. Sforza (2017), doi.org/10.1016/B978-0-12-809326-9.00012-9
- [2] Shalini Chaturvedi et al (2013), doi.org/10.1016/j.jscs.2011.05.009
- [3] Carlos Hortelano et al (2019), doi.org/10.1016/B978-0-12-813908-0.00009-5

Morphology study of perovskites and its influence in solar cell performance

Camilo Fernando Alegría
Núñez

*Universidad de
Concepción,
Concepción, Chile*

Noelia Benito Gomez

*Universidad de
Concepción,
Concepción, Chile*

In a perovskite solar cell (PSC), a perovskite layer in the order of the hundreds of nanometers acts as the light harvester, i.e., it is a material which absorbs UV-Visible radiation generating electrons in the conduction band. This layer is in between the electron and hole transport layers (ETLs and HTLs, respectively). Once in the conduction band, these electrons or carriers travel through a transport pathway from the absorber layer to both electrodes. Electron reabsorption through this pathway is a key component in power conversion efficiency (PCE), the less they are reabsorbed the higher PCE is. Thus, controlling perovskite formation and carefully choosing materials can suppress the carrier recombination in the absorber, facilitating carrier injection into the ETL, and keeping enough carrier extraction in the electrodes.

Much effort has been made in the development of PSCs due to their promising high PCE and low cost. Our recent work has shown that morphology, obtained from AFM images, can be changed controlling spin casting velocity, such that at lower speeds (500 RPM) we obtain clusters resembling labyrinths that decrease in size resulting in small circular structures. Moreover, roughness increases with spin velocity starting at values around $0.15 \mu\text{m}$ at 500 RPM, reaching a peak around 600-700 RPM with a value of $0.16 \mu\text{m}$, and then it decreases to around $0.13 \mu\text{m}$ at 900 RPM. This begs the question: How do these morphological changes contribute to PSC performance? The answer to this question is still open and there are few works on the matter [1]. It is for this reason that we have decided to explore this question.

Acknowledgments

This work has been made possible thanks to the financial support of ANID, FONDECYT 11180837.

References

[1] Y Zhang et al (2022), doi.org/10.1007/s13391-022-00343-x

Biosynthesis of nanoparticles by the antarctic thermophilic microorganism ID17 belonging to the Geobacillus genus

Sebastian
Muñoz-Ibacache
*Fundación Científica y
Cultural Biociencia*

Jenny Blamey A
*Facultad de Química y
Biología, Universidad de
Santiago de Chile,
Santiago, Chile*

The microbiological diversity and the adaptation mechanisms of Antarctic microorganisms lead us to search for biological alternatives in them that can replace existing chemical production processes. One of these processes is the biosynthesis of nanoparticles that, contrary to chemical synthesis, allows us to manufacture nanostructures with processes that are compatible with the environment, maintaining the ability to control the size, shape, and composition of the nanoparticles. In addition, the biosynthesized nanoparticles present a high bioactivity on their surface, without the need for additional steps. In this work, the capacity of the ID17 thermophilic bacterium, belonging to the genus *Geobacillus*, to synthesize silver and gold nanoparticles was verified.

The Antarctic ID17 bacterium was used for the synthesis of these nanoparticles, for which the cells were incubated in Au^{+3} and Ag^{+3} salts at 65 °C for 12 hours. The appearance of an intense purple and brown color respectively indicated the reduction of the metals. The elemental composition of the particles was determined by scanning electron microscopy coupled to an X-ray dispersive energy spectrometry analysis system. These analyzes showed the presence of Au^0 and Ag^0 in the nanoparticle sample. The chemical characterization of the nanoparticles surface was determined by FT-IR spectrometry. This analysis indicated the presence of primary amines, C-H and C-N bonds, amides, and aromatic groups. Through transmission electron microscopy it was possible to determine the shape and size of the nanoparticles, being the gold ones quasi-hexagonal in shape and an average size of 25 nm and the silver ones spherical in shape and an average size of 80 nm.

References

- [1] Roy et al (2022), doi.org/10.1155/2022/8184217
- [2] Dikshit et al (2021), doi.org/10.3390/catal11080902

Valentina Antonia Vergara
Uribe

*Universidad Austral de
Chile, Valdivia, Chile.*

Loreto del Pilar
Troncoso Aguilera
*Instituto de Materiales y
Procesos*

*Termomecánicos,
Universidad Austral de
Chile, Valdivia, Chile.*

Igor Osorio Roman
*Instituto de Ciencias
Químicas, Universidad
Austral de Chile, Valdivia,
Chile.*

Síntesis mecánica de perovskitas híbridas $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ con aplicación en concentradores solares de tercera generación

The study of $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbBr}_3$ hybrid perovskites is reported through mechanical synthesis using a planetary type ball mill. This type of organometallic halides is of great interest due to its photophysical properties and, in addition, it is one of the most stable compounds of this type. By varying certain parameters (ball size, revolutions per minute and time) in the mechanical synthesis, it was studied how the variation of the crystallographic characteristics influences the light absorption and emission behavior. Tungsten carbide balls with diameters of 5 and 10 mm were used. The revolutions per minute were selected according to the technical capabilities of the planetary mill. For the 5mm balls, 400, 800 and 1000 RPM were selected; On the other hand, with the 10 mm balls it was measured at 400 and 800 RPM. The ball/powder ratio chosen was 10:1. Extremely fine powders with a strong orange color were obtained. The analysis of the data of the diffraction patterns collected in a D2-Phaser diffractometer, Bruker showed that, with the 5mm balls, the mechanosynthesis is achieved in 60 min, while, for the 10 mm balls, it is achieved in 240 min. All samples were obtained in pure form and can be indexed in the Pnma space group (62) (ICSD code: 131970). The diffractograms showed that, as a function of the increase in the number of revolutions, the peaks become thinner, implying greater crystallinity, and they also move to the right, thus indicating that the lattice parameter obtained decreases as the RPM increase. The comparison based on the size of the beads shows the same behavior, decrease in the width of the peaks and shift to the right for samples synthesized with 5 mm beads. This implies that at higher rpm and with 5mm balls, the mechanical energy accumulated inside these halides is greater. Additionally, these hybrid perovskites were "spattered" with AuPd in order to obtain photographs by scanning electron microscopy, using the FESEM Auriga microscope, Zeiss. Using this technique, it was observed that the size of the grains decreases with increasing rpm, and the helical distortions caused by mechanosynthesis can be clearly seen. To study the photochemical behavior of these compounds, UV-visible spectrum and fluorescence spectroscopy analyzes were carried out to see the emission, absorption and lifetime of the samples. These hybrid perovskites have an absorption band at 365 nm and an emission around 600 nm. They also present three components of lifetimes, and a change was observed in the proportion of these, the short lifetime of 5 to 6 nanoseconds and the long one between 80 to 90 nanoseconds, they change their proportion depending on the synthesis condition, this could be related to the band gap of the crystal, crystal composition and/or the size of the perovskite.

Acknowledgments

We thank the Electron Microscopy Unit (UME) of the Universidad Austral de Chile for the SEM images.

References

- [1] Huang, X., et al. (2016), doi.org/10.1103/PhysRevB.94.195309
- [2] López, C., et al. (2020) , doi.org/10.1038/s41598-020-68085-0
- [3] Prochowicz, D., et al. (2015), doi.org/10.1039/C5TA04904K
- [4] González-Carrero, S., et al. (2018), doi.org/10.1039/C8TC01344F

Crecimiento de disulfuro de molibdeno nanocrystalino

Fernando Guzmán-Olivos
Universidad Católica del Norte

Martín Díaz-Kalasic
Universidad Católica del Norte

Rodrigo Espinoza-González
Universidad de Chile

Con el alto consumo de energía, ha habido un aumento en las investigaciones sobre dispositivos de almacenamiento de energía electroquímicos de próxima generación. Las capas 2D de los dicalcogenuros de metales de transición (TMDs) son una promesa en términos de escalabilidad y portabilidad para los dispositivos electrónicos. Han atraído fuertemente la atención debido a sus potenciales aplicaciones en la electrónica y dispositivos optoelectrónicos. Estas aplicaciones a gran escala dependen de la exploración de estos TMDs, por lo que se han desarrollado diversos tipos de métodos para la síntesis de estos materiales, tales como la pulverización catódica (sputtering) y la deposición química de vapor (CVD) siendo este último un método eficiente y escalable para sintetizar estas estructuras.

El control sobre el grosor, tamaño y área del crecimiento de capas de disulfuro de molibdeno (MoS_2) mediante CVD es crucial para la aplicación en dispositivos. Aquí, en esta investigación se presentan diferentes tipos de depósitos de MoS_2 sobre un sustrato de óxido de silicio sobre silicio (SiO_2/Si) con sus respectivas caracterizaciones. Se utilizaron dos tipos de configuraciones, un crecimiento de MoS_2 a partir del sputtering de una película ultradelgada de molibdeno y en base al crecimiento epitaxial del sistema CVD usando dos precursores en polvo, azufre y trióxido de molibdeno. Se realizaron varios ensayos de síntesis con distintitos parámetros, tanto el del depósito como el de la ubicación de los precursores y sustratos, permitiendo la optimización el crecimiento de MoS_2 [1, 2].

Las caracterizaciones utilizadas son la espectroscopia Raman, XRD, SEM, TEM, AFM y reflectancia difusa UV-Vis. La diferencias entre los picos de los espectros Raman, evidencian la presencia de un grosor de multicapas ($\Delta \sim 26.6 \text{ cm}^{-1}$) de MoS_2 en las muestras del sputtering y en particular, en las muestras en base a los polvos precursores, se tiene la presencia de una bicapa ($\Delta \sim 22.3 \text{ cm}^{-1}$) de MoS_2 . Por otro lado, de acuerdo con los espectros del UV-Vis, se observa que el band gap óptico (E_g) de las muestras varía desde 1.68 a 1.88 eV. De lo anterior mencionado, se verifican variados tipos de crecimiento de MoS_2 , implicando directamente en el número de capas crecidas [3].

Se presentan condiciones que permiten el desarrollo de potenciales investigaciones que profundicen en nuevas experimentaciones, esperando aplicaciones de estas estructuras en potenciales heterouniones, sensores, celdas solares, transistores de películas delgadas, entre otros dispositivos.

Agradecimientos

Los autores agradecen al proyectos fondecyt de iniciacion 11200564, al proyecto Fondecyt 1231474, al proyecto Fondequip EQM190027 y a la unidad de equipamiento científico MAINI-UCN.

Referencias

- [1] A. Singh et al (2019), doi.org/10.1016/j.jallcom.2018.12.230
- [2] P. P. Tummala et al (2022), doi.org/10.3390/nano12060973
- [3] S. Wang et al (2016), doi.org/10.1088/0957-4484/27/8/085604

Desarrollo de nanogeneradores triboeléctricos basados en polipirrol nanoestructurado como electrodo flexible

Felipe Olate-Moya

1) Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile; 2) IMPACT, Center of Interventional Medicine for Precision and Advanced Cellular Therapy, Santiago, Chile.

Francisco

Fernández-Gil
Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile / IMPACT, Center of Interventional Medicine for Precision and Advanced Cellular Therapy, Santiago, Chile.

Humberto Palza

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile / IMPACT, Center of Interventional Medicine for Precision and Advanced Cellular Therapy, Santiago, Chile.

Un nanogenerador triboeléctrico (TENG) es un dispositivo que puede generar electricidad a partir de la fricción o el contacto entre dos materiales con diferentes afinidades electrónicas [1]. Utiliza el efecto triboeléctrico, que es la generación de carga eléctrica debido a la separación de cargas entre los materiales al frotarse entre sí. El TENG convierte la energía mecánica en energía eléctrica, aprovechando el movimiento o la vibración para generar corriente eléctrica [1]. Es una tecnología prometedora para la alimentación de dispositivos electrónicos de bajo consumo energético y como fuente de energía autónoma en aplicaciones portátiles. Con el propósito de fabricar dispositivos más livianos, procesables y de bajo costo, se está desarrollando TENGs constituidos en su totalidad de polímeros plásticos [2]. El polipirrol (PPy) es un polímero intrínsecamente conductor que se ha utilizado en TENGs como material para los electrodos [3,4]. Su alta conductividad eléctrica y durabilidad lo hacen ideal para la transferencia eficiente de carga generada por el efecto triboeléctrico. Además, puede ser usado como recubrimiento en diferentes sustratos, lo que permite la fabricación de dispositivos TENG flexibles y adaptables a diversas superficies. Este trabajo muestra el desarrollo de TENGs basados en distintas películas poliméricas, empleando PPy nanoestructurado como componente electroconductor de los dispositivos. La configuración de los dispositivos TENG fabricados está diseñada para activarse en modo de contacto, para inducir la formación de cargas triboeléctricas mediante la aplicación de compresión mecánica sobre el dispositivo. Además del PPy, se empleó en distintas configuraciones de TENGs películas dieléctricas de polidimetilsiloxano (PDMS), polietileno (PE), policaprolactona (PCL), ésteres de celulosa mixto (MCE), poliuretano termoplástico (TPU) y poliimida (PI). Cabe destacar que se obtuvo recubrimientos de PPy nanoestructurado sobre los polímeros dieléctricos mediante polimerización in situ de pirrol a través de una reacción de oxidación utilizando cloruro de hierro(III). La topografía del recubrimiento de PPy consiste en agregados de nanopartículas esféricas de PPy de entre 200 y 500 nm. El PPy sintetizado posee una conductividad volumétrica de 0.17 S/m. Los dispositivos TENG desarrollados generaron voltajes entre 0.1 y 10 V, dependiendo de los polímeros empleados y configuración de sus componentes. Estos resultados se proyectan como una alternativa de bajo costo y libre de metales para generar energía eléctrica en dispositivos electrónicos de baja potencia, en particular, para aplicaciones en la alimentación de sensores biomecánicos portátiles para monitoreo de actividad fisiológica.

Agradecimientos

Los autores agradecen al proyecto FONDECYT Exploración 13220007 y Proyecto ANID-Basal IMPACT FB210024 por financiar esta investigación.

Referencias

- [1] Kim W G. et al. (2021), doi.org/10.1021/acsnano.0c09803
- [2] Wang J. et al. (2016), doi.org/10.1002/adfm.201504675
- [3] Cui S. et al. (2016), doi.org/10.1039/c6sc02562e
- [4] Zhang H. et al. (2022), doi.org/10.1021/acsanm.2c02357

Fabricación de esponjas multifuncionales de nanocelulosa-grafeno, inteligentes ligeras y con humectabilidad especial

Maria Alejandra Tamayo
Medina

Universidad de Chile

Jorge Eduardo
Sanchez Mella

*Universidad Tecnológica
Metropolitana*

Humberto Cristian
Palza Cordero

Universidad de Chile

El estudio de nuevos materiales porosos con humectabilidad especial y materiales inteligentes que pueden cambiar sus propiedades en respuesta a partir de diferentes estímulos específicos o el cambio de las condiciones en su entorno, como pasar una carga eléctrica a través de ellos o modificarse significativamente en un ambiente controlado, como el estrés o campos eléctricos, han sido un tema activo de investigación, evaluando la capacidad, velocidad y selectividad de absorción de aceites o microplásticos así como una respuesta eléctrica bajo cargas de flexión y torsión [1]. Debido a que el grafeno abarca muchas de las propiedades sobresalientes, la fabricación de macroestructuras 3D con dichas nanopartículas en forma de aerogeles, puede aumentar el rango de aplicabilidad como material inteligente. La formación de la estructura 3D, no solo impide el apilamiento de las láminas individuales y las propiedades intrínsecas del grafeno, como conductividad y área específica, sino que también forma una estructura con baja densidad y gran porosidad [2]. De esta manera, los aerogeles grafeno, han despertado un gran interés como absorbentes de contaminantes y sensores flexibles, debido a sus propiedades de baja densidad, gran conductividad eléctrica, alta área específica y excelente compresibilidad [3]. Así mismo, el biopolímero de nanocelulosa surgió recientemente como un material atractivo debido a su bajo costo y su naturaleza biodegradable y ecológica. Además, la excelente resistencia mecánica y las fracciones altamente reactivas de este nanomaterial permiten producir una variedad de compuestos funcionales mecánicamente robustos [4], incluidos hidrogeles/aerogeles [5]. Inspirándose en las propiedades intrínsecas de grafeno y las fibrillas de nanocelulosa, la incorporación de estos bloques de nanoconstrucción durante la técnica de autoensamblaje fue un enfoque prometedor para optimizar las propiedades fisicoquímicas y la funcionalidad del monolito poroso interconectado para aplicaciones multifuncionales, ya que el grafeno pudo formar una variedad de enlaces e interacciones con este nanorrelleno, como de repulsión/atracción electrostática y enlaces de hidrógeno. Los resultados experimentales mostraron que el material poroso de esponja a base de grafeno y celulosa pudo utilizarse como un sensor flexible multifuncional, siendo un material nanocompuesto prometedor. La incorporación de celulosa en el proceso, mejoró la química superficial y estabilidad. El comportamiento de humectación de los materiales al cambiar de materiales hidrofóbicos al agua a superhidrofóbicos y su porosidad, permitió la retención de contaminantes pudiendo ser usados para la recuperación de microplásticos y aceites. La UREA fue un elemento importante en el autoensamblaje de las esponjas, dado que promovió la fuerza de interacción química entre los enlaces de hidrógeno, pues esta fue la principal fuerza impulsora para la formación de las

esponjas.

Referencias

- [1] Lakhtakia, A., & Martín-Palma, R. J. (2013), doi.org/10.1016/C2011-0-06814-X
- [2] Meilan Pan., et al (2018), doi.org/10.1021/acs.est.7b02795
- [3] Cao J. et al (2018), doi.org/10.3390/polym10121393
- [4] Kabiri, et al (2014), doi.org/10.1007/s10570-014-0366-4
- [5] A. Javadi et al (2013), DOI , doi.org/10.1021/am400171y

Síntesis de nanocelulosa hidrofóbica vía microondas en un solo paso, utilizando un solvente eutéctico profundo.

Mayte Briones Salazar

*Millenium Institute on
Green Ammonia as
Energy Vector*

Mónica Ortiz Oliva

*Millenium Institute on
Green Ammonia as
Energy Vector*

Paulina Pavez

*Guerrero
Facultad de Química y de
Farmacia, Pontificia
Universidad Católica de
Chile*

Mauricio Alejandro

*Isaacs Casanova
Millenium Institute on
Green Ammonia as
Energy Vector*

En la búsqueda de procesos químicos que minimicen el impacto en el medio ambiente, el uso de celulosa como materia prima surge como alternativa verde para el desarrollo de productos que actualmente provienen de la química del petróleo, ya que es el biopolímero más abundante en la tierra y posee ventajas como el ser renovable, biodegradable, de bajo costo y baja toxicidad [1].

Dentro de los derivados de la celulosa se encuentra la nanocelulosa (NC), que corresponde al producto de la desintegración de los dominios amorfos que componen a la celulosa. Una característica de este derivado es su alta hidrofilia [2], lo cual, dependiendo el uso del nanomaterial puede ser modificado al funcionalizar su superficie.

En general la obtención de nanocelulosa hidrofóbica consiste en dos pasos; En primer lugar, una hidrólisis ácida para la obtención de nanocelulosa cristalina (CNC) (la cual utiliza ácidos minerales como H_2SO_4 o HCl) [3] y luego la reacción de acetilación.

Como alternativa a los solventes mencionados en el marco de la química verde, surge el uso de solventes eutécticos profundos (DES), ya que estos poseen síntesis más simples, menores costos de producción y presentan gran biodegradabilidad [4].

A su vez el uso de microondas se presenta como alternativa a las fuentes de calor convencionales debido a que posee las ventajas de reducir el tiempo de reacción (pasando de horas a minutos), genera calor uniforme, puede mejorar la eficiencia de una reacción y se ven minimizadas las pérdidas de calor por conducción del material [5].

Es por esto que en este trabajo se llevó a cabo la síntesis de CNC hidrofóbica en un solo paso, utilizando DES Cloruro de colina: Ácido p-toluensulfónico (ChCl:HTOS) como solvente-catalizador de la reacción y anhídrido acético como agente acetilante, vía microondas, estudiando las variables tiempo y temperatura.

El producto de la reacción fue caracterizado por Espectroscopía Infrarrojo por Transformada de Fourier (FT-IR), en donde se observó un nuevo peak en 1750 cm^{-1} aproximadamente el cual corresponde al carbono carbonílico stretching del éster formado. También un nuevo en peak 1365 cm^{-1} que da cuenta del grupo CH_3 en el plano bending, y un peak en 1214 cm^{-1} correspondiente al enlace C-O stretching del éster.

También se analizó el grado de sustitución (GS) el cual posee un valor máximo de 3, puesto que por cada unidad celulósica existen 3 grupos hidroxilos. Así a través de una normalización de áreas de absorbancia se obtuvieron GS igual a 1, 2 y 3.

Para conocer el carácter hidrofóbico del sólido obtenido se analizó el ángulo de contacto de agua, en donde se observó que a medida que aumenta el GS, aumenta el ángulo formado

pasando de 28° para CNC a 67,68° para CNC hidrofóbica con GS igual a 3. Finalmente, el estudio morfológico de las nanopartículas obtenidas fue analizado mediante Microscopía electrónica de barrido de emisión de campo (FESEM) y la estabilidad térmica a través de Análisis Termogravimétrico (TGA)

Agradecimientos

Proyecto Acelerador Ciencia 2030 20CEIN2-142103, Millenium Institute on Green Ammonia as Energy Vector- MIGA ICN2021_023, FONDECYT 1221179, FONDEQUIP EQM 150020 y 150101, FONDECYT 1220416.

Referencias

- [1] Lakovaara, M et al (2021), doi.org/10.1007/s10570-021-03863-1
- [2] Taib, M et al (2018), doi.org/10.1007/s12221-018-7591-z
- [3] Randhawa, A et al (2022), doi.org/10.3390/app12147090.
- [4] Bajpai, P et al (2021), doi.org/10.1007/978-981-16-4013-1
- [5] Das, A et al (2021), doi.org/10.1016/b978-0-12-822895-1.00005-9

Síntesis y caracterización de sistema de líquidos iónicos ácidos de Bronsted soportados en nanopartículas magnéticas para catálisis ácida

Ignacio Astorquiza
Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile, Macul, Santiago, Chile

Paulina Pavez
Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile.

Mauricio Isaacs
Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile, Macul, Santiago, Chile; Research Center for Nanotechnology and Advanced Materials CIEN-UC, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile; UC-Energy Research Center, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile.

Ricardo Tapia
Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile.

In recent years, Brønsted acid ionic liquids (BAILs) have been used to obtain crystalline nanocellulose (CNC) by acid hydrolysis of cellulose. However, the most used methodologies to recycle the ionic liquid (IL) consume a lot of time and energy, generating an unsustainable and uneconomical process. In this context, the development of more sustainable and efficient systems is a challenge to obtain the nanomaterial. In this work, two magnetic acid catalytic systems are developed, which are composed of an IL supported on magnetite nanoparticles (Fe_3O_4) denoted as H1IL and H2IL. For the characterization of the system, a morphological and particle size monitoring is carried out by field emission scanning electron microscopy (FESEM) for both, the magnetite nanoparticles, obtaining sphere-shaped particles with an average diameter 30 nm, and the supported catalytic system. As a way of characterizing the catalyst and its respective precursors, Fourier Transform Infrared Spectroscopy (FT-IR), Nuclear Magnetic Resonance (^1H and ^{13}C NMR) and Raman Spectroscopy were performed.

The H1IL and H2IL catalytic systems are used as catalysts to obtain CNC through acid hydrolysis of commercial cellulose, obtaining yields of over 40% of the nanomaterial. The reaction is carried out for 1 hour at 40°C with the catalytic system at 10% w/w and the IL 1-butyl-3-methylimidazolium chloride (BMIMCl) is used as reaction medium in a 30:1 ratio by weight in relation to cellulose. Interestingly, once the hydrolysis reaction is complete, the catalyst is easily recovered by applying a magnet. Approximately 92% of the magnetic system was recovered. Finally, the yield ratio of CNC obtained in relation to the IL structure that compose the catalytic systems developed in this work will be discussed. In this way, it is expected to obtain a more sustainable CNC obtaining process.

Acknowledgments

The authors would like to express their gratitude for the financial support to FONDECYT 1220416, FONDECYT 1221179 and the Millennium Institute on Green Ammonia as an Energy Vector ICN2021_023.

References

- [1] Qiang Zhang et al (2011), doi.org/10.1039/c1gc16031a
- [2] Haimei Xu et al (2015), doi.org/10.1016/j.molcata.2015.09.020
- [3] María G. Paredes et al (2022), doi.org/10.1016/j.molliq.2022.120422

Effect of the nature of the alkaline earth ion on the photoactivity of composites derived from niobium pentoxide

Andrés
Barrientos-Herrera
*Facultad de Química y
Biología, Universidad de
Santiago de Chile; Centro
de Nanociencia y
Nanotecnología,
CEDENNA, Santiago,
Chile*

Fabián Araneda
Martínez
*Centro de Nanociencia y
Nanotecnología,
CEDENNA, Santiago,
Chile*

Marlen
Gutiérrez-Cutiño
*Facultad de Química y
Biología, Universidad de
Santiago de Chile; Centro
de Nanociencia y
Nanotecnología,
CEDENNA, Santiago,
Chile*

Diego Venegas-Yazigi
*Facultad de Química y
Biología, Universidad de
Santiago de Chile; Centro
de Nanociencia y
Nanotecnología,
CEDENNA, Santiago,
Chile*

Niobium pentoxide (Nb_2O_5) is a polymorphic ceramic classified as a semiconductor due to its great dielectric permittivity; one of the various uses that it can be given is in photocatalysis [1].

This photo-catalyst has several crystalline phases, depending on the temperature and pressure at which it is synthesized, highlighting the TT (pseudo-hexagonal), T (orthorhombic), and H (monoclinic) phases.

The different composites of Nb_2O_5 with alkaline earth cations, such as Ca, Sr, and Ba, were studied through solvothermal synthesis using PEG (polyethyleneglycol) as a guiding agent. All the samples obtained were characterized by SEM-EDS, and X-ray diffraction, to verify the morphology and composition of the synthesized photo-catalysts.

The photocatalytic activity was studied in gentian violet, achieving results between 50% and 99 % in 240 min for the photodegradation of the contaminant.

It was possible to improve the photocatalytic performance of Nb_2O_5 with the new composites obtained with alkaline earth cations, giving rise to new opportunities for studying if it is effective on other organic pollutants.

Acknowledgments

The authors acknowledge Financiamiento Basal AFB220001, CEDENNA.

References

[1] Rani, R. A. et al. (2014), doi.org/10.1039/C4TA02561J

Síntesis de nanoesferas de oro funcionalizadas con PEG, péptido D1 y quitosano para optimizar la administración intranasal.

Daniela Ramón
Concepción
*Departamentos de
Química Farmacológica y
Toxicológica, y Ciencias y
Tecnología Farmacéutica,
Facultad de Ciencias
Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile,
Chile*

Freddys Sanchez
*Departamentos de
Química Farmacológica y
Toxicológica, Facultad de
Ciencias Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile,
Chile*

Felipe Oyarzún
*Departamentos de
Ciencias y Tecnología
Farmacéutica, Facultad
de Ciencias Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile,
Chile*

Marcelo Kogan
*Departamentos de
Química Farmacológica y
Toxicológica, Facultad de
Ciencias Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile,
Chile*

Introducción: Los métodos de diagnóstico y tratamiento para las enfermedades del sistema nervioso central (SNC), fallan y/o son descartados para su uso clínico debido a la baja llegada de los xenobióticos al cerebro. Las múltiples posibilidades de funcionalización de las nanopartículas de oro (AuNP) posibilitan su direccionamiento activo para lograr acumulación en los sitios dianas para aplicaciones biomédicas. Las AuNP pueden ser recubiertas con polietilenglicol (PEG), el cual le confiere una mayor estabilidad en solución por impedimento estérico y, además, permite la conjugación con otras moléculas como el péptido D1. Este péptido se ha estudiado como posible candidato para el direccionamiento de nanosistemas enfocados a la enfermedad de Alzheimer y en nuestro laboratorio se ha demostrado que AuNP funcionalizadas con el péptido D1, administradas por vía intravenosa, selectivamente reconocen, evitan la agregación y promueven la desagregación de placas beta-amiloide. No obstante, la llegada del nanosistema fue solo del 0.05 % respecto a la dosis inyectada [1]. La administración intranasal es una ruta potencial hacia el SNC que permitiría una mayor concentración de las formulaciones nanoparticuladas en el sitio diana [2]. La funcionalización con quitosano conferiría capacidades mucoadhesivas al nanosistema, aumentando el tiempo de residencia en la cavidad nasal, optimizando la llegada de una mayor concentración del nanoconstructo al cerebro [3].

Objetivo: Sintetizar y caracterizar nanoesferas de oro (AuNE) funcionalizadas con PEG, péptido D1 y recubiertas con quitosano.

Metodología: Primeramente, se realizó la síntesis de AuNE de 30 nm, mediante un protocolo modificado de Turkevich/Frens. Posteriormente se funcionalizaron con un PEG asimétrico con un grupo tiol (SH) en un extremo, y un grupo ácido carboxílico (COOH) en el otro. Luego se funcionalizó con el péptido D1 a través del uso de los reactivos EDC/NHS para generar un enlace amida entre el extremo COOH del PEG y amino del péptido D1. Como último paso se recubrieron las nanopartículas con el quitosano siguiendo una metodología lbi (layer by layer), aprovechando las cargas opuestas del nanosistema y el quitosano para ensamblar estos componentes. Se realizó la caracterización del nanosistema en cada etapa de síntesis, mediante espectroscopía UV-Vis, DLS, potencial Z, SEM y NanoSight. Este nanosistema, luego de realizar los ensayos celulares correspondientes, permitirá realizar la administración por vía intranasal en un modelo animal para el desarrollo de una potencial herramienta terapéutica en enfermedad Alzheimer.

Conclusión: El nanosistema propuesto se logró sintetizar y caracterizar correctamente con resultados reproducibles. Se realizaron estudios de estabilidad observándose que el nanosistema se mantuvo estable en solución acuosa en el tiempo, almacenado a 4 °C y a 37 °C protegido de la luz.

Agradecimientos

Agradecimientos: fondecyt 1211482, fondap 15130011, anillo act 210068.

Referencias

- [1] Morales-Zavala F, et al. (2021), doi.org/ 10.1039/d0bm01825b
- [2] Gallardo-Toledo E T, et al. (2020), doi.org/10.1016/j.ijpharm.2020.119957
- [3] Muñoz-Cernada A, et al. (2013), api.semanticscholar.org/CorpusID:45825431

Tomas Byrne Prudente

Julieta Puig

Cristina Elena Hoppe

Facundo Altuna

¹*Institute of Materials
Science and Technology
(INTEMA), National
Research*

*Council-National
University of Mar del
Plata*

*(CONICET-UNMdP), Av.
Colon 10850, Mar del
Plata, Argentina.*

²*School of Engineering –
National University of Mar
del Plata.*

Design and development of self-healing polymeric materials functionalized with carbon nanotubes for cutting-edge applications

Strategies to obtain self-healing polymers have rapidly increased and diversified in the last decades, in response to the need to improve the properties of components, extending their service life and reducing the amount of waste [1]. In this context, interest in "vitrimers", a type of self-healing thermosetting polymers, has grown exponentially since their initial publication by Leibler et al [2]. These materials take advantage of exchange reactions between their dynamic bonds to achieve reparation. The exchange reactions modify the topology of the polymeric network, although they maintain the same crosslink density throughout the process, at least theoretically. In the case of epoxy vitrimers, the reaction of epoxy groups with a carboxylic acid yields β -hydroxyesters. These groups can be mutually exchanged through thermally activated transesterification reactions (between an ester of one chain and the -OH of another chain) in the presence of a suitable catalyst [2-4]. Epoxy vitrimers share some characteristics with conventional epoxy networks, such as good mechanical properties and solvent resistance, but with the advantage of being self-healing, reprocessible and recyclable. In this work, we synthesized epoxy vitrimers with graphene oxide (GO), with the aim of endowing the material with the possibility of remotely activating the healing mechanism through irradiation with visible or infrared light, thanks to the photothermal effect of the GO. This methodology allows to achieve the reparation by locally heating only the damaged part of the material, saving energy and preventing an eventual material degradation.

A vitrimeric matrix was synthesized from a commercial epoxy resin based on diglycidyl ether of bisphenol A (DGEBA), glutaric acid (GA) was used as crosslinking agent in stoichiometric ratio and 1-methylimidazole (1MI) at 5% in equivalents with epoxy was used as catalyst. The curing process consisted of 1 hour at 100°C, followed by 2 hours at 160°C. A modified vitrimer was developed by incorporating GO from the initial formulation (0.1% w/w) and sonicated for 20 min. The T_g of the crosslinked virgin matrix, determined by DSC, was close to 53°C (onset). The use of transmission optical microscopy allowed confirming the absence of macroscopic aggregates of graphene oxide in the vitrimeric matrix. Self-healing testing of the modified system was made by a simple way cut on the surface of the sample. At the same time, it was demonstrated that it is possible to join (weld) two specimens of the material together, by direct contact between them under thermocompression. Mechanical tests, characterization by scanning and transmission electron microscopy, stress relaxation and self-healing by photothermia are in progress. As a future synthesis, the impregnation of GO on a fine powder

of the vitrimer is proposed with the idea of achieving adhesion between powder particles from the heating induced by the photothermal effect generated by NIR irradiation.

Acknowledgments

Al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET).

References

- [1] Van Zee N. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.progpolymsci.2020.101233
- [2] Montarnal D. et al. (2011), doi.org/10.1126/science.1212648
- [3] Altuna F.I. et al. (2016), doi.org/10.1039/c6ra18010h
- [4] Altuna F.I. et al. (2019), doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2019.01.045

Crecimiento de nanocables de permaloy utilizando especies perdidas en una fuente de condensación en fase gaseosa

Christian Orellana
*Centro Científico
Tecnológico de
Valparaíso - CCTVal,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Claudio
Gonzalez-Fuentes
*Facultad de Física,
Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

María Abellan
*Centro Científico
Tecnológico de
Valparaíso - CCTVal,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Rodrigo Segura
*Instituto de Química y
Bioquímica, Facultad de
Ciencias, Universidad de
Valparaíso, Valparaíso,
Chile*

Christian Romero
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

En las últimas décadas se ha observado un creciente interés por el estudio de las nanopartículas metálicas Nps, debido a sus notables propiedades que son fuertemente dependientes de su tamaño con relación al volumen. El interés también se extiende a las nanoestructuras en especial las magnéticas de 1-D como nano fibras, nano alambres que presentan singulares propiedades y eventuales aplicaciones en spintronica, sensores, micromecánicas y medicina [1]. Por otra parte, entre los diversos materiales magnéticos usados en la síntesis de nanopartículas y nanoestructuras destaca el Permaloy, una aleación con un contenido aproximado 80% níquel y 20% hierro (Ni₈₀Fe₂₀), pues es un material estándar elegidos para el estudio de nuevas estructuras en nanomagnetismo [2]. En la literatura se han reportado variadas formas crecimiento de Nps y nanoestructuras, destacándose el método de condensación en fase gaseosa[3]. Sin embargo, por esta vía hay escasos reportes del crecimiento de nanoestructuras unidimensionales (1-D). El método se basa en la deposición de vapores metálicos sobresaturado y enfriado por una corriente de gas inerte usualmente argón, que lo conduce a la condensación y formación de cúmulos o Nps. Por otra parte, uno de los desafíos por soslayar del método de gas agregación es aumentar el rendimiento en la producción de Nps que es típicamente del orden de $1 \mu\text{g h}^{-1}$, suficientes para la investigación, pero no útil en otras áreas de desarrollo tecnológico e industrial [4]. No obstante, hay esfuerzo en comprender el flujo de especies en cada una de las secciones del sistema y proponer mejoras para aumentar su eficiencia. En este sentido, la cámara de agregación ha recibido gran atención, principalmente debido a las pérdidas de especies que ocurren en su interior. Se ha demostrado que la pérdida de cúmulos es producida por la influencia de la aerodinámica del gas de arrastre dentro de la cámara de agregación [5]. El presente trabajo se consiguió crecer nanoestructuras de permaloy sobre substrato de silicio por el método de gas agregación, mediante un conjunto adecuada de parámetros de síntesis y siguiendo una singular estrategia, consistente en aprovechar las especies perdidas en la cámara de agregación producto de las zonas de atrapamiento. Así se ubicaron los substratos en el interior de la cámara. De esta forma se logró cultivar nano-cadenas agrupadas en microfibras las cuales presentan una orientación preferencial de crecimiento. Las nanoestructuras obtenidas consisten en cadenas nanométricas que se agrupan en microfibras altamente orientadas. Estas nano estructuras tienen longitudes del orden de los micrómetros y diámetros que varían entre 500 y 20 nanómetros ver figura 1 y 2. Las nano estructuras fueron caracterizadas por microscopía electrónica de barrido y, difractorio de incidencia rasante y medidas de respuesta magnética por magnetómetros de gradiente alterno (AGM).

Agradecimientos

Este trabajo ha sido apoyado por ANID PIA/APOYO AFB180002.

Referencias

- [1] S. Neusser et al (2009), doi.org/10.1002/adma.200900809
- [2] M. C. Giordano et al (2021), doi.org/10.1039/d1nr02291a
- [3] V. N. Popok et al [2020], doi.org/10.3390/applnano1010004
- [4] G. Sanzone et al (2021), doi.org/10.1063/5.0028854
- [5] J. Kousal et al (2018), doi.org/10.1039/c8nr06155f

Cristopher Heyser
*Universidad de la
Frontera*

Andrés Ramírez
*Universidad de la
Frontera*

Emilio Navarrete
*Universidad de la
Frontera*

Rodrigo Henríquez
*Pontificia Universidad
Católica de Valparaíso*

Paula Grez
*Pontificia Universidad
Católica de Valparaíso*

Non-enzymatic glucose sensor from NiO nanostructures synthesized sonoelectrochemically. Synthesis, characterization and determination of analytical merit figures

La Sonoelectroquímica es una técnica que permite estudiar los efectos de la radiación ultrasónica (ultrasonido) en sistemas electroquímicos. Las principales ventajas de utilizar esta técnica en sistemas electroquímicos es que: mejora la activación de la superficie del electrodo, es limpio, económico y requiere tiempos de síntesis cortos. En este contexto, este estudio utiliza sonoelectroquímica en la producción de nanoestructuras de óxido de níquel, las cuales se proponen como un material capaz de detectar de forma no enzimática la molécula de glucosa. Para esto, las nanoestructuras de óxido de níquel se han sintetizado electroquímicamente mediante anodización asistida por ultrasonidos de láminas de níquel en una solución de etilenglicol, cloruro de amonio (0,5% en peso de NH_4Cl) y 5,0% en peso de H_2O . Los experimentos de anodización se llevaron a cabo utilizando ondas ultrasónicas (37 kHz, 60 W) a diferentes potenciales (50 y 75 V), diferentes temperaturas (50 °C y 75 °C) y a 900 s como tiempo de anodización. El proceso anterior se llevó a cabo usando un sistema de dos electrodos. Las nanoestructuras de NiO obtenidas se analizaron morfológicamente mediante SEM, la estructura cristalina mediante XRD y la composición química mediante EDX. Posteriormente, se estudió la actividad electrocatalítica del NiO nanoestructurado en la reacción de oxidación de la glucosa mediante voltametría de barrido lineal (LSV). A partir de esta técnica, fue posible determinar los parámetros cinéticos que nos permitieron proponer un mecanismo por el cual se lleva a cabo el proceso de oxidación de la glucosa. Además, se determinaron: la sensibilidad ($206.9 \mu\text{AmM}^{-1}\text{cm}^{-2}$), el límite de detección (LOD, $1.16 \mu\text{M}$), el límite de cuantificación (LOQ, $3.87 \mu\text{M}$), el rango de trabajo lineal del electrodo propuesto ($0.1 \text{ mM} \leq [\text{Glucosa}] \leq 10 \text{ mM}$) y el tiempo de respuesta (6 s). Finalmente, se estableció que el electrodo de NiO nanoestructurado no responde a diferentes interferencias, como el ácido ascórbico, el ácido úrico y a la dopamina. A la luz de los resultados experimentales, se puede concluir que el electrodo propuesto en este estudio es un buen candidato para ser utilizado como un sensor de glucosa amperométrico no enzimático.

Agradecimientos

El Dr. Christopher Heyser agradece el apoyo financiero de Fondecyt-Chile (Proyecto Postdoctoral N ° 3160474) y al proyecto DIUFRO DI23-0069 (2023).

Propiedades mecánicas multiescala de membranas electrohiladas a base de PVA gelatina de salmón y quitosano

Benjamin Schleyer-Thiers

*Universidad Técnica
Federico Santa María,
Núcleo Milenio
Nanobiofísica, Centro de
Biotecnología USM*

Sebastian Veliz-Rojas

*Universidad Técnica
Federico Santa María,
Núcleo Milenio
Nanobiofísica, Centro de
Biotecnología USM*

Catalina

Navarrete-Vera, Martin
Chavarria-Vidal

*Universidad Técnica
Federico Santa María,
Centro de Biotecnología
USM*

Constanza

Rodriguez-Alonso
*Universidad Técnica
Federico Santa María,
Centro de Biotecnología
USM*

Tomas P. Corrales

*Universidad Técnica
Federico Santa María,
Núcleo Milenio
Nanobiofísica, Centro de
Biotecnología USM*

El uso de nanobiomateriales ha significado un gran avance en distintas áreas de la ciencia y la industria, en la ingeniería de tejidos se utilizan estos materiales en la fabricación de andamios que imitan la matriz extracelular para el crecimiento de tejidos in vitro. Al utilizar métodos de fabricación basados en soluciones poliméricas, se facilita la mezcla de varios componentes biocompatibles, con el fin de asegurar la fijación celular, y su crecimiento sobre la superficie del andamio. Es posible mediante la técnica de electrohilado, sintetizar andamios poliméricos conformados por nanofibras mezcladas de alcohol polivinílico (PVA), quitosano y gelatina de salmón, otorgándole las características deseadas al andamio. Para estudiar las propiedades a escalas nanoscópicas de los andamios a nivel de nanofibra individual, se utilizó un microscopio de fuerza atómica (AFM). Con este equipo se realizaron medidas de espectroscopía de fuerza sobre nanofibras de PVA puro, obteniendo módulos de Young de 90 MPa y 200 MPa a 3% y 70% humedad relativa, respectivamente. A escala macroscópica se estudiaron membranas de nanofibras con dos ordenamientos distintos: fibras alineadas y sin alinear. Para medir las propiedades mecánicas se realizaron experimentos de tracción de los andamios. Las muestras sin alineamiento son producidas ocupando un colector estático de electrohilado, mientras que las membranas alineadas se fabricaron utilizando un colector rotatorio. Finalmente, se compara el módulo de Young de andamios electrohilados con y sin alineamiento, para nanofibras de PVA, y también su mezcla con quitosano y gelatina de salmón. Para PVA puro se obtuvo un módulo de 95 MPa, mientras que para mezclas de PVA con gelatina de salmón y quitosano 324 MPa y 508 MPa, para los casos sin alinear y con alinear, respectivamente. Se buscará encontrar una relación entre las propiedades nanomecánicas de fibras individuales y su comportamiento macroscópico a distintas humedades [1, 2].

Agradecimientos

Fondecyt Regular 1211901, Nucleo Milenio Nanobiofísica NCN2021_021.

Referencias

- [1] Peresin, M. S. et al. (2010), doi.org/10.1021/bm1006689
- [2] Neugirg, B. R., et al., (2016), doi.org/10.1039/c6nr00863a

Electrode design using Cu₂O catalysts stabilized on conductive polymers for the electrochemical reduction of nitrogen compounds to ammonia.

Diego Véliz, Luis Herrán,
Jessica Honores,
Esteban Landaeta,
Mauricio Isaacs
*Facultad de Química,
Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Diego Véliz, Luis
Herrán, Jessica
Honores, Esteban
Landaeta, Mauricio
Isaacs
*Millenium Institute on
Green Ammonia as
Energy Vector, Pontificia
Universidad Católica de
Chile*

The ammonia production (NH₃) represents one of the most important industrial processes in chemistry today. This is especially because the product generated -NH₃- is an indispensable raw material for the synthesis of fertilizers and various nitrogenous chemicals.

The most widely used process to produce this compound to date is the Haber-Bosh process. This invention generated an unprecedented advance in the development of the different branches of the chemical industry, largely due to being able to synthesize ammonia in a commercially viable way. The problem of using this process on a global scale lies in the extreme reaction conditions of high pressure (between 150 and 300 atmospheres), temperature (between 400 and 550 degrees Celsius) and in the environmental consequences. The large amount of energy required to maintain the high pressure and temperature of the process is estimated to be equivalent to between 3 and 5% of the world's energy production; On the other hand, this process as a by-product of the generation of H₂ is responsible for a significant emission of greenhouse gases, especially carbon dioxide (CO₂), these emissions are equivalent to approximately 1-2% of global CO₂ emissions, emissions to which climate change and other environmental problems are attributed [1]. It's here where electrocatalysis emerges as a possible answer to these questions because the reactions occur at ambient temperature and pressure.

The aim objective of this research is to address this problem with the easy and low-cost generation of an electrode(FTO/PCz/Cu₂O) with improved selectivity to catalyze the production of ammonia, for this purpose an FTO coated by a semiconducting polymer, in this case polycarbazole (PCz) on which Cu₂O nanostructures are supported will be used as a base [2,3]; the problem with this oxide is that it is highly unstable, therefore, it is intended to support it on a semiconducting polymeric base that stabilizes it and keeps it stable in the conditions in which it will be used [4].

The electrode was formed by electrodeposition of the polymer by cyclic voltammetry on the FTO surface; on this functionalized electrode and using a solution of copper sulfate and lactic acid, by means of chronopotentiometry the deposition of copper (I) oxide nanoparticles was performed [5]. The characterization of the electrodes was carried out by electron microscopy (FE-SEM), EDX elemental analysis and atomic force microscopy (AFM) to characterize the structure (sizes and shapes) of the deposited nanoparticles and UV-Vis, 2D RAMAN and ATR-IR spectroscopy with which the existence of the deposited copper (I) oxide was verified.

Finally, electrocatalytic analyses were carried out to establish the ammonia production yields at different working potentials, to evaluate the stability of the electrode and to prove that it not only catalyzes the production of ammonia from N_2 , but also catalyzes the reduction of NO_2 and NO_3 for the formation of ammonia (NH_3).

Acknowledgments

Acknowledgments to Millennium Institute on Green Ammonia as Energy Vector - MIGA (ICN2021_023) supported by the Millennium Scientific Initiative by the Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID).

References

- [1] Zhang, S. et al. (2021), doi.org/10.1002/anie.202013594
- [2] Matamala-Troncoso, F. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.matlet.2021.129663
- [3] Chen, G.-F. et al. (2020), doi.org/10.1038/s41560-020-0654-1
- [4] Mestiri, T. et al. (2015), doi.org/10.1016/j.cocom.2015.07.001
- [5] de Jongh, P. E. et al (1999), doi.org/10.1021/cm991054e

Caracterización temporal de láminas delgadas de plata con equipos de bajo costo basados en arduino

Lucas López
Universidad de Chile

Jimena López
Universidad de Chile

Agustín Lorca
Universidad de Chile

Ignacio Araya
Universidad de Chile

Erick Burgos
Universidad de Chile

Las láminas delgadas de plata actualmente son un recurso útil en el estudio de sistemas físicos, por ejemplo, en nanofotónica se emplean con frecuencia las láminas de plata por su relativa fácil manipulación química, además en el estudio de semiconductores [1]. Debido a su fácil obtención y bajo costo, es relevante estudiar las láminas delgadas de este metal con la finalidad de abaratar costos evitando la utilización de metales pesados. Entre las propiedades físicas de la plata, la resistividad eléctrica es una característica relevante para el desarrollo de tecnología. Esta varía según tiempo de deposición, forma y concentración de azufre en el ambiente [2].

En este trabajo estudiamos la resistividad de láminas delgadas de plata en el tiempo. La plata al ser expuesta al aire experimentará una reacción de sulfatación, proceso que se produce cuando los iones de plata interactúan con iones de sulfato [3]. Para esto implementamos un equipo de medición continua, fabricado en el laboratorio, de bajo costo, automatizado y con una precisión de 0.05 $[\Omega]$. Para la fabricación de las láminas de plata se utilizó el método de Physical Vapor Deposition (PVD) y se depositaron cuatro láminas delgadas con grosores nominales de 50, 25, 19 y 12 nm, obteniendo resistencias en el primer instante de medición de 0.92 $[\Omega]$, 4.84 $[\Omega]$, 18.17 $[\Omega]$, 15.09 $[\Omega]$, respectivamente. A las 60 horas de la deposición dieron una resistencia de 0.98 $[\Omega]$, 5.00 $[\Omega]$, 18.63 $[\Omega]$, 20.73 $[\Omega]$.

Los resultados sugieren que el grosor nanométrico de la muestra afecta a la resistividad de la muestra, disminuyendo la resistencia de saturación mientras más delgada es la muestra hasta los 20 [nm] de grosor nominal, donde la resistencia comienza a aumentar y que puede explicarse mediante una disminución del camino libre medio del electrón debido a efectos de confinamiento [1].

Agradecimientos

Agradecimientos al profesor Philippe Larroquete y a Cefex de la Facultad de Ciencias de la Universidad de Chile, por sus aportes en la electrónica. Agradecimientos al profesor Marcos Flores y al Laboratorio de Superficies de la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas de la Universidad de Chile por su amable recibimiento y apoyo en el experimento.

Referencias

- [1] Shiva, L. U., Ayachit, N. H., & Udachan, L. A. (2019). Electrical and microstructural properties of silver thin films. *Int. J. Nanoelectron. Mater.*, 12, 221-236.
- [2] Nieto, E., Fernández, J. F., Duran, P., & Moure, C. (1994). Películas delgadas: fabricación y aplicaciones. *Boletín de la sociedad Española de cerámica y vidrio*, 33(5), 245-258.
- [3] Arribas Jimeno, S., Hernández Méndez, J., Lucena Conde, F. (2002). *Química analítica cualitativa*. Ediciones Paraninfo, SA.

Mallados de nanofibras poliméricas de Poli(estireno-co-anhídrido maleico) (PSMA) modificado con aminoácidos para el control en la liberación de nanopartículas de plata (AgNPs) como agente antibacteriano, ensayos de liberación y pruebas antimicrobianas de agentes bioactivos.

Nicolás Padilla Manzano

*Departamento de
Química, Facultad de
Ciencias, Universidad de
Chile*

Sebastián Santander

*Departamento de
Química, Facultad de
Ciencias, Universidad de
Chile*

Bastián Díaz

*Departamento de
Química, Facultad de
Ciencias, Universidad de
Chile*

Renato Bacchiega

*Departamento de
Química, Facultad de
Ciencias, Universidad de
Chile*

Laura Tamayo

*Departamento de
Química, Facultad de
Ciencias, Universidad de
Chile*

En el presente trabajo se realizaron mallados de nanofibras poliméricas basadas en Poli(estireno-co-anhídrido maleico) modificado con aminoácidos de diferente índice hidropático con el objetivo de controlar la liberación de agentes antibacterianos y evaluar la respuesta bioactiva de estos frente sistemas biológicos.

Mediante una reacción de funcionalización de PSMA con diferentes aminoácidos, glutamina, tirosina, fenilalanina, se obtuvieron los copolímeros funcionalizados derivados llamados PSMA@Gln, PSMA@Tyr y PSMA@Phe respectivamente.

Se sintetizaron nanopartículas de plata (AgNP's) mediante reducción de nitrato de plata (AgNO_3) con borohidruro de sodio (NaBH_4) y ácido oleico como agente estabilizante en una fase acuosa, la cual fue posteriormente transferida a una fase orgánica de Diclorometano mediante fosfato monopotásico (KH_2PO_4) con agitación constante. Las nanopartículas en fase orgánica se separaron por decantación y se extrajo el solvente orgánico mediante rotaevaporación.

Los diferentes copolímeros funcionalizados fueron solubilizados a una concentración del 30% en una mezcla de solventes (Dimetilformamida y Diclorometano) incorporando dos concentraciones de AgNP's (0.5 y 2.0 %) como agente antibacteriano, y dos concentraciones de extracto de Calendula officinalis (5 y 20 %) como agente regenerativo.

Las soluciones poliméricas con agentes activos fueron electrohiladas con un equipo de electrospinning equipado con una aguja de 0,63 mm durante dos horas a 27 kV, con una temperatura de 45°C y con un flujo de 0.5 mL/h, las nanofibras resultantes fueron colectadas en un plato a 20 cm de distancia de la aguja hasta formar un mallado.

La formación de nanofibras en el mallado fue confirmada mediante microscopía electrónica de barrido de emisión de campo (FESEM), mientras que la incorporación de AgNP's en las fibras fue confirmada mediante microscopía electrónica de transmisión (TEM) y espectro de energía dispersiva de rayos X (EDS).

La liberación de iones Ag^+ fue medida en una solución de ácido nítrico (HNO_3) al

2% en la cual se sumergió un trozo de cada material de 4.5 x 4.5 cm, las mediciones fueron llevadas a cabo en periodos de 0.5, 1, 3, 5 y 7 días, luego de pasado el tiempo el material se retiró, y la solución resultante fue filtrada por 0.45µm y 0.22 µm para luego ser medida por espectroscopía de masas con plasma acoplado inductivamente (ICP-MS), los resultados obtenidos fueron evaluados mediante cuatro modelos cinéticos de liberación.

Siguiendo el mismo protocolo de liberación anterior se utilizaron soluciones de liberación de 1 y 7 días en agua desionizada para probar la capacidad antibacteriana de los materiales frente a las cepas bacterianas *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 (SA) y *S. aureus* resistente a metilicina ATCC 33592 (MRSA), mediante el conteo de colonias, el ensayo fue realizado por triplicado para la solución de liberación, y duplicado en la placa de agar.

Agradecimientos

A la Agencia Nacional de Desarrollo y Tecnología (ANID) por el financiamiento a través del proyecto regular Fondecyt 1200853.

Referencias

- [1] Santander, S. et. al (2023), .doi.org/10.3390/pharmaceutics15061659
- [2] L. Tamayo. et. al (2014), doi.org/10.1016/j.msec.2014.03.037
- [3] L. Tamayo. et. al (2022), doi.org/10.1016/j.ijpharm.2021.121292

Obtención de nanopartículas de grafito mediante un molino de bolas

Tomás Guerra
*Universidad Católica de
Temuco*

Karla Garrido Miranda
*Centro de Genómica
Nutricional Agroacuícola*

Jacobo Hernández
Montelongo
*Universidad Católica de
Temuco*

Las nanopartículas de grafito (NPG) presentan diversas aplicaciones tecnológicas [1], por ejemplo, pueden ser usadas como catalizadores en la síntesis de compuestos orgánicos y como transportadores de fármacos para su liberación controlada. También se utilizan en la fabricación de dispositivos electrónicos flexibles y de electrodos para supercondensadores de alta capacidad. Además, las NPG refuerzan diversos tipos de polímeros ya que exhiben propiedades mejoradas de conductividad eléctrica y térmica. Debido a la importancia en la industria de este material, este trabajo consistió en la síntesis de NPG a partir de la molienda de granos de grafito con un molino de bolas a escala laboratorio. Las variables que se estudiaron fueron la carga y el tiempo de molienda, manteniendo la velocidad del molino constante. El tamaño de las partículas obtenidas se determinó con la técnica de dispersión dinámica de luz (DLS) y se confirmó mediante microscopía electrónica de barrido (SEM). Por otro lado, las NPG obtenidas se analizaron químicamente con espectroscopía UV-Vis, Raman, infrarroja por transformada de Fourier (FTIR); la cristalinidad se estudió mediante difracción de rayos X (DRX) [2, 3]. Nuestros resultados indican que se obtuvieron NPG de aproximadamente 100 nm con 96 h de molienda y a una carga del 50% de capacidad del molino. Además, de la disminución de tamaño del grafito, el proceso de molienda generó partículas de grafeno.

Agradecimientos

Al proyecto Fondecyt Regular No. 1230553.

Referencias

- [1] Ahmed et al (2023), doi.org/10.7176/CMR/15-1-01
- [2] Kigozi et al (2020), doi.org/10.1016/j.rinma.2020.100113
- [3] Li et al (2021), doi.org/10.1016/j.saa.2020.119286

Synthesis and evaluation of nanoemulsions loaded with cannabidiol (CBD) on the viability of canine breast carcinoma and canine non-neoplastic cells

Francisca Javiera Medina
Pontigo

*Doctorado en Ciencias
Silvoagropecuarias y
Veterinarias*

Cristian Torres
*Facultad de Ciencias
Veterinarias y Pecuarias*

Felipe Oyarzún
*Facultad de Ciencias
Químicas y
Farmacéuticas*

Several studies have shown that cannabinoids, such as cannabidiol (CBD), can inhibit the proliferation of certain cancer cell lines, such as human breast carcinoma, through their interaction with different receptors, including: CB1, CB2, 5HT1A, PPARs, GPR55, and TRPV1-4 [1]. However, the clinical application has been hindered due to the high lipophilicity of CBD, in addition to its instability (light and oxygen), and poor tissue absorption [2]. An alternative that could improve the aqueous compatibility is its incorporation into oil-in-water nanoemulsions (NEM), providing to the lipophilic molecule (soluble in the oil core stabilized by surfactants) increasing the dispersibility in the aqueous medium [3]. The objective of this study was to develop a NEM containing CBD using a low-energy method (solvent displacement) to evaluate its safety and efficacy as an antineoplastic formulation in a canine mammary carcinoma cell line. For the physicochemical characterization of CBD-NEM, the hydrodynamic diameter, polydispersity index, and zeta potential was evaluated (ZetaSizer NanoZS, Malvern Instruments). The safety and efficacy of the nanoemulsions were analyzed as cell viability using the MTS reduction methodology in a canine mammary carcinoma cell line (CF41.Mg) and a canine renal tubular epithelial cell line (MDCK), respectively. Obtained NEMs showed a size range of 146-154 nm, with a low PDI ranging from 0.13-0.17, and a negative zeta potential (-49 to -53 mV). As preliminary results, CBD-NEM induced a non-selective decrease in the tested cells. Interestingly, the effect in cell viability was less intense than that triggered by CBD administered in ethanol. This is the first study to analyze this type of nanoemulsion including CBD on a breast carcinoma cell line, providing the basis for future mechanistic studies and clinical trials with the obtained formulation.

References

- [1] Afrin, F; et al. (2020), doi.org/10.3390/cancers12041033
- [2] Millar, S; et al. (2020), doi.org/10.3390/ph13090219
- [3] Anuar, N; et al. (2020), doi.org/10.1016/j.heliyon.2020.e04570

Efecto de nanopartículas de Renio sobre nanotubos de carbono en las reacciones asociadas a la producción de hidrógeno verde y peróxido de hidrógeno

Manuel Díaz Pérez
*Departamento de
Química de Los
Materiales, Facultad de
Química y Biología,
Universidad de Santiago
de Chile, Santiago, Chile*

Federico Tasca
*Departamento de
Química de Los
Materiales, Facultad de
Química y Biología,
Universidad de Santiago
de Chile, Santiago, Chile*

Cesar Zúñiga Loyola
*Departamento de
Química de Los
Materiales, Facultad de
Química y Biología,
Universidad de Santiago
de Chile, Santiago, Chile*

Angélica Gatica Caro
*Departamento de
Química de Los
Materiales, Facultad de
Química y Biología,
Universidad de Santiago
de Chile, Santiago, Chile*

Chile ha puesto en marcha la denominada “Estrategia Nacional del Hidrógeno Verde”, buscando acelerar la descarbonización industrial e independencia del uso de combustibles fósiles, para el año 2050. El H₂ verde es un combustible y vector energético que se produce a partir de la electrólisis de agua en el cátodo, mientras que el O₂ se produce en el ánodo. Sin embargo, la formación de oxígeno es cinéticamente lenta, y por lo tanto debe ser catalizada.

Los electrocatalizadores comerciales empleados para esta reacción son los metales pertenecientes al grupo del platino y sus óxidos. Estos son altamente catalíticos, tanto para las reacciones de evolución y oxidación de hidrógeno (HER/HOR), como para las reacciones de evolución y reducción de oxígeno (OER/ORR) [1]. Paralelamente, en estas dos últimas reacciones la formación de peróxido mediante 2 electrones, puede incluso ser una alternativa viable para distintas industrias [2].

Sin embargo, las aplicaciones industriales son limitadas en los dispositivos de conversión energética debido al alto costo de los catalizadores. Un metal más económico y con cualidades químicas similares respecto a la adsorción de hidrógeno es el renio (Re) [3]. Su costo es 29 veces menor que el platino, convirtiéndolo en un metal atractivo para ser estudiado en otras reacciones como HOR y OER/ORR, las que no han sido profundamente exploradas con este catalizador. Para ello sintetizamos nanopartículas de Re de distintos tamaños, para posteriormente estudiar su actividad catalítica mediante curvas de polarización en las reacciones propuestas.

Referencias

- [1] Jiang, Y.; et al (2018), doi.org/10.1002/AENM.201801909
- [2] Wang, N.; et al (2021), doi.org/10.1002/advs.202100076
- [3] A. M. R. Ramírez; et al (2022), doi.org/10.1021/acsmaterialsau.2c00077

A simple electroanalytical methodology for determination of zaleplon by adsorptive stripping voltammetry in synthetic saliva

Scarlett Aguilera
Universidad de Santiago de Chile

Erick Flores; Rodrigo Segura; Herna Barrientos; Felipe Matamala-Troncoso; Jaime Pizarro

Universidad de Santiago de Chile

Paulina Máquez
Universidad Central de Chile

Camilo García
Universidad Católica de Temuco

María Aguirre
Universidad Santiago de Chile

The use of sleep-inducing drugs (Z-drugs; Zopiclone, Zolpidem, Zaleplon) have a significant impact on the risks of driving risks [1-3]. However, there are still no regulations in this regard and analytical determination is still predominantly and analytical determination is still predominantly through highly sophisticated (chromatographic analysis), expensive and requires expert handling. On the other hand, electroanalytical techniques with much less expensive equipment have become an alternative for the determination of this type of analytes [3].

A glassy carbon electrode (GCE), modified with reduced graphene oxide (ErGO) (GCE/ErGO) was prepared for the determination of zaleplon, a common hypnotic pharmaceutical in synthetics oral fluids. The modified electrode was evaluated using cyclic voltammetry, Raman spectroscopy, and scanning electrochemical microscopy (SECM). The electroanalytical studies were developed by square wave adsorptive stripping voltammetry (SWAdSV) and parameters such as pH, accumulation potential, deposition time, and current response were optimized to determine zaleplon in Britton Robinson buffer. The validation was made using saliva-certified reference materials (Fusayama/Meyer Artificial Saliva and Artificial Saliva for Pharmaceutical Research) showing good accuracy and reproducibility. The GCE/ErGO system showed a linear response between 10-130 $\mu\text{g L}^{-1}$ at pH 10.0. The limit of detection was 5.30 $\mu\text{g L}^{-1}$.

Acknowledgments

This work was funded by the National Agency for Research and Development (ANID) through Millenium Institute on Green Ammonia as Energy Vector MIGA, ANID/Millennium Science Initiative Program/ICN2021_023(MJA); Subvención a Instalación en la Academia (2022) (SIA85220089-SIA772210080); USA1956_DICYT, USA2156_DICYT (Dicyt-USACH) and REG-2020-CG-412, UC Temuco (CG).

References

- [1] Naren Gunja (2013), doi.org/10.1007/s13181-013-0292-0
- [2] Anja Valen et al (2019), doi.org/10.1016/j.aap.2019.06.014
- [3] Gipsy Larenas et al (2005), doi.org/10.1093/jaoac/88.4.1135

Evidencia de porfirinas soportadas en carbono pirolizadas para la reacción de reducción de oxígeno manteniendo la integridad

Walter Orellana
*Departamento de Ciencias Físicas,
Universidad Andrés Bello*

César Zúñiga Loyola
*Departamento de Química de Los Materiales, Facultad de Química y Biología,
Universidad de Santiago de Chile*

José F. Marco
*Instituto de Química Física "Rocasolano"
CSIC, Madrid*

Federico Tasca
*Departamento de Química de Los Materiales, Facultad de Química y Biología,
Universidad de Santiago de Chile*

Sergio Choque
*Departamento de Química de Los Materiales, Facultad de Química y Biología,
Universidad de Santiago de Chile*

La creciente demanda de energía en todo el mundo, impulsada por el uso de combustibles fósiles para sostener el progreso tecnológico y social, se ha convertido en el principal impulsor de la contaminación ambiental derivada de las emisiones de gases de efecto invernadero. Esto ha despertado interés y desarrollo en fuentes de energía alternativas, especialmente aquellas alineadas con la neutralidad de carbono.

Una de las tecnologías más prominentes en el último tiempo con este enfoque es aquellas basadas en el uso del H₂. Lamentablemente estos sistemas están asociados a un alto requerimiento energético catódico para la ruptura del enlace O-O. Es por esto que la reacción de reducción de oxígeno (ORR) es muy lenta. Para este inconveniente, la ORR es apoyada por catalizadores para su implementación en sistemas continuos reales. El mejor catalizador hasta el momento es el PtO, pero a que es un metal precioso, y por consiguiente de muy alto coste, se han estado buscando arduamente alternativas, como complejos MN₄ basados en metales de transición como el Fe y Co.

En este estudio, se llevaron a cabo simulaciones de dinámica molecular ab initio para analizar la pirólisis de CoTTP y FeTTP adsorbidos en carbono amorfo. Los resultados teóricos demostraron que el complejo macrocíclico no se descomponía a altas temperaturas, hasta 1500 °C, manteniendo su geometría MN₄. Sin embargo, se observaron cambios en las energías de enlace M-O₂ después de la simulación de la pirólisis a 800 °C, lo cual se atribuyó a la interacción dispersiva entre los macrociclos y la superficie irregular del carbono amorfo, resultando en pequeñas variaciones en la distancia de enlace MN₄. Las imágenes TEM mostraron una estructura más expuesta después del proceso de pirólisis. Los análisis de XRD descartaron la presencia de nanopartículas, acumulaciones o cristales de MN₄ antes o después de la pirólisis. Los resultados de XPS confirmaron la existencia de sitios catalíticos MN_x para ambos complejos, tanto antes como después del tratamiento térmico. Mediante estudios electroquímicos, se observó un desplazamiento del potencial formal hacia valores más positivos después del tratamiento térmico, pero las pendientes de Tafel no se vieron afectadas, lo que indica que el mecanismo de la ORR no cambió antes ni después de la pirólisis. Se sugiere que la variación en la actividad catalítica de la ORR está relacionada con las interacciones entre las porfirinas de Fe y Co y el sustrato de carbono, donde el sitio activo M-N-C porfirínico se mantiene después de la pirólisis. Si se desea introducir átomos de nitrógeno y metal en la estructura de carbono, se deben considerar otras estrategias, como la

síntesis en estado sólido utilizando sales de metal y fuentes de carbono-nitrógeno en lugar de utilizar metalo-macrociclos. La estrategia teórica empleada en este estudio permite simular y explicar adecuadamente la naturaleza de los sitios activos M-N-C y su rendimiento en la ORR.

Referencias

[1] Orellana, W., et al (2022), doi.org/10.1038/s41598-022-11820-6

Study of the growth mode of nanostructured metallic oxide thin films

Vicente Diaz and Marcos
Flores Carrasco

*Laboratory of Surfaces
and Nanomaterials,
Physics Department,
Faculty of Physical and
Mathematical Sciences,
Universidad de Chile*

The structure and properties of the nanoscaled metallic thin films on insulator surfaces are of considerable interest due to their potential applications in various electronic, magnetic, and optical devices. Because of the confinement effects, most of these properties change drastically when ultrathin films are formed from bulk materials [1]. But, the reports on nanostructured metallic oxides thin films are scarce. These properties are closely related to the structural characteristics of films such as crystalline structure, grain size, surface topography, etc. By changing any of these features is possible to adjust their properties, for example electronic, magnetic, and optical properties. The study of the morphology of thin films with the variation of thickness gives an idea about the growth mechanism of these films [2].

Thus, those studies either from basic theoretical understanding or application points of view are very important. The study of morphology and the understanding of growth mechanisms appear to be essential to prepare materials in a controlled way to get desired properties [3]. Scanning probe microscopy techniques, such as atomic force microscopy (AFM), are important methodologies to study surface morphology in real space. The top surface can be imaged using an AFM and these images provide information about the topography [4].

Here we report the study of the growth mode of VO_x ultra-thin films onto mica at room temperature with thickness up to 100 nm. After the deposition, the samples were imaged by AFM in different scales, to observe grain and surface roughness. The topographic images evidence a film conformed by nanometric grains close to 40 nm in size. The grain size is independent of the thickness in the range under study. The grains have a rhombohedral shape without preferential orientation. The height-to-height correlation and power spectrum density analysis were developed also. The results and dynamic coefficient values obtained were discussed from the self-affinity models.

Acknowledgments

This work was partially financed by Millenium MultiMat and Fondecyt 1191799.

References

- [1] Bahamondes et al. (2015), doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.01.166
- [2] Gallegos et al. (2021), doi.org/10.1016/j.micron.2021.103135
- [3] Siniscallo et al. (2012), doi.org/10.1021/la304621k
- [4] Mozo et al. (2023), doi.org/10.1103/PhysRevE.107.034802

Andrés Fabián
Gualdrón-Reyes
*Facultad de Ciencias,
Instituto de Ciencias
Químicas, Isla Teja,
Universidad Austral*

Iván Mora-Seró
*Institute of Advanced
Materials (INAM),
Universitat Jaume I (UJI)*

Efficient defect passivation in CsPbX₃ perovskite nanocrystals for 3D printing, stabilization in polar solvents and future solar-driven chemistry

Halide perovskite nanocrystals (PNCs) are prominent and interesting nanomaterials for actively studying photovoltaics, optoelectronics, photonics, and solar-driven chemistry. Valuable features including easy preparation, narrow width at half-maximum photoluminescence (PL) peak, adjustable/modifiable surface chemistry, a notable PL quantum yield (PLQY) of up to 100%, and a modulable band gap, have been exploited to fabricate highly efficient devices such as PNC solar cells and multiple color light-emitting diodes (LEDs). Despite of above benefits of the PNCs, the PLQY and material quality are limited by their defective structure, making them prone to degradation. Factors such as (i) synthetic protocols for the PNCs formation and (ii) the loss of capping ligands from PNCs surface are pivotal to create a defective structure. In both cases, halide deficiency is the main reason to cause the appearance of a high density of nonradiative recombination sites, reducing the stability of the final product, and hindering the effective extraction of charge carriers. To overcome these drawbacks, we have analyzed the influence of natural vitamins and alkylammonium halide ligands with high binding capability, on the enhancement of the photophysical properties, stability, and suppression of non-radiative carrier traps of light emitting CsPbX₃ PNCs (X = Cl, Br, I). By establishing an efficient surface passivation [1,2], less defective PNCs are formed, with long-term stability, providing a better color quality. Therefore, it is possible to produce excellent candidates to improve the fabrication of luminescent 3D-printed solids, ultrastable PNCs in polar environments up to 7 months, and to conduct promising solar-driven chemical reactions to obtain added-value products.

Acknowledgments

This work was supported by the European Innovation Council (EIC) via OHPERA project (grant agreement 101071010), the Spanish Ministry of Science and Innovation under projects STABLE (PID2019- 107314RB-I00) and ECOCAT (PID2020-116093RB-C41).

References

- [1] Recalde I. et al. (2022), doi.org/10.1002/adfm.202210802
- [2] Gualdrón-Reyes A. F. et al. (2023), doi.org/10.1002/adom.202203096

Catalytically assisted synthesis of MoS₂

Ana Burgos

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Gabriel Gray

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Valeria del Campo

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Ricardo Henríquez

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Patricio Häberle

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Among the 2D materials that have attracted attention as a possible building block of electronic devices we can find MoS₂ [1]. A direct band semiconductor, that retains this singular property down to the monolayer level.

The standard procedure to prepare very large-scale flakes, as those required in applications to devices, is by synthesizing them through Chemical Vapor Deposition (CVD). A widely used CVD option [2] consists in the simultaneous sublimation of two precursors: MoO₃ and S, in the presence of a carrier gas (N₂) with a well-defined flow. The gaseous mixture, containing the reacting molecules, is constrained to pass through a region where a collecting substrate (SiO₂) sits, with its surface normal roughly perpendicular to the flow direction.

In this report we have examined the resulting synthesis products, optimized around the conditions that allow the formation of monolayers, using a slightly modified experimental configuration, to the one described above. We have incorporated a catalytic surface to aid the synthesis process. A freshly cleaved Highly Oriented Pyrolytic Graphite (HOPG) has been placed facing the SiO₂ substrate inside the reaction zone. To characterize the resulting products, we have used optical microscopy, Raman spectroscopy and Atomic Force Microscopy.

Our synthesis products indicate two important improvements. First, is the more uniform distribution of synthesis material over the substrate, which is almost independent of the singularities induced by the carrier gas flow, and second, for the right set of parameters, there are large regions of the substrate that display monolayer growth.

Based on the type of collected synthesis products, we propose a model to describe the chemical reactions induced by the catalyst for the optimal synthesis parameters. Our results seem to suggest that the use of a catalyst, such as HOPG, is an approach worthwhile considering in the CVD synthesis of 2D semiconductors.

Acknowledgments

This work has been partially funded by the following grants: FONDEF D1111213 and FONDECYT 1231309.

References

- [1] M. Chhowalla et al. (2013), doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.01.166
- [2] Lee Y-H et al. (2012), doi.org/10.1016/j.apsusc.2015.01.166

Tópico T2: Nanoelectrónica, nanomagnetismo y nanoóptica

Hybrid lanthanide complexes for nanomagnets

Walter Cañón-Mancisidor

*Facultad de Ingeniería,
Ciencia y Tecnología -
Universidad Bernardo
O'Higgins - CEDENNA*

Olivier Cadot

*Institut des Sciences
Chimiques de Rennes -
Université de Rennes*

The plasticity of the coordination chemistry of Lanthanide ions (Ln) has allowed the design of novel coordination compounds with slow relaxation of the magnetization since the first Single Ion Magnet (SIMs) was reported by Ishikawa, who used the phthalocyaninate (Pc^{2-}) ligand to make a “sandwich type” complex. The coordination chemistry has allowed the possibility to design different types of molecular complexes with SIMs behaviour based on organic ligands. There is also Ln-SIMs based on inorganic ligands, using different types of lacunary polyoxometalates (LPOM) like, $[XW_{11}O_{39}]^{n-}$. The combination of both types of ligands can produce hybrid inorganic-organic Ln complexes with SIM behaviour. This is an attractive approach since these hybrid materials could benefit from the combination of the ease of functionalization of the organic ligands with the robustness of the inorganic moieties. There are reports that a hybrid mononuclear DyIII complex could improve the relaxation dynamics when it is compared to the inorganic analogues [1]. Thus, in this work we present the recent results and advances on these systems, also analysing how changes in the geometry of the metal centres are affected by the nature of the type of ligand (organic, inorganic or hybrid) [2]. Moreover, we will discuss which of these changes has an effect on the magnetic properties of the lanthanide complexes.

Acknowledgments

WCM thanks FONDECYT Regular 1211282 and ECOS200027 (C20E04) for financial support. The author's thank research project Financiamiento Basal Program AFB220001. The authors thanks FONDEQUIP-EQM130086. This research was performed as part of the Chilean-French International Research Program “IRP-CooplC”.

References

- [1] Cañón-Mancisidor W. et al. (2019), doi.org/10.1039/C9CC07868A
- [2] Cañón-Mancisidor W. et al. (2021), doi.org/10.1002/ejic.202100670

Respuesta magnética de películas ultradelgadas de óxido de cobalto

Fernando Alvarez
Asencio
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Ricardo Henríquez
Correa
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Claudio
González-Fuentes
*Universidad de Santiago
de Chile*

En el actual panorama tecnológico, se ha alcanzado un notable progreso en la reducción dimensional de dispositivos electrónicos, llegando incluso a la escala micrométrica y, en ocasiones, nanométrica. Este avance, previamente considerado revolucionario, ha dado lugar al desarrollo de dispositivos omnipresentes y vitales en la vida cotidiana.

En este contexto, los sensores de gases desempeñan un rol crucial en la salvaguarda de la integridad humana. No obstante, los sensores basados en óxidos de cobre, que operan a través de modificaciones en su resistencia eléctrica, presentan limitaciones en cuanto a su selectividad. Con la finalidad de trascender estas restricciones y mejorar tanto la sensibilidad como la selectividad en la detección de gases, se ha considerado la aplicación de óxido de cobalto como una perspectiva prometedora. De manera específica, la utilización de nanopartículas decoradas con óxido de cobalto ha demostrado ser beneficioso gracias a sus propiedades catalíticas. La estrategia de decoración de nanopartículas se emplea con el propósito de capitalizar dichas propiedades catalíticas, con miras a enriquecer la capacidad de detección y selectividad de los sensores de gas.

En este estudio, se efectuó la síntesis de películas de cobalto sobre sustratos de mica por medio del método de depósito físico de vapor mediante calentamiento resistivo. Posteriormente, se procedió a la oxidación del cobalto a diversas temperaturas, empleando platillos calefactores. Para la caracterización de las muestras obtenidas, se aplicaron diversas técnicas analíticas, incluyendo la espectroscopía Raman [1, 2], espectrofotometría [3] y magnetometría. Estas metodologías facilitaron la identificación de la naturaleza de la oxidación presente en las películas de cobalto.

Los resultados obtenidos generaron optimismo, al evidenciar la presencia favorable del óxido Co_3O_4 en las muestras sometidas a análisis. Estas observaciones aportan información de suma relevancia para el entendimiento de las propiedades y el comportamiento de los materiales de cobalto oxigenados, abriendo así nuevas perspectivas para futuras aplicaciones en el ámbito de sensores de gases y áreas conexas.

Agradecimientos

Proyecto ANID Fondecyt 1231849; Becas Programa de Incentivos a la Iniciación Científica (PIIC), USM; Becas internas para Magister Científico-Tecnológicos, USM.

References

- [1] Żyta, M. et al. (2016), doi.org/10.1016/j.corsci.2016.08.016
- [2] Diallo, A. et al. (2015), doi.org/10.1080/17518253.2015.1082646
- [3] Kucukarslan, A. et al. (2021), doi.org/10.1007/s00339-021-04672-w

Bound states in the continuum in cross shape junctions formed by one-dimensional wave guides

Sofía Pinto Muñoz
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

Pedro Orellana
Dinamarca
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

Rafael Molina
Fernández
*Instituto de Estructura de
la Materia IEM-CSIC*

Bound states in the continuum (BICs) are wave states that remain localized despite coexisting with a continuous spectrum of radiating waves [1]. Over the last few decades, the topic of BICs has attracted lots of attention, especially in optics and photonics [2]. It is particularly noticeable that most of these investigations base their studies on symmetric systems, which generate a specific kind of BIC, called symmetry-protected BIC [1]. In this work, we study the formation of BICs in a system of electronic and/or photonic transport that isn't completely symmetric. This system consists of one or more crossbar junctions formed by one-dimensional waveguides and with commensurable lengths for the upper and lower arms. We also study the effect of creating these BICs caused by the distance variation between consecutive junctions and its commensurability with the upper and lower arms of the crossbars. We solve the Helmholtz equation for this system and calculate the total transmission probability and the probability density in the intersections. The presence of quasi-BICs is reflected in the transmission probability as a sharp resonance in the middle of a symmetric Fano resonance along with Dirac's delta functions in the probability density.

Acknowledgments

ANID-Subdirección de Capital Humano/Magíster Nacional/2023-22231536.

References

- [1] Hsu, C., Zhen, B. et al. (2016), doi.org/10.1038/natrevmats.2016.48
- [2] Hu, Y. et al. (2022), doi.org/10.1002/adfm.202203680

Miguel Figueroa, Pedro
Orellana, Vladimir Juricic
*Department of Physics,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaiso, Chile*

Vladimir Juricic
*Nordita, KTH Royal
Institute of Technology
and Stockholm
University, Stockholm,
Sweden*

Bound states in the continuum in a one dimensional Aharonov-Bohm ring with impurities and Rashba spin-orbit interaction

In recent years, bound states in the continuum (BICs) have been an emerging area of interest in photonic and electronic systems. BICs are considered as a nonradiating resonant mode with an infinite lifetime which cannot couple with the radiating channels propagating outside the system and therefore remain localized [1, 2]. In this work, we study this phenomenon in the electronic transport of a continuous system formed by a single contact ring with local impurities in presence of Rashba spin-orbit interaction and Aharonov-Bohm effect. We show that this effect is present in symmetric configurations and is of particular interest in the application of the device as a spin filter [3]. Employing the Landauer formalism we also characterize the formation of these states for a generalized number of impurities, which in terms of the conductance are visualized as sharp Fano profiles and a narrow high local density of states.

Acknowledgments

Proyecto Fondecyt 1201876.

References

- [1] Shereena Joseph et. al (2021), doi.org/10.1515/nanoph-2021-0387
- [2] Chia Wei Hsu et. al (2016), doi.org/10.1038/natrevmats.2016.48
- [3] B. Molnar et. al (2004), doi.org/10.1103/PhysRevB.69.155335

Vertical and in-plane electronic transport of graphene nanoribbon/nanotube heterostructures

Antonio Bernardo Félix
*Physics Institute, Federal
Fluminense University*

Mónica Pacheco
*Physics Department,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

Pedro Orellana
*Physics Department,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

Andrea Latgé
*Physics Institute, Federal
Fluminense University*

All-carbon systems have proven to present interesting transport properties and are often used in electronic devices. Motivated by recent resonant responses measured on graphene/fullerene junction [1], we propose coupled nanoribbons/carbon-nanotube heterostructures for use as charge filters and to allow tuned transport [2]. These hybrid systems are engineered as a four-terminal device, and we explore multiple combinations of source and collector leads. The armchair-edge configuration results in midgap states when the transport is carried through top/bottom terminals. Such states are robust against the lack of perfect order on the tube and are revealed as sharp steps in the characteristic current curves when a bias potential is turned on. The zigzag-edge systems exhibit differential negative resistance, with features determined by the details of the hybrid structures.

Acknowledgments

The work has been partially financially by Brazilian Agencies CAPES, CNPq, and FAPERJ, and Chilean Government through the FONDECYT Grants 1211913 and 1201876. AL would like to acknowledge the financial support of FAPERJ under grant No. E-26/202.953/2016 and E-26/202.567/2019 and the INCT de Nanomateriais de carbono.

References

- [1] Sergeyev, D. et al. (2021), doi.org/10.1142/S0219581X21500071
- [2] Felix, A.B. et al.(2022), doi.org/10.3390/nano12193475

Quantum interference in photonic systems

Alexis R. Legon

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile.*

M. Ahumada

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile.*

Juan P. Ramos

*Andrade
Departamento de Física,
Universidad de
Antofagasta,
Antofagasta, Chile.*

Pedro Orellana

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile.*

The bound states in the continuum (BICs) are exotic states that are found in the continuous band of energies but remain confined [1]. This type of state was predicted at the dawn of quantum mechanics by Von Neumann and Wigner [2] as a supported bound state above the potential barrier of a spatially oscillating attraction potential. BICs can be considered zero-width resonances with infinite lifetimes that coexist with extended states but remain completely confined [1]. The search for new scenarios where BICs can be observed is of central technological interest in quantum systems, particularly in quantum information theory. In that sense, there has been significant progress in the control of hybrid systems of light and matter right on the border between quantum optics and condensed matter physics [3]. Likewise, coupled resonator waveguides (CRWs), provide a platform to study light-matter interaction with high precision. Similarly, atoms in CRWs circuits offer the possibility to investigate photon quantum transport with high sensitivity. Photon transport in quantum circuits has many possible realizations, for example, in superconducting line resonators [3] and whispering gallery resonators (WGR) [4], and one-dimensional CRWs. However, for the formation of BICs, one way is by the indirect interaction of a WGR through a one-dimensional finite CRW [5]. In [5], it was found that a wave packet of incident photons is partially stored in the bound state in the continuum due to ring-induced symmetry breaking. In this way, WGRs allow studying quantum interference effects such as the Fano effect and bound states in the continuum in the same structure by varying the system parameters. According to this definition, we study the indirect interaction of two WGRs resonators through finite CRWs, coupled to two other semi-infinite CRWs. Therefore, this configuration would allow greater control of the interference effects with high sensitivity and its possible use as detectors in emerging quantum technologies, through the study of the transmission spectra and the density of photonic states of the proposed resonator configuration. Thus, the conditions under which the bound state in the continuum can be accessed through single-photon transport processes are investigated.

Acknowledgments

Alexis R. Legon would like to thank is grateful for the financial support from the PIIC-UTFSM grant into ANID-Subdirección de Capital Humano Doctorado Nacional through Grant 2023-21230847.

References

- [1] Hsu, C. et al. (2016), doi.org/10.1038/natrevmats.2016.48
- [2] J. von Neuman et al. (1929), doi.org/10.1007/978-3-662-02781-3_19
- [3] Y. Plotnik et al. (2011), doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.183901
- [4] K. J. Vahala (2003), doi.org/10.1038/nature01939
- [5] M. Ahumada et al. (2018), doi.org/10.1103/PhysRevA.98.023827

Creation of spin defects in h-BN monolayer by ion implantation

Hugo Zelada
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Diego Jeria
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Nicolás Vera
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Loik Gence
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Jeronimo Maze
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

The controlled creation of single photon emitters (SPEs) in two-dimensional materials has gained significant attention due to its potential applications in quantum technologies and optoelectronic devices [1].

Hexagonal boron nitride (h-BN) is a two-dimensional layered material that is highly stable at high temperatures and resistant to chemical reactions [2]. The ability to generate defects with precise control and characterize their impact on the material properties is crucial for unlocking the full potential of h-BN in next-generation electronic devices. However, the controlled introduction of defects into h-BN monolayers remains a significant challenge [3].

This work aims to address this challenge by utilizing ion implantation as a technique to generate defects in monolayers of h-BN. The process is conducted in a high vacuum environment (10^{-8} mbar) where we focus, for now, on the creation of vacancies in an h-BN monolayer on Si/SiO₂ through argon ion bombardment with a maximum energy of 5 keV. The ion energy and dosage are carefully optimized to achieve a controlled density of vacancies while minimizing structural damage. Although the effects of irradiation on 3D systems are well-established, a mounting body of experimental evidence suggests that many concepts developed for understanding the interaction between energetic particles and solid materials in 3D systems are either not applicable to 2D materials due to their unique geometry or require significant modifications to be applicable [4].

After the ion irradiation process, the sample can be further characterized in photoluminescence (PL) on a confocal microscope [5]. By means of this technique we have been able to observe bright spots with their respective spectra in the areas bombarded with low energy ions.

While these results are promising, it is necessary to better analyze the behavior and characteristics of these possible defects, as well as their correlation with the ion energy and dose. Additionally, as future work, we plan to explore the effects of ion implantation using different gas types, such as carbon-rich gases, to explore the generation of substitution carbon defects in the h-BN monolayer.

Acknowledgments

Proyecto Fondecyt Regular 1221512.

References

- [1] Aharonovich I. et al. (2016), doi.org/10.1038/nphoton.2016.186
- [2] Liu Z. et al. (2013), doi.org/10.1038/ncomms3541
- [3] Gottscholl A. et al. (2021), doi.org/10.1038/s41467-021-24725-1
- [4] Ghorbani-Asl M. et al. (2022), doi.org/10.1016/B978-0-12-820292-0.00015-X
- [5] Fournier C. et al. (2021), doi.org/10.1038/s41467-021-24019-6

Optical characterization of electronic spin defects in hexagonal boron nitride monolayers

Nicolás Vera Castillo
*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Diego Jería
*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Hugo Zelada
*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Jerónimo Maze Ríos
*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Loïc Gence
*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Artificial atomic systems in solids are the leading physical system for use in quantum technologies. One of the most prominent systems used are wide band gap semiconductors such as nitrogen vacancy centres in diamond, due to its large coherence times even at room temperature [1]. Another system that has been shown to generate single photon emission are van der Waals crystals such as hexagonal Boron Nitride (hBN) [2]. Which is comprised by Boron and Nitrogen atoms in a hexagonal lattice.

The hBN spin defects have been used to probe external perturbations with high sensitivity. Their advantage over other leading systems in these regard is that hBN spin defects are highly stable and reside within a few layers, or in our case a single layer, of the material to be sensed [3]. Thus, they could be used to achieve much stronger interactions with the sample and at a much closer proximity. In condensed matter physics they have been used to achieved high resolution imaging of magnetic fields [4]. However, single photon emission from colour centres in two dimensional hBN has been reported primarily at the bulk level. Our goal is to study implanted defects in monolayers of hBN at room temperature for potential applications in quantum sensing and quantum information processing.

We are creating defects in hBN monolayers with the ion implantation technique, bombarding a monolayer with Ar ions under ultra high vacuum, thus enabling us to create vacancy related defects in a controlled manner. These defects are then characterized via a confocal microscope and a spectrometer, using a excitation wavelength of 522 nm. Currently, we have been able to create defects in the monolayer that have shown to be optically active at room temperature, displaying emission spectra consistent with vacancy defects previously reported in the literature. However, the exact type of vacancy is up for debate and thus more study is required [5].

The defects created appear in the confocal images as diffraction limited spots of around 400 nm which is a necessary condition if these are single defects. Nevertheless, in order to determine whether the defects created correspond to single spins or a small ensemble it is necessary to measure the second order autocorrelation of their emission. However, even at the ensemble level, we are currently working on experiments to control the spin of these defects using optically detected magnetic resonance (ODMR) and to measure the magnetic field sensitivity that could be achieved with this system.

Acknowledgments

Nicolás Vera Castillo acknowledges support from ANID-Subdirección de Capital Humano/Magíster Nacional/2023 - 22231517.

References

- [1] Awschalom, D. D. et al. (2018), doi.org/10.1038/s41566-018-0232-2
- [2] Stern, H. L. et al. (2022), doi.org/10.1038/s41467-022-28169-z
- [3] Sumukh Vaidya et al. (2023), doi.org/10.1080/23746149.2023.2206049
- [4] Gao, X. et al. (2021), doi.org/10.1021/acs.nanolett.1c02495
- [5] Tran, T. et al. (2015), doi.org/10.1038/nnano.2015.242

Substrate impact in the photostability of hexagonal boron nitride monolayer

Diego Jeria

*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Hugo Zelada

*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Nicolás Vera

*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Loik Gence

*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Jeronimo Maze

*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Hexagonal boron nitride (hBN) is a two-dimensional material, and one of its most important properties is a wide bandgap of ~ 6.1 eV, which can be used for quantum photonics [1]. Point defects in the hBN structure can endow the material with new discrete states in the bandgap, which can act as single-photon emitters [2]. However, investigations of defects in hBN monolayers have encountered a significant problem: the reported photostability issue of the emitters, leading to bleaching after several excitation cycles [3]. Furthermore, we have observed that the fluorescence of pristine hBN monolayers deposited over Si/SiO₂ also decays over time, and we have measured the time trace of the emission using a confocal microscope. To characterize this behavior, we used an excitation laser of 522 nm to study the luminescence decay, varying the power of the laser and using continuous-wave and pulsed laser in different configurations. Nevertheless, the hBN monolayer still exhibits a lack of photostability. Our hypothesis is that this phenomenon is related to the thermal dissipation of the substrate on which the hBN monolayer is deposited. Therefore, we are currently studying the impact of different substrates on photostability. Firstly, we are using a few-layer graphene between the Si/SiO₂ and the hBN monolayer with the objective of improving thermal dissipation. Consequently, we expect improvements in the photostability of hBN emission. Another candidate to improve thermal conductivity is the use of a diamond wafer on silicon as a substrate. In addition to confocal microscopy for characterizing the photostability, we also examine the spectrum of the luminescence, as the change of substrate may affect it [4].

References

- [1] Cassabois, G. et al. (2016), doi.org/10.1038/nphoton.2015.277
- [2] Tran, T.T. et al. (2016), doi.org/10.1021/acsnano.6b03602
- [3] Tran, T.T. et al. (2015), doi.org/10.1038/nnano.2015.242
- [4] Lechiffart, P. et al. (2023), doi.org/10.1103/physrevmaterials.7.024006

Fabrication and characterization of iron nanodiscs with vortex properties and their potential application in magnetic hyperthermia

Franco Álvarez Novoa
Universidad de Santiago de Chile - Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y la Nanotecnología, Chile

Rafael Morales Arboleya
Universidad del País Vasco, País Vasco - España

Carolina Redondo Esteban
Universidad del País Vasco, País Vasco - España

Juliano Denardin Casagrande
Universidad de Santiago de Chile - Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y la Nanotecnología, Chile

Patricia Díaz Saldívar
Universidad de Santiago de Chile - Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y la Nanotecnología, Chile

Magnetic hyperthermia (MH) is a new treatment that uses magnetic fields to generate heat inside the body, making it useful for cancer treatment. Nanodisks (ND) are magnetic nanostructures with unique spin configurations, such as vortex state and large dimensions that preserve zero remanence, preventing aggregation. In addition, they present versatility for the design of magnetic configurations, playing with different sizes and geometries and the significant advantage of growing in multilayers using different types of materials. Our goal was to synthesize multilayer NDs with different sizes, thicknesses and compositions, and analyze their physicochemical, magnetic and biological properties. NDs were manufactured by combining lithography techniques and physical vapor deposition. Three samples were used with the following composition, layer thickness (nm) and diameters: M1: Al 50/ Ti 10/ Fe50 /Ti 10, D = 267 nm; M2: Al 50/ Ti 10/ Fe60 /Ti 5 /Fe 60 / Ti 10, D = 252 nm and M3: Al 50/ Ti 10/ Fe10 /Ti 5 /Fe 10 / Ti 10, D = 653 nm. Then, size and shape (TEM, SEM), composition (EDS), and magnetic properties (VSM, MOKE) were analyzed. The HM tests were performed with the ND resuspended in water to different fields and frequency using the Magnetherm equipment, finally, toxicity tests were performed in HeLa cell cultures. The analysis of morphology and size showed that the 3 samples obtained had a mainly elliptical shape with sizes of M1: 252±3.9, M2: 267±2.7 and M3: 653±12.1 nm. The analysis by EDS confirmed the presence of the different metals that were deposited during evaporation. Of the three samples, M2 was the one with the highest volume of Fe, followed by M1. For magnetic analysis, hysteresis graphs showed the existence of spin-vortex configuration in the analyzed samples, M2 showed higher saturation magnetization value followed by M1 and M3. The analysis of hyperthermia showed that the greatest increase in temperature ($\Delta T^\circ = 4.9^\circ\text{C}$) was with the M1 sample at 618 kHz frequency and 10mT field, although M1 had less Fe content than M2, it was more effective in generating temperature increase, probably because Fe was in monolayer. With respect to the size M1 and M2 were smaller and were more effective in generating the temperature increase. Toxicological analysis showed no toxicity to any of the samples tested. These results show that hyperthermia can be generated with NDs at high frequencies, and that this effect is more evident in samples that have sizes less than 300 nm and presence of Fe in monolayer.

Acknowledgments

Proyecto BASAL AFB220001- CEDENNA, Horizon 2020 N°734801 MEGNAMED, Proyecto FONDECYT 1200782.

References

[1] Mora B. et al. (2018), doi.org/10.1021/acsami.7b16779

Au photonic crystals for high-sensitivity SERS molecular sensing

Simón Roa

*Centro Atómico
Bariloche, Instituto de
Nanociencia y
Nanotecnología
(CONICET - CNEA),
Argentina.*

Goekalp Engin
Akinoglu

*ARC Centre of Excellence
in Exciton Science,
University of Melbourne,
Australia.*

Carolina Redondo

*Facultad de Ciencia y
Tecnología, Universidad
del País Vasco
(UPV/EHU), España.*

Rafael Morales

*Facultad de Ciencia y
Tecnología, Universidad
del País Vasco
(UPV/EHU), España.*

María Laura Pedano

*Centro Atómico
Bariloche, Instituto de
Nanociencia y
Nanotecnología
(CONICET - CNEA),
Argentina.*

In recent years, noble metal nanoparticle-based periodic nanoarrays (photonic crystals) have received special attention due to their gross potential to achieve exceptionally high Electric-Near Field Enhancement (ENFE) factors for visible light and their prospects as candidates for the fabrication of ultra-sensitive Surface-Enhanced Raman Spectroscopy (SERS) substrates [1 - 3]. In this work, we report a simple but exhaustive theoretical analysis of the ENFE in Au nanodisks-based photonic crystals by Finite-Difference Time-Domain (FDTD) method and experimental validation of their potential for SERS-based molecular sensing. Nanostructures with arrays periodicities from 200 to 1000 [nm], nanodisks diameters from 100 to 500 [nm] and thicknesses from 20 to 200 [nm] were studied. Results show that the ENFE is strongly dependent on each one of these geometrical parameters, observing electric field amplification factors that can reach up to 1200 for the visible light spectrum. Our research provides relevant insights on the design optimization of this kind of photonic crystals to maximize the ENFE effects, which is a critical issue to assess the future fabrication conditions of efficient SERS substrates.

Acknowledgments

S. R. thanks the Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET, Argentina) for the financial support given through the “Beca Interna Postdoctoral CONICET 2022” program. G. E. A. thanks the Australian Government for funding through the Australian Government Research Training Program (RTP) Scholarship and the Centre of Excellence in Exciton Science. This research was supported by The University of Melbourne’s Research Computing Services and the Petascale Campus Initiative. This work has received funding from the European Union’s Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No. 734801, grant number PID2019-104604RB-C33 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033, and grant number IT1162-19. M. L. P. thanks founding from CONICET (PIP 2022-2024), FONCyT (PICT-2020-SERIE A-02705) and UNCUYO (SIIP 2022 80020210100610UN).

References

- [1] Mandal P. et al. (2022), doi.org/10.1016/j.surfin.2021.101655
- [2] Kasani S. et al. (2019), doi.org/10.1515/nanoph-2019-0158
- [3] Serafinelli C. et al. (2022), doi.org/10.3390/bios12040225

Ultra-low thermal budget, BEOL-compatible, correlated electron random access memory (CeRAM) for harsh environment applications

Leunam Fernandez
Izquierdo
*Department of Materials
Science & Engineering,
University of Texas at
Dallas, Texas, USA*

Marlon D.
Jerez-Masaquiza
*Department of Materials
Science & Engineering,
University of Texas at
Dallas, Texas, USA*

Greg Yeric
*Cerfe Labs, Austin,
Texas, USA*

Manuel
Quevedo-Lopez
*Department of Materials
Science & Engineering,
University of Texas at
Dallas, Texas, USA*

Saurabh Suryavanshi
*Cerfe Labs, Austin,
Texas, USA*

The future of monolithic 3D integration relies on low-temperature, back-end-of-line (BEOL) compatible electronic devices. Si-based logic and memory technologies rely on extremely high temperature ($> 800\text{ }^{\circ}\text{C}$) anneal for doping activation and contact formation. We need technologies that can be made within the typical BEOL thermal budget of $450\text{ }^{\circ}\text{C}$ for 1 hour without losing the performance.

This abstract demonstrates an ultra-low temperature process ($< 450\text{ }^{\circ}\text{C}$) for a novel, non-volatile memory technology based on correlated electron materials known as CeRAM [1]. Even with a low thermal budget, the novel physics in CeRAM can successfully operate from $<-272\text{ }^{\circ}\text{C}$ to $> 300\text{ }^{\circ}\text{C}$ [2, 3]. Carbon doping of transition metal oxides enables correlated electron physics, which enables bulk-like, solid-state resistance change in the application of electrical pulses. CeRAM, unlike other resistive switching memories, does not rely on filament formation or defect migration for resistive switching. Carbon doping also has the secondary benefit of effectively neutralizing oxygen vacancies, making the film robust against filament formation. Lower defects significantly reduce variability and improve reliability compared to other defect-drive, resistive switching memories.

This work outlines challenges in achieving a uniform, carbon-doped film at low thermal budgets. We will also discuss the role of carbon doping in achieving CeRAM. This abstract will also discuss the optimization of CeRAM films by utilizing two deposition techniques (Spin Coating and Physical Vapor Deposition), grain and crystallite distribution, thickness, and morphology changes. We perform detailed characterization using SEM, AFM, XRD, XPS, HRTEM, and in-situ HRTEM to understand the crystallite evolution in CeRAM operation.

This project is an example of successfully traversing the lab-to-fab gap in early-stage semiconductor development. We have further optimized micron-scale devices to sub-500 nm CeRAM devices and improved the power and reliability. The scaled devices' performance will be discussed with unique harsh environment applications such as quantum computing and NASA's Venus probe mission that could be served with CeRAM non-volatile memory.

Acknowledgments

The authors are grateful to University of Texas at Dallas, Cerfe Labs, Gordon Pollack and Chadwin Young.

References

- [1] Araujo C. d. et al. (2022), doi.org/10.1063/5.0073513
- [2] Suryavanshi S. V. et al. (2022), International Memory Workshop, Dresden, Germany.
- [3] Gruszecki A. A. et al. (2023), 35th International Conference on Microelectronic Test Structure (ICMTS), Tokyo, Japan.

Computational macroscopic QED for vibrational polaritons in infrared nanocavities

Athul S. Rema

*Department of Physics,
Universidad de Santiago
de Chile, Santiago, Chile*

Felipe Herrera

*Department of Physics,
Universidad de Santiago
de Chile, Santiago, Chile*

Near-resonant molecule-field interactions have attracted significant attention in chemical physics and quantum optics [1, 2]. We study the quantum dynamics of a molecular vibration coupled to near-field modes of an infrared nanosphere using macroscopic quantum electrodynamics (QED). We use the electromagnetic dyadic Green's function of the nanosphere to construct frequency and position dependent interaction Hamiltonians in macroscopic QED that are used to derive and numerically solve the system of non-Markovian integro-differential equations (IDE) that describe the dynamics of vibrational and photonic degrees of freedom. The material and dipole parameters are encoded in the structure of the kernel function of the IDE. We solve for photonic and vibrational observables for a single non-polar anharmonic vibration on the surface of a resonant infrared nanosphere and compare the results with recent phenomenological Markovian models developed for vibrational polaritons [3], to better understand the reach and limitations of reduced Markovian quantum optics models to describe currently available experiments.

Acknowledgments

I thank USACH for funding through Beca de Excelencia para Extranjeros y Extranjeras.

References

- [1] F. Herrera and J. Owrutsky (2020), doi.org/10.1063/1.5136320
- [2] T. W. Ebbesen (2016), doi.org/10.1021/acs.accounts.6b00295
- [3] J. Triana et al. (2022), doi.org/10.1063/5.0075894

Bound states in the continuum and Majorana zero modes in a double quantum dot interferometer

A. P. Garrido
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

D. Zambrano
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

P. A. Orellana
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

J. P. Ramos-Andrade
*Universidad de
Antofagasta*

In this work, we investigate the electronic transport properties through a nanostructure formed by two quantum dots coupled to two normal contacts in an interferometer configuration [1]. Each quantum dot is connected to a topological superconducting nanowire, hosting Majorana bound states at its ends. The area enclosed by the interferometer is crossed by an external magnetic flux allowing the presence of the Aharonov-Bohm effect. We calculate the system's physical quantities of interest utilizing Green's function formalism. Our results show that the phase due to the Aharonov-Bohm effect can tune the projection of the Majorana bound states and the bound states in the continuum on the linear conductance. The latter suggests that both kinds of bound states can be manipulated by controlling the magnetic flux parameter. Based on our results, a novel device can be proposed, which would allow the manipulation of Majorana-like excitations that are exceptional candidates for quantum computation implementations [2, 3].

Acknowledgments

A.P.G. is grateful for the funding of scholarship ANID-Chile No. 21210410. D.Z. acknowledges support from USM-Chile under Grant PI-LIR-2022-13, P.A.O. acknowledges support from FONDECYT grants 1201876 and 1220700. J.P.R.-A. acknowledges financial support from University of Antofagasta.

References

- [1] A. P. Garrido et al. (2023), doi.org/10.1140/epjp/s13360-023-04271-z
- [2] C. W. J. Beenakker (2013), doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-030212-184337
- [3] M. Leijnse et al. (2011), doi.org/10.1103/PhysRevLett.107.210502

Spin-to-charge conversion in copper oxide heterostructures

Khris Cancino Alfaro
*Universidad de Santiago
de Chile, CEDENNA,
Estación Central.
Santiago. Chile.*

Gerardo Rodriguez
*Universidad de Santiago
de Chile, CEDENNA,
Estación Central.
Santiago. Chile*

Erick Burgos
*Universidad de Santiago
de Chile, CEDENNA,
Estación Central.
Santiago. Chile.*

Roberto Rodriguez
*Pontificia Universidad
Católica de Chile- Vicuña
Mackenna 4860, Macul,
Santiago, Chile.*

J. Denardin & S.
Oyarzun
*Universidad de Santiago
de Chile, CEDENNA,
Estación Central.
Santiago. Chile*

A spintronics device must perform three main functions: generate, manipulate, and detect spin currents. A spin current can be created/detected by the spin Hall Effect (SHE) or Rashba-Edelstein Effect (REE), whose principal ingredient is the spin-orbit coupling (SOC) that relates the electron spin with its orbital motion. Based on SOC effects a new technology can be improved to generate/detect a spin current without a ferromagnetic layer. In a spin-orbit torque device (SOT-MRAMs), magnetization switching is generated by a current-induced torque due to SHE in materials with high SOC adjacent to the ferromagnetic (FM) layer. Recently a large spin-to-charge conversion was reported in copper oxide multilayers [1]; however, its origin is still not well understood and further investigations are required. Different approaches have been proposed to understand the physics behind this phenomenon. Copper is a metal with negligible SOC but oxidizing a copper film in contact with a high SOC material makes it possible to get a remarkable efficiency, even higher than employing heavy metals [2]. The mechanism behind this efficient conversion is the Orbital Hall Effect (OHE) altogether with SHE, but up to now, the contribution of each effect to the measured signal remains unclear [3]. In this presentation, we show a remarkable spin-to-charge conversion in Cu_2O , where the origin of this behavior can be attributed to OHE. In this study, we have deposited a set of $\text{CoFeB}/\text{Cu}_2\text{O}$ samples as a function of the Cu_2O thickness using the sputtering technique. We use a CoFeB ferromagnetic layer as a spin current source and Cu_2O layer as a spin sink. Spin pumping experiments were carried out on a Bruker EPR at room temperature. The debate on the physical process underlying the charge-to-spin conversion in oxides is still open, which demonstrates that this field is in an infancy stage where is very important to understand the physics behind all these new mechanisms to produce large spin-to-charge conversion using light materials such as copper oxide or to explore another metal oxide heterostructures.

Acknowledgments

FONDECYT 1210641 PROYECTO BASAL CEDENNA AFB180001.

References

- [1] Sha R. et al. (2021), doi.org/10.1103/PhysRevB.103.024432
- [2] Santos E. et al. (2023), doi.org/10.1103/PhysRevApplied.19.014069
- [3] Go D. et al. (2021), doi.org/10.1103/PhysRevB.103.L121113

Tópico T3: Nanobiología, nanomedicina y nanofarmacología

Desarrollo de sistema microparticulado de tipo liposomal para la encapsulación de derivados de algas

Eileen Castillo

*Facultad de Medicina y
Ciencia, Universidad San
Sebastián, Concepción,
Chile.*

Daniela Araya

*Facultad de Medicina y
Ciencia, Universidad San
Sebastián, Concepción,
Chile.*

Daniela Carrillo

*Facultad de Medicina y
Ciencia, Universidad San
Sebastián, Concepción,
Chile.*

Diego Jorquera

*Facultad de Medicina y
Ciencia, Universidad San
Sebastián, Concepción,
Chile.*

Arnoldo Miranda

*Facultad de Medicina y
Ciencia, Universidad San
Sebastián, Concepción,
Chile.*

José Luis Ordoñez

*Facultad de Medicina y
Ciencia, Universidad San
Sebastián, Concepción,
Chile.*

La costa chilena cuenta con una gran variedad de recursos naturales, entre ellos algas que contienen una gran variedad de compuestos fitoquímicos. El Cochayuyo o *Durvillaea antarctica* es una macroalga que en su condición de alga parda, presenta dentro de sus componentes diferentes carotenoides, destacándose dentro de ese grupo de moléculas la fucoxantina como pigmento carotenoides predominante la cual presenta propiedades antioxidantes, hipoglicemiantes además de estimular la termogénesis de las células grasas, acelerando así el metabolismo [1, 2]. Dado que la fucoxantina presenta fotosensibilidad y termosensibilidad, tiene una estabilidad limitada [1]. Los liposomas son pequeñas estructuras esféricas compuestas por una o más bicapas lipídicas que permiten la encapsulación de diferentes ingredientes activos farmacéuticos, así como también, proteínas y otras moléculas [3]. Se utilizan comúnmente como sistemas de administración de fármacos en medicina, porque pueden proteger las moléculas encapsuladas de la degradación y permitir la vehiculización a tejidos o células específicas.

El presente estudio tiene como objetivo formular, desarrollar y caracterizar liposomas tipo Vesículas Multilaminares Grandes (MLV), los cuales se elaboraron mediante el método de hidratación del film, desarrollándose tres tipos de sistemas; liposomas convencionales, etosomas y transferosomas. La optimización de estos liposomas se realizó mediante un diseño central compuesto, en el cual diferentes parámetros fueron evaluados, como es el caso de la proporción de los componentes de la formulación (fosfolípidos: colesterol), velocidad del rotavapor, medio de rehidratación de film, entre otros. Una vez optimizados los liposomas tipo MLV se incorporó un extracto hidroalcohólico de algas pardas a base de Fucoxantina, obteniendo una eficiencia de encapsulación (% EE) del $82,6 \pm 3,7\%$. La caracterización final de los liposomas optimizados se realizó mediante microscopía óptica, además de efectuar el análisis de tamaño, polidispersión y potencial Z, análisis realizados en un equipo Zeta sizer. Obteniéndose tamaños que fluctuaron entre los 530 – 1200 nm, con una polidispersión inferior a 0,250 y un potencial Z que fluctuó -28,1 a -41,1 mV. Los liposomas desarrollados fueron sometidos a un estudio de estabilidad acelerado de un mes a temperatura ambiente y bajo refrigeración en donde fue evaluada la estabilidad de la fucoxantina encapsulada, manteniendo la eficiencia de encapsulación en un $78,1 \% \pm 5,2\%$. Finalmente se logró encapsular un extracto de fucoxantina en un sistema microparticulado de tipo liposomal, mejorando la estabilidad química de la molécula lo que permitirá en un futuro poder desarrollar nuevas formas farmacéuticas que permitan administrar este ingrediente activo farmacéutico.

Referencias

- [1] Xiao et al., 2012
- [2] Din et al., 2022
- [3] Jankowski et al., 2011

DNA delivery nanosystem by ionic interaction with metformin

María Elena
Gamboa-Arancibia
*Drug Delivery Laboratory,
Departamento de
Ciencias y Tecnología
Farmacéuticas,
Universidad de Chile /
Advanced Center for
Chronic Diseases
(ACCDiS) / Center of
New Drugs for
Hypertension (CENDHY)
/ Departamento de
Ciencias del Ambiente,
Facultad de Química y
Biología, Universidad de
Santiago de Chile.*

Javier Morales M.
*Drug Delivery Laboratory,
Departamento de
Ciencias y Tecnología
Farmacéuticas,
Universidad de Chile /
Advanced Center for
Chronic Diseases
(ACCDiS) / Center of
New Drugs for
Hypertension
(CENDHY).*

The administration of genetic material with therapeutic use is an important challenge that has been explored in recent decades. Under physiological conditions, DNA is rapidly degraded by nucleases. Additionally, it presents difficulties in crossing cell membranes due to its polyanionic nature and can lead to innate immune responses [1]. Viral and non-viral delivery vectors have been described. Nanosystems are well-known non-viral vectors that offer advantages such as versatility and safety. They can be modified with ligands to achieve specific targeting or prolong circulation time in the body. They exhibit low immunogenicity and are cost-effective; however, they have lower transfection efficiency [2]. Different nanosystems have been described, classified as organic systems (lipid and polymeric complexes) and inorganic systems (magnetic or gold nanoparticles, carbon nanotubes), all operating under the same administration strategy. The negatively charged genetic material is condensed and/or forms complexes with cationic transfection reagents. Calcium phosphate nanoparticles have been investigated as potent non-viral gene delivery systems. Divalent metal cations, such as Ca^{2+} , Mg^{2+} , Mn^{2+} , and Ba^{2+} , can form ionic complexes with DNA, leading to stabilized structures that can be transported across the cell membrane [3]. Guanidine is a monovalent cation under physiological conditions and a highly polar molecule in aqueous solution, with an efficient positive charge stabilized by resonance. Molecules containing guanidine with high pKa values can induce DNA self-assembly in neutral or slightly acidic environments. Metformin is a strong base with a pKa of 12.4, containing two guanidine groups. It easily protonates at physiological pH, resulting in a positively charged amino group ($-\text{NH}^{2+}$) [4]. It has been shown to form well-defined nanostructures with DNA strands in aqueous systems without other components [5]. In this research, metformin/DNA complexes were prepared in nuclease-free water at N/P ratios (ratio of positively charged amine groups to negatively charged nucleic acid phosphate groups) ranging from 2 to 30. The hydrodynamic diameter and zeta potential (ZP) of the complexes were determined by DLS. The obtained results were as follows: N/P2 - 432 nm and -43.8 mV; N/P5 - 399 nm and -39.3 mV; N/P10 - 366 nm and -32.0 mV; N/P20 - 353 nm and -23.2 mV; N/P30 - 461 nm and -50.0 mV. Higher N/P ratios resulted in smaller nanoparticle size and lower zeta potential, with a PDI of approximately 0.5 up to N/P20, indicating DNA condensation by metformin. When increasing the N/P ratio to 30, the ZP showed a lower charge and larger particle size compared to N/P 2, which could be attributed to a change in complex configuration. The complexes will be characterized to evaluate the association efficiency according to their N/P ratio. Their stability will be studied, and the DNA release profile from the complexes will be determined.

Acknowledgments

This work was funded by Regular FONDECYT Project 1231154, ANID/PIA/ACT192144, FONDAP Project 15130011, National Doctoral Scholarship 21231777, all granted by Chilean National Agency for Research and Development (ANID).

References

- [1] Jafari M. et al. (2012), doi.org/10.2174/092986712803414141
- [2] Yin H. et al. (2014), doi.org/10.1038/nrg3763
- [3] Dizaj S.M. et al. (2014), doi.org/10.1186/1556-276X-9-252
- [4] Huang WX, Desai M, Tang Q, Yang R, Vivilecchia RV, Joshi Y. *Int J Pharm.* marzo de 2006;311(1-2):33-9.
- [5] Qian H. et al. (2022), doi.org/10.1038/s41427-022-00427-y

Characterization, optimization, and development of an amorphous solid dispersion that generates amorphous nanoparticles during dissolution

Miguel O. Jara
*Molecular Pharmaceutics
and Drug Delivery
Division, College of
Pharmacy, The University
of Texas at Austin, 2409
University Avenue,
Austin, TX 78712, USA*

Robert O. Williams III
*Molecular Pharmaceutics
and Drug Delivery
Division, College of
Pharmacy, The University
of Texas at Austin, 2409
University Avenue,
Austin, TX 78712, USA*

This research aimed to enable the repurposing of niclosamide as a viable pharmaceutical product for treating cancer and viral infections, including COVID-19. Niclosamide is an FDA-approved anthelmintic being studied in clinical trials as a chemotherapeutic and broad-spectrum antiviral. Additionally, several other applications are currently in the preclinical stage. Unfortunately, niclosamide is a poorly water-soluble molecule with reduced oral bioavailability, which hinders its use for new indications. Moreover, niclosamide is a poor glass former; in other words, the molecule tends to recrystallize, and it is virtually impossible to generate a stable amorphous solid employing the neat molecule. To overcome these challenges, we developed an amorphous solid dispersion (ASD) of niclosamide using hot-melt extrusion (HME). Unexpectedly, this ASD generated nanoparticles during its dissolution, increasing niclosamide's apparent solubility by more than 60-fold (i.e. from 6.6 ± 0.4 to 481.7 ± 22.2 $\mu\text{g/mL}$). The ASD material was characterized using differential scanning calorimetry (DSC), X-ray diffraction (XRD), nuclear magnetic resonance (NMR), and Fourier-transform infrared (FTIR). The nanoparticles were observed by dynamic light scattering (DLS), and their properties were confirmed by cryogenic transmission electron microscopy (cryo-TEM) and Wide-angle X-ray scattering (WAXS). The nanoparticles are amorphous, with a mean particle size of about 100 nm. These amorphous nanoparticles act as drug reservoirs, increasing drug diffusion, as determined in vitro by using side-by-side diffusion cells. These in vitro tests were translated to a rat model that also showed increased oral bioavailability in Sprague-Dawley rats. Nevertheless, niclosamide ASD undergoes recrystallization in acidic media, and an enteric oral dosage form was needed for its translation into the clinic. Initially, niclosamide ASD was formulated using commercial enteric capsules and as enteric-coated tablets. The enteric dosage forms were tested using pH-shift dissolution and acid-uptake tests, using the USP type II dissolution apparatus and the disintegration apparatus, respectively. The capsules exhibited a higher weight gain percentage and visual rupture. In contrast, enteric-coated tablets protected the formulation from acid ingress and maintained the performance of niclosamide ASD granules during dissolution. These enteric-coated tablets were administered to beagle dogs at a niclosamide dose of 75 mg/kg, resulting in plasma concentrations of niclosamide higher than those reported in the literature using solubilized niclosamide at a higher dose (i.e., 100 mg/kg).

In summary, an enteric oral dosage form of niclosamide ASD was formulated without hindering

the generation of nanoparticles while maintaining the increase in the niclosamide's apparent solubility.

References

- [1] Jara, M.O. et al. (2023), doi.org/10.1016/j.jddst.2023.104187.
- [2] Jara, M.O. et al. (2022), doi.org/10.3390/pharmaceutics14122568.
- [3] Jara, M.O. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.ijpharm.2021.120701.
- [4] Jara, M.O. et al. (2021), doi.org/10.3390/pharmaceutics13010097

Exploring the influence of traction speeds on nanoparticle penetration through molecular simulation

Luis Espinoza Arcos
*Centro de Bioinformática
y Simulación Molecular
(CBSM), Universidad de
Talca, Talca, Chile*

Horacio Poblete
Vilches
*Centro de Bioinformática
y Simulación Molecular
(CBSM), Universidad de
Talca, Talca, Chile*

Cristian Vilos-Ortiz
*Facultad de Medicina,
Universidad de Talca,
Talca, Chile.*

Understanding the atomic-level mechanisms of nanoparticle (NP) penetration into cells is crucial for optimizing their biomedical applications and assessing potential biological effects. Today, it exist the need to investigate NP-cell interactions at the atomic level, highlighting the importance of advanced characterization techniques such as molecular simulations. Obtaining insights into NP internalization and intracellular fate will facilitate the design of safe and effective nanomaterials for targeted drug delivery and diagnostics.

In this study, our focus is on investigating the mechanical properties of biomimetic nanoparticles (NPs) and their interaction with cell membranes, with a specifically on cellular uptake. The intricate interactions between nanoparticles and lipid membranes play a crucial role in several biological processes and hold significant potential for future applications in nanomedicine. To investigate these interactions, we will employ coarse-grained models and molecular dynamics simulations utilizing the Martini 2 force field. Two membrane bilayer models will be constructed using 2-oleoyl-1-palmitoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (POPC) and cholesterol (CHOL). The nanoparticles under investigation consist of gold molecules, collectively forming a nano-biointerface [1]. Our objective is to assess the impact of different traction speeds on nanoparticle penetration through coarse-grained molecular simulations. Nanoparticles will be placed near a lipid membrane bilayer, and their movement along the Z axis will be simulated using varying traction speeds. We will evaluate the membrane deformation and pore closure during the penetration process to understand how different speeds affect these factors. The most promising simulation result from lipid membrane extraction will be selected, and umbrella sampling with GROMACS 2018.2 will be employed to calculate the free energy profile in different membrane models [2]. This analysis will provide insights into nanoparticle-membrane interactions under various conditions, contributing to our understanding of lipid membrane properties and their interactions with nanoparticles at different speeds.

Acknowledgments

Thanks to the Nano-biomaterials Laboratory, ND3 Lab. This work was supported by Fondecyt Regular N° 1211143 and 1201147.

References

- [1] Salassi S. et al. (2021), doi.org/10.1021/acs.jctc.1c00627
- [2] Hoffman C. et al. (2020), doi.org/10.1038/s41597-020-0391-0

Estudio de la formación de la corona proteica en nanopartículas magnéticas en un régimen dinámico

Danitza Caris^{1,2}

Natalia Hassan^{2,4,6}

Marcelo Kogan^{3,4}

¹Doctorado en Ciencia de los Materiales e Ingeniería de Procesos, Universidad Tecnológica Metropolitana

²Núcleo Milenio en NanoBioFísica

³Facultad de Cs. Qcas. y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Chile

⁴Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Chile

⁵Programa Institucional de Fomento a la I+D+i, Universidad Tecnológica Metropolitana.

La corona de proteínas es un fenómeno que implica la interacción entre nanopartículas y proteínas las cuales generan una cobertura en la superficie. Esta cobertura es una capa dinámica de proteínas que se adsorbe a la superficie de la NP mediante afinidad. Aunque estas interacciones se han estudiado principalmente utilizando métodos convencionales a escala de laboratorio [1], es importante destacar que hay una escasa cantidad de investigaciones centradas en comprender los efectos de un régimen dinámico inducidos en presencia de flujos [2]. Para ello se ha indagado en el uso de la microfluídica, que es una herramienta que se basa en el estudio y análisis de regímenes hidrodinámicos, permitiendo simular las propiedades físicas del torrente sanguíneo. Además de proporcionar información valiosa sobre las interacciones NPs-Proteínas en entornos dinámicos, la microfluídica también ofrece nuevas oportunidades para ensamblar y modificar nanomateriales de manera precisa, controlando sus propiedades fisicoquímicas de manera efectiva [3].

Es por esto, que esta investigación conlleva al estudio de la síntesis y funcionalización de nanopartículas magnéticas (MNPs) con polietilenglicol y ácido fólico, para entregar especificidad a células tumorales que contengan receptores de folato y su comportamiento al interactuar con distintas proteínas plasmáticas (fibrinógeno, mioglobina y albumina), mediante un régimen estático y dinámico, donde este último es estudiado por microfluídica. A través de la caracterización de los nanosistemas obtenidos, se ha observado que las NPs presentes en los microcanales afectan la estructura de las proteínas dependiendo de su dosis, lo que se atribuye a la formación de la corona proteica y por ende su recubrimiento total de su superficie [4]. Las caracterizaciones se han realizado a través de dispersión dinámica de la luz (DLS), potencial zeta (pZ), microscopía electrónica de barrido (SEM), espectrofotometría UV-Vis, dicroísmo circular (CD), entre otras.

Agradecimientos

Agradecimientos a los proyectos Núcleo Milenio en NanoBioFísica NCN2021_021, Fondecyt Regular 1230830, proyecto interno UTEM LPR21-09, Fondap 15130011 y Concurso asistente de investigación de la Universidad Tecnológica Metropolitana.

Referencias

- [1] J. Piella et al. (2017), doi.org/10.1021/acs.bioconjchem.6b00575
- [2] Martens U. et al. (2020), doi.org/10.1039/d0nr04181e
- [3] Zhang L. et al. (2020), doi.org/10.1021/acsabm.9b00853
- [4] Orellana N. et al. (2021), doi.org/10.1039/D1NR03179A

Synthesis and testing of biocompatible and photocurable resins for 3D printing by modifying TPMS structure for use in bone regeneration

Nicolás Francisco Acuña
Ruiz

*Programa PhD en
Ciencia de Materiales e
Ingeniería de Procesos,
Universidad Tecnológica
Metropolitana, Santiago,
Chile*

Carmen Mabel
González Henríquez

*Programa PhD en
Ciencia de Materiales e
Ingeniería de Procesos,
Universidad Tecnológica
Metropolitana, Santiago,
Chile*

Mauricio Alejandro
Sarabia Vallejos

*Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián, Sede
Santiago, Santiago,*

Nowadays, bone implants are a widely used solution to the increasing problem of bone diseases in which a significant part of the tissue is lost due to pathology evolution. However, the high demand for implants contrasts with their limited availability. Therefore, tissue engineering (TE) [1] emerges as a discipline that provides the necessary knowledge to implement biocompatible scaffolds using 3D printing technology and various materials. These implants, also known as scaffolds, must meet several fundamental requirements. Biocompatibility is a prominent aspect, as the material used should promote cell proliferation, tissue adhesion, and generate appropriate gene signaling in the surrounding environment. In the case of bone tissue, the scaffold material should also act as a guide for the growth of new tissue while exhibiting high internal interconnectivity to facilitate vascularization, innervation, and nutrient transport.

Additionally, the material should possess appropriate mechanical strength to withstand the loads and deformations typically experienced by bone tissue. Consequently, this research aims to develop a resin that, with the parameters provided by TE, fulfills the crucial factors for generating a biocompatible implant. With recent advancements in additive manufacturing (AM), or 3D printing, a promising option for developing patient-specific pieces is the use of minimal triply periodic surface (TPMS) [2] structures. These mathematical surfaces with zero local curvature are designed to redistribute the internal stresses of the material, thus minimizing the possibility of local stress concentration (stress raisers), which could lead to fractures and material failure. These TPMS structures mimic the characteristic porosities of bone tissue, eliminating the need for porogen agents and allowing for the incorporation of various bioactive agents to enhance biocompatibility and mechanical strength further.

In this context, a biocompatible and bioactive photocurable resin has been synthesized to create complex hierarchical structures using digital light processing (DLP) technique. These resins are based on blends of polyethylene glycol diacrylate (PEGDA575) and acrylic acid (AAc), using Irgacure 1173 as a photoinitiator. Additionally, nanohydroxyapatite (nHA) and β -tricalcium phosphate (β -TCP) are added to improve the biocompatibility, bioactivity, and mechanical resistance of the fabricated 3D pieces. The printability was evaluated to create the scaffolds, combining different types of TPMS structures, to study their morphological, mechanical, and chemical behavior.

Acknowledgments

The authors recognize the financial support from FONDECYT Grant N° 1220251 and N° 11230427.

References

- [1] Ruvalcaba-Paredes et al. (2022), doi.org/10.35366/105480
- [2] Dong, Z. & Zhao, X. (2021), doi.org/10.1016/j.engreg.2021.09.004

Evaluación hidrodinámica de nanopartículas de oro por microfluídica para cultivo celular

Sabina Arias

Programa Institucional de Fomento a la I+D+i, Universidad Tecnológica Metropolitana, San Joaquín / Millennium Nucleus in NanoBioPhysics (N2BP).

Marcelo Kogan

Laboratorio de Nanobiotecnología, Universidad de Chile, Independencia / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Independencia, Santiago, Chile

Natalia Hassan

Programa Institucional de Fomento a la I+D+i, Universidad Tecnológica Metropolitana, San Joaquín / Millennium Nucleus in NanoBioPhysics (N2BP) / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Independencia, Santiago, Chile

Las nanopartículas de diversos materiales se estudian en medicina para diferentes aplicaciones, entre ellas, diagnosticar y tratar enfermedades, como es el caso de nanopartículas de oro (NPOs) para cáncer. La investigación de nuevos compuestos con potencial terapéutico se divide en fases preclínicas, clínicas y comerciales. En pruebas in vitro y modelos animales existe una alta efectividad en la inhibición del crecimiento tumoral, pero a nivel clínico la eficacia disminuye [1]. La evaluación de las NPOs con células se realiza en cultivos tradicionales estáticos que no contemplan la dinámica de fluidos. Los fluidos presentan diferencias de una macroescala a una microescala, en esta última su comportamiento depende principalmente de la tensión interfacial, fricción de la pared y viscosidad, a su vez permite una mayor transferencia de masa por la gran relación entre área superficial y volumen [2]. Una forma de simular el movimiento es por microfluídica, una herramienta que permite analizar la mecánica de fluidos a escala micrométrica afín a la escala celular, pudiendo representar la interacción in vivo más cercano a la realidad.

En esta investigación se ha sintetizado y caracterizado NPOs de geometría esférica y varillas de similar área superficial mediante la reducción de oro y crecimiento por semilla. Para direccionar estos nanosistemas hacia un futuro cultivo celular es que se funcionaliza su superficie con polietilenglicol (PEG) que evita la adsorción de proteínas de la sangre aumentando su tiempo en el sistema, y ácido fólico (AF) que permite unirse a receptores de folato que son sobreexpresados en algunos tipos de cáncer. Por lo tanto, con el fin de evaluar la estabilidad de las nanopartículas funcionalizadas en un régimen dinámico, se comparó la estabilidad de estas nanopartículas en diferentes soluciones (agua, PBS y medio de cultivo celular), también en un régimen estático. Las nanopartículas fueron inyectadas en un microdispositivo con un diseño que cuenta con canales de 200 μm que conectan a una zona central de 4,5 mm para futuro cultivo celular. Esto se realizó a diferentes caudales (1 mL/hr; 2,5 mL/hr; 5 mL/hr; 7,5 mL/hr y 10 mL/hr, y se determinó para cada ensayo su diámetro hidrodinámico y polidispersidad por dispersión de luz dinámica (DLS), potencial zeta por dispersión de luz electroforética (ELS), resonancia del plasmón superficial por espectroscopia UV-Vis y morfología por microscopia electrónica de barrido (SEM).

La optimización de los ensayos preclínicos mejorará la predictibilidad, reducirá la tasa de fracaso en ensayos clínicos, se podrá entender los mecanismos de acción de manera más realista y obteniendo resultados rigurosos en la etapa inicial del desarrollo de nanosistema.

Agradecimientos

La presente investigación se realiza gracias a Núcleo Milenio en NanoBioFísica NCN2021_021; FONDECYT Regular N° 1230830; Proyecto Interno de Fomento a la I+D+i o Creación: “Proyectos Regulares de Investigación” LPR21-09 UTEM; Centro de estudios avanzados de enfermedades crónicas (ACCDiS) Fondap N° 15130011; ANID BECAS/DOCTORADO NACIONAL 21232345.

Referencias

- [1] Matteo Turetta et al. (2018), doi.org/10.2174/0929867325666180605122633
- [2] Natalia Hassan et al. (2014), doi.org/10.2174/1568026614666140118213915

Synthesis and characterization of lipid core micelles (LCM) loaded with peptides with therapeutic potential

Fernanda Sotomayor
*Drug Delivery Laboratory,
Departamento de
Ciencias y Tecnología
Farmacéuticas,
Universidad de Chile /
Advanced Center for
Chronic Diseases
(ACCDiS) / Center of
New Drugs for
Hypertension (CENDHY)*

Diego Silva
*Drug Delivery Laboratory,
Departamento de
Ciencias y Tecnología
Farmacéuticas,
Universidad de Chile /
Advanced Center for
Chronic Diseases
(ACCDiS) / Center of
New Drugs for
Hypertension (CENDHY)*

Javier Morales M.
*Drug Delivery Laboratory,
Departamento de
Ciencias y Tecnología
Farmacéuticas,
Universidad de Chile /
Advanced Center for
Chronic Diseases
(ACCDiS) / Center of
New Drugs for
Hypertension (CENDHY)*

In recent decades, research in pharmaceutical sciences has focused on enhancing the permeability of biologically active substances across biological barriers, employing new strategies such as the development of nanocarriers for the delivery of peptides as potential drugs. The administration of peptides has long been regarded as a challenging formulation endeavor due to their multiple stability issues [1]. As biological drugs, enzymes recognize peptides in the bloodstream, leading to rapid degradation and short half-life. Furthermore, they are susceptible to gastric pH and can be metabolized by gut enzymes, which hinders their oral administration. Nanotechnology advancements have developed various nanoparticle-based drug delivery systems, which encapsulate active substances, protecting them from the external environment and improving their efficacy by enhancing permeation and, thus, their bioavailability [2, 3].

Among lipid-based nanoparticles, lipid core micelles (LCM) are colloidal hybrid polymer-lipid nanoparticles with a hydrophobic core and a hydrophilic shell. These micelles can encapsulate both hydrophilic and lipophilic peptides [4]. In this work, LCMs were synthesized using a low-energy hot emulsification process described by Chou WH et al. [2], with modifications. During synthesis, the decrease in the system's free energy enables the rearrangement of particles and the spontaneous formation of micelles. The fatty acid chains align in the core, forming the lipophilic core, while the polar heads and PEG fragments reside on the surface, forming the hydrophilic shell [5].

The stability of the micelles is attributed to the steric hindrance provided by the PEG fragments on the surface. The physicochemical characterization was assessed using a Zetasizer Nano ZS. The hydrodynamic diameter (HD) was measured by dynamic light scattering, yielding a value of 14.9 ± 0.1 nm. The polydispersity index (Pdl) was determined as 0.224 ± 0.012 . The zeta potential (ZP) of -2.8 ± 0.1 was measured using laser Doppler electrophoresis on the same instrument. HPLC-DAD was employed for peptide quantification, yielding an encapsulation efficiency (EE) of 91% and a loading percentage (DL) of $92 \times 10^{-3}\%$ of the system through indirect quantification.

These experimental results demonstrated that lipid core micelles exhibit a small size, which could enhance peptide permeability across biological barriers. Furthermore, the micelles showed low dispersity, rendering them reproducible. Regarding the EE, the results indicate that this system efficiently encapsulated hydrophilic peptides, positioning it as a promising peptide carrier system with the potential for delivering biologically active peptides as drugs.

Acknowledgments

Acknowledgments: This work was funded by Regular FONDECYT Project 1231154, ANID/PIA/ACT192144, FONDAP Project 15130011, and Fondecuip EQM170111(FE-SEM) all granted by ANID.

References

- [1] Al Musaimi O., Lombardi L. et al. (2022), [doi.org/doi.org/10.3390/ph15101283](https://doi.org/10.3390/ph15101283)
- [2] Chou, WH. et al. (2020), doi.org/10.3390/pharmaceutics12121168
- [3] Ortiz, A. C, et al. (2021), doi.org/10.3390/pharmaceutics13040531
- [4] Fritz, H. F. et al. (2018), doi.org/10.1007/s13346-018-0521-9
- [5] Poovi Ganesan. et al. (2017), doi.org/10.1016/j.scp.2017.07.002

Trans-Cis switching of proline for peptide design on functional surfaces

Eduardo Cubillos Llantén

*Centro de Bioinformática
y Simulación Molecular
(CBSM), Universidad de
Talca, Talca, Chile.*

Horacio Poblete Vilces

*Centro de Bioinformática
y Simulación Molecular
(CBSM), Universidad de
Talca, Talca, Chile.*

Jeffrey Comer

*Department of Anatomy
and Physiology College
of Veterinary Medicine,
Kansas State University*

In recent years, there has been growing interest in exploring the conformational dynamics of proline-based peptides, specifically focusing on its ζ dihedral angle [1]. In this study, we delve into the Trans and Cis conformations of proline's ζ angle and its implications for the rational design of peptides with self-assembling capabilities on diverse surfaces, such as graphene, h-Boron Nitride (hBN) and polyethylene. The ζ angle plays a pivotal role in dictating the structural properties and stability of peptides. By conducting comprehensively exploration of the free-energy landscapes associated with proline's ζ angles in combination with others aminoacids, our aim is to establish a robust framework for selection of specific amino acids and the design of peptide sequences capable of attaining desired self-assembly behavior on graphene, hBN, and polyethylene surfaces.

We use classical molecular dynamics to realistically simulate the motion and interactions of molecules. Specifically, we strategically incorporated proline residues in dipeptides with XX-Pro or Pro-XX motifs, allowing us to precisely modulate the self-assembly propensities of peptides and guide their folding behavior in solution. To overcome the limitations of traditional sampling methods, we employed enhanced sampling techniques, such as the adaptive bias force (ABF) method, which provided a more accurate representation of the conformational landscape. This approach enabled us to explore the energy landscape efficiently and obtain conformations that represent the most stable states.

Our analysis focused primarily on the ζ angle, a key determinant of conformational preferences and stability in molecules. By combining the information derived from the energy profiles of the ζ angle with two-dimensional ABF simulations involving both ζ and ψ angles, we gained valuable insights into the optimal conformations in solution with the surfaces.

Computational findings demonstrate that gaining a comprehensive understanding of the energetic minima and transitions of the ζ angle provides valuable insights into the folding patterns and stability of cyclic peptides. Furthermore, the potential of peptides to self-assemble on graphene and hBN surfaces holds great promise for diverse applications. In addition to their conventional roles in biomedicine and industrial uses, such as drug delivery systems or nanomaterials, peptides with self-assembling properties can now be employed in emerging fields like surface functionalization. By harnessing the unique properties of graphene, hBN, and polyethylene surfaces, we can potentially tailor the self-assembly behavior of peptides to achieve enhanced functionality and performance.

Acknowledgments

Thanks to the Universidad de Talca and the Nano-biomaterials Group. This work was supported by Fondecyt Grant No. 1211143.

References

[1] Karplus, M. et al (1994), doi.org/10.1021/ja00105a036

Raúl Sepúlveda Verdugo

Universidad de Talca

Cristian Vilos Ortiz

Universidad de Talca

Gabriela Moya Moya

Universidad de Talca

Evaluación de la ruta internalización de nanopartículas poliméricas híbridas (lípidos-polímero) en líneas celulares de cáncer colorrectal

La nanotecnología corresponde al área de estudio de nanomateriales, siendo un espacio multidisciplinario en pleno desarrollo capaz de adaptarse a cada una de las áreas de la ciencia. En la actualidad, investigaciones biomédicas han empleado la nanotecnología basada en nanopartículas poliméricas para el análisis y la formulación de terapias sitiodirigidas específicas; las nanopartículas son estructuras que poseen un tamaño que se encuentra en el orden de los 10 a 500 nm, y cuentan con diferentes métodos para su síntesis tales como fosfolípidos con distintos grupos terminales, entre otros. Dado a estos componentes se otorgan características fisicoquímicas particulares tales como tamaño, estabilidad e inclusive internalización a cada nanosistema lo que conlleva función y propiedades farmacológicas siendo un potencial alternativo para el tratamiento de variadas enfermedades. En base a literatura, las nanopartículas poliméricas han logrado diferenciarse de aquellas denominadas como convencionales, debido a que estudios no han reportado daños citotóxicos al organismo humano y cabe destacar que las nanopartículas sintetizadas a base de polímero predominan en los ensayos experimentales y procesos que correspondan al estudio o evaluación de internalización en el espacio intracelular con la finalidad de emplear nanoportadores cargados con fármacos quimioterapéuticos en su interior; sin embargo, las rutas de señalización que siguen las nanopartículas no están lo suficientemente estudiadas en la actualidad. Por tanto, el estudio y análisis nanopartículas poliméricas nos abre un sinfín de posibilidades a partir de la sinergia entre la nanotecnología y la nanomedicina para la generación de múltiples beneficios para el tratamiento de enfermedades humanas por medio de la entrega de medicamentos o tratamientos farmacológicos sitiodirigidos orientados a objetivos específicos con diversos agentes bioactivos o biológicos, quimio e inmunoterapéuticos. El objetivo de esta investigación se enfocó en analizar la síntesis de nanopartículas poliméricas recubiertas con distintas formulaciones de fosfolípidos y su posterior internalización con el fin de evidenciar diferencias en el proceso de internalización a células de cáncer colorrectal al momento de utilizar polietilenglicol con grupos terminales distintos. En base a esto, por medio de la realización de distintos procedimientos experimentales fue posible establecer una evaluación de la estabilidad y proceso de internalización y de forma indirecta la internalización al espacio intracelular a través de fluorescencia producida por el reactivo lysotracker DND-26 lo cual nos generaba un marcaje de los lisosomas en conjunto con las nanopartículas poliméricas ya internalizadas. Se aspira

con los resultados obtenidos aumentar el conocimiento para facilitar a futuras investigaciones desarrollarse en el área y de esta forma abrir nuevos caminos al conocimiento sobre conceptos de internalización de nanopartículas poliméricas.

Agradecimientos

Al centro investigativo ND3, al laboratorio de nanomedicina de la Universidad de Talca; también de forma especial al Dr Cristian Vilos Ortiz por prestar las instalaciones de su laboratorio y centro investigativo para llevar a cabo el proceso experimental de nuestro trabajo en conjunto.

Referencias

- [1] Yameen B. et al. (2014), doi.org/10.1016/j.jconrel.2014.06.038
- [2] Brittany L. et al. (2015), doi.org/10.1002/wnan.1364
- [3] Arnold A. E. et al. (2017), doi.org/10.1016/j.jconrel.2017.02.019

Síntesis y caracterización de nanopartículas de oro recubiertas por nanoclusters de oro-albúmina conjugados con ácido fólico a través de microfluídica para aplicaciones en nanomedicina

Verena Cárdenas Ríos

*Magíster en Química
mención Tecnología de
los Materiales,
Universidad Tecnológica
Metropolitana (UTEM)*

Natalia Hassan López

*Programa Institucional de
Fomento a la I+D+i,
Advanced Center of
Chronic Disease
(ACCDiS), Millenium
Nucleus in
NanoBioPhysics*

Simón Guerrero Rivera

*Advanced Center of
Chronic Disease
(ACCDiS), Instituto de
Investigación
Interdisciplinar en
Ciencias Biomédicas,
Facultad de Ciencias de
la Salud, Universidad
SEK (I3CBSEK)*

Las nanopartículas esféricas de oro (AuNPs) son nanomateriales que exhiben interesantes propiedades químicas, físicas y biológicas. Estas propiedades han conseguido que sean ampliamente utilizadas en campos farmacéuticos y bioquímicos para la obtención de imágenes, en la administración de fármacos, en terapia fotodinámica, fototérmica y teragnosis [1]. Por otro lado, los nanoclusters de oro (AuNC) son cúmulos que poseen menos de cien átomos estabilizados, con fuertes propiedades ópticas y electrónicas. Estos nanoclusters pueden ser sintetizados mediante una vía “dirigida por proteínas”, lo que genera nanomateriales biocompatibles, fotoluminiscentes y fotoestables [2].

Una proteína plasmática que se ha estudiado para la funcionalización de estos nanomateriales es la albúmina, la cual posee múltiples dominios que podrían ser aprovechados para el transporte de fármacos, además de contar con un sitio específico de unión a metales [3]. Además, la albúmina se puede conjugar con ácido fólico para otorgar direccionalidad a estos nanomateriales, de esta forma, podrían ser transportados mediante endocitosis por receptores de folato (FR). Estos son proteínas unidas a la membrana en la superficie celular, las cuales se sobreexpresan ampliamente en muchos tipos de tejidos cancerosos [4].

El objetivo de este trabajo fue generar un nanosistema portador de fármacos basado en nanoclusters y nanopartículas de oro mediante microfluídica. Se utilizó la afinidad de una proteína plasmática como la albúmina para generar nanoclusters de oro-albúmina, que después se utilizaron como recubrimiento de las nanopartículas de oro. Todo esto con el propósito de mantener las propiedades de resonancia plasmónica superficial, la fluorescencia, la biocompatibilidad y ser direccionados con AF a través de los receptores de folato. Estas síntesis se realizaron mediante microfluídica para explorar el procesamiento de fluidos en pequeñas cantidades, donde las interacciones se llevan a cabo en un entorno dinámico simulando lo que ocurre en el torrente sanguíneo [5]. Se han obtenido los clústers fluorescentes de oro-albúmina de 500 pm y las nanoesferas de oro 16,4 nm aprox.

Agradecimientos

Se agradece al proyecto Fondecyt Inicio 11221282, al proyecto Núcleo Milenio en Nanobiofísica y el proyecto interno LPR21-09 UTEM.

Referencias

- [1] Bolaños K. et al. (2019), doi.org/10.2147/IJN.S210992
- [2] Xie J. et al. (2009), doi.org/10.1021/ja806804u
- [3] Vijayamma R. et al. (2022), doi.org/10.1016/B978-0-323-88657-4.00014-4
- [4] Li J. et al. (2015), doi.org/10.1039/C5TB00633C
- [5] Niculescu A-G. et al. (2021), doi.org/10.3390/ijms22042011

Desarrollo de un nanosistema termosensible para la liberación controlada del fármaco cardioprotector SAHA

Pablo Reyes Bazaez
Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile / Departamento de Bioquímica y Biología Molecular Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile.

Sergio Lavandero
Departamento de Bioquímica y Biología Molecular Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Chile / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Independencia, Santiago, Chile.

Marcelo Kogan
Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Independencia, Santiago, Chile

Introducción: Las enfermedades cardiovasculares, en especial aquellas que afectan a las arterias coronarias del corazón generando isquemia, son las patologías que presentan los mayores niveles de morbi-mortalidad. La nanotecnología brinda herramientas para su tratamiento de modo de facilitar el acceso de fármacos al sitio blanco. El ácido hidroxámico suberoilánilida (SAHA) se está estudiando para su eventual uso en otras patologías, como la isquemia miocárdica. Sin embargo, SAHA presenta una baja solubilidad y baja permeabilidad. El objetivo del presente trabajo consistió en desarrollar liposomas termosensibles recubiertos con nanopartículas de oro que permite la liberación fototérmica sitio dirigida de SAHA en un modelo ex vivo de corazón isquémico con posterior reperfusión para disminuir la zona de riesgo de muerte celular y mejorar la presión ventricular.

Metodología: Se desarrolló un nanosistema que contiene SAHA en liposomas termosensibles conjugados con nanopartículas de oro. Para este fin, los liposomas se obtuvieron por el método de hidratación del film lipídico seguido de por etapas de extrusión. La síntesis de las nanopartículas de oro conjugadas en los liposomas se promueve mediante una reacción de reducción de la solución HAuCl_4 en presencia de los liposomas y con ácido ascórbico como agente reductor. Posteriormente, los nanosistemas se caracterizaron por espectrofotometría UV-visible, dispersión dinámica de la luz, potencial zeta y microscopía electrónica de transmisión (TEM); el tamaño de los liposomas se sitúa entre los 100 ± 31 nm y al agregar el oro pasan a 190 ± 48 nm aproximadamente con baja polidispersidad (0,06 y 0,2 respectivamente) y un potencial Zeta menor a $+3 \pm 2$ mv. en liposomas y de $+30 \pm 8$ mv. al recubrir con oro, se genera una banda de absorbancia NIR (infrarrojo cercano) en los 750 nm aproximadamente, indicando la presencia de oro en los liposomas. Este sistema permitirá realizar la entrega del fármaco de forma selectiva en modelos ex vivo (Langendorff) de corazón isquémicos de rata (con posterior reperfusión), por medio de irradiación con láser infrarrojo para la liberación del compuesto de manera controlada espacial y temporal, midiendo mediadores de muerte celular y función del ventrículo izquierdo.

Agradecimientos

Proyectos: Fondecyt 1211482, Fondap 15130011, Anillo 210068.

Referencias

- [1] Xie M. et al. (2014), doi.org/10.1161/CIRCULATIONAHA.113.002416
- [2] Bejarano J. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.jconrel.2020.11.002

Turn-on nanogenosensor for on-site diagnosis of *Leptospira interrogans* serovar Hardjoprajitno through smartphone-based imaging

Diego Jara

*Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián, Concepción,
Chile.*

Patricio Oyarzún

*Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián, Concepción,
Chile.*

Víctor Díaz-García

*Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián, Concepción,
Chile.*

Leptospirosis is a zoonotic disease with worldwide distribution that affects domestic, wild, and exotic animals, as well as productive species of interest such as cattle and swine. It is caused by gram-negative spirochetes *Leptospira* spp., producing losses in the livestock sector associated to decreases in milk production, feed/meat conversion, infertility or subfertility, birth of weak animals and abortions [1]. In cattle and swine, *Leptospira interrogans* serovar Hardjo Prajitno (LiHP), *Leptospira borgpetersenii* serovar Hardjo Bovis (LiHB) and *Leptospira kirschneri* serovar Grippotyphosa (LkGr) are the most prevalent pathogens. Although LiHB is the serovar isolated in most cases of leptospirosis (81%), LiHP is the most important serovar to be identified due to its dangerousness, with a high rate of abortions (30% of total cases) [2].

Several methods are available for the detection of *Leptospira* spp., including PCR, ELISA, and the microscopic agglutination test (MAT). MAT is the gold standard for serological diagnosis of *Leptospira* serovars indicated by OIE [1], however; it is laborious, expensive, time consuming and interpretation of the results is subjective with high variation results between laboratories, and it is often unable to differentiate LiHP from LiHB and LkGr. In this context, direct detection is required for an accurate diagnostic [1, 3].

In this work, we study the development of a turn-on nanogenosensor (NGS) coupled with smartphone technology for specific detection of LiHP. The NGS is based on four components: 1) CdTe QDs, 2) LiHP-specific DNA probes (SH-DNA) binding to the surface of QDs, 3) a fluorescence quencher bound to a DNA sequence complementary to LiHP probe (BHQ-DNA), which inhibits the fluorescence signal of QDs-DNA, 4) the smartphone application (QDsReader) that processes the fluorescence signal and implements a straightforward reading of the results for LiHP presence through a decision algorithm.

The DNA probe was bioinformatically designed to bind to a highly specific region of LiHP genomic DNA, based on genome alignment tools (Brig [4] and Mauve [5]). Two DNA probes (40bs) were selected meeting the criterion of 100% identity for LiHP and no identity for LiHB or LkGr. These probes were used to generate the NGSs under optimal conditions and to study their bioanalytical parameters using control samples with synthetic DNA.

These results support further validation with real animal samples enabling on-site diagnosis of LiHP, given this method combines portability, rapidity of response and objectivity associated with a quanti-tative detection principle and the use of software for rapid result reading.

References

- [1] Ana P. Loureiro et al. (2020), doi.org/10.1016/j.theriogenology.2019.09.011
- [2] Alejandro Llanes et al. (2016), doi.org/10.1371/journal.pone.0159387
- [3] Sedigheh Zakeri et al. (2009), doi.org/10.4269/ajtmh.2010.09-0721
- [4] Nabil-Fareed Alikhan et al. (2011), doi.org/10.1186/1471-2164-12-402
- [5] Aaron C.E. Darling et al. (2004) www.genome.org/cgi/doi/10.1101/gr.2289704

Obtaining gold nanorods modified with folic acid, coated with albumin through microfluidics for applications in cancer

Natalia Arancibia Realpe
*Universidad Tecnológica
Metropolitana, Núcleo
Milenio en NanoBioFísica*

Andreas Tapia
*Programa Institucional de
Fomento a la I+D+i (
Universidad Tecnológica
Metropolitana), Núcleo
Milenio en NanoBioFísica*

Natalia Hassan López
*Programa Institucional de
Fomento a la I+D+i
(Universidad Tecnológica
Metropolitana), Núcleo
Milenio en NanoBioFísica,
Advanced Center for
Chronic Diseases
(ACCDiS)*

Nanotechnology is a rapidly developing scientific field that focuses on improving and creating materials with nanometer-scale dimensions and shapes. In particular, there has been increasing interest in the use of anisotropic gold nanoparticles due to their potential applicability in nanomedicine. These particles have optical properties that could be used in the design of new therapeutic techniques, such as those for the treatment of cancer [1]. In this context, the synthesis and surface modifications of gold nanoparticles through functionalization with various biological molecules or target molecules have played a fundamental role in the field of nanomedicine [2]. However, the study of its interaction with blood proteins is essential due to the unavoidable formation of a crown of proteins (CP) on the surface of gold nanoparticles because these could prevent them from reaching their destination, being considered to be used as possible drugs, treatment and/or diagnosis. Therefore, this work studied the interaction of gold nanorods (AuNR) functionalized with polyethylene glycol (PEG) (to reduce their interaction with biomolecules) and with folic acid (FA) (to increase the specificity with tumor cells) with albumin, one of the most abundant proteins in the bloodstream [3], the latter being carried out through microfluidics, through different flows, to simulate its movement in the bloodstream [4]. The obtained nanoparticles were characterized by dynamic light scattering (DLS), Z potential, scanning electron microscopy (SEM) and UV-Vis spectroscopy, where the obtained AuNRs obtained demonstrated the characteristic localized surface plasmon resonance (LSPR) bands [5], even after functionalization with PEG and folic acid. Changes in the microfluidic evaluation of the interaction of the functionalized AuNRs (AuNR-PEG- AF) with albumin were observed, concluding that the dynamics of CP formation in AuNR-PEG-AF depends on the flow rate conditions.

Acknowledgments

Millennium Nucleus Project in NanoBioPhysics NCN2021_021, Fondecyt Regular 1230830, internal project UTEM LPR21-09 and Fondap 15130011.

References

- [1] Zhu J. et al. (2010), doi.org/10.1088/0957-4484/21/28/285106
- [2] Almada M. et al. (2016) , [doi.org/10.1166 / jnn.2016.12438](https://doi.org/10.1166/jnn.2016.12438) Jul 1;16(7):7707–14.
- [3] Rostro-Kohanloo BC. et al. (2009), doi.org/10.1088/0957-4484/20/43/434005.
- [4] Digiacomio L. et al. (2019), doi.org/10.1039/c9lc00341
- [5] Pérez-Juste J. et al. (2005), doi.org/10.1016/j.ccr.2005.01.030

Micelas de núcleo lipídico como sistema de entrega y liberación de ciprofloxacino

Dania Martínez Araya
*Departamento de
Ciencias Farmacéuticas,
Facultad de Ciencias,
Universidad Católica del
Norte, Antofagasta, Chile*

Miguel Ángel Cabrera
Pérez
*Departamento de
Ciencias Farmacéuticas,
Facultad de Ciencias,
Universidad Católica del
Norte, Antofagasta, Chile*

Wai-Houng Chou Kam
*Departamento de
Ciencias Farmacéuticas,
Facultad de Ciencias,
Universidad Católica del
Norte, Antofagasta, Chile*

Uno de los antibióticos más prescritos en Chile es el ciprofloxacino. Este se considera como un fármaco de segunda generación de las fluoroquinolonas. Presenta un amplio espectro, teniendo mayor actividad hacia gram-negativos, incluyendo a *Pseudomonas aeruginosa* [1]. El ciprofloxacino se puede describir como un principio activo de clase IV, según el Sistema de Clasificación Biofarmacéutica, es decir, que presenta baja solubilidad acuosa y baja permeabilidad [2]. Esto genera una gran limitante en las formulaciones para un óptimo transporte y absorción oral, afectando a la biodisponibilidad del fármaco y, por ende, su efecto terapéutico final [3].

El objetivo de este estudio experimental fue desarrollar micelas de núcleo lipídico asociadas con ciprofloxacino como potencial sistema para el transporte y entrega de este antibiótico, para contribuir con mejorar los problemas farmacocinéticos, mejorando la actividad y reduciendo sus efectos secundarios. La elaboración fue realizada mediante el método de emulsificación en caliente de baja energía [4]. Tras ensayos previos de carga del fármaco en las micelas de núcleo lipídico, se seleccionó una dosis de 4,0 mg de ciprofloxacino. Una vez obtenidas las micelas con el principio activo se determinaron las propiedades fisicoquímicas, obteniéndose micelas en escala nanométrica ($13,9 \pm 2,5$ nm), y cargadas positiva o negativamente ($-13,6 \pm 2,8$ mV). Además, se logró determinar una alta eficiencia de asociación de ciprofloxacino en las micelas ($90,3 \pm 2,0\%$). En términos de liberación del principio activo en buffer fosfato salino (pH 7,4) a 37 °C, se pudo observar una liberación explosiva inicial de 43,4% y 67,2% a 1 y 6 h, manteniéndose estable hasta las 24 h (67,9%). Finalmente, el perfil de liberación se bajo distintos modelos farmacocinéticos, en donde el modelo de Peppas-Sahlin fue el mejor que se ajustó (R^2 de $0,94 \pm 0,02$), indicando que el mecanismo de liberación fue un mecanismo dual dependiente de la difusión fickiana y erosión/hinchamiento del sistema en el medio acuoso. Por lo tanto, en base a los resultados obtenidos, las micelas de núcleo lipídico constituye un sistema de transporte y entrega potencial para el antibiótico ciprofloxacino.

Referencias

- [1] Carrillo-Alduenda et al. (2018), doi.org/10.24245/mim.v34i1.1429.
- [2] Miranda-Pérez et al. (2020), doi.org/10.4321/s1699-714x2020000400009.
- [3] López (2015) ISSN electrónico: 2215-3586.
- [4] Chou et al. (2020), doi.org/10.3390/pharmaceutics12121168.

Enhancing anticancer drug release through stimuli-responsive transferrin-gated silica nanocarriers: tuning a pH-sensitive framework versus pH-sensitive surface linker

Francisco Arriagada
Universidad Austral de Chile

Andrea Ortiz
Universidad San Sebastián

Alejandro Jerez
Universidad Austral de Chile

Javier Morales
Universidad de Chile

Introduction: Stimuli-responsive nanosystems has emerged as a promising approach to improve the anticancer drug delivery, due to the increase in the specificity of spatio-temporal release. Understanding the design of nanosystems and its impact on drug release is crucial for enhancing intracellular performance. Following cellular uptake, intracellular trafficking and the duration of these processes can significantly influence the efficacy of nanomedicine [1,2]. Therefore, in this work we aimed to develop, characterize, and evaluate the release kinetics of doxorubicin (DOX) from pH-responsive transferrin gated mesoporous silica nanoparticles, using two strategies: a pH-sensitive surface linker (MSN) and a pH-sensitive framework (dMSN).

Methods: The pH-based stimuli-sensitive feature of the nanosystems was achieved through two approaches: (i) using an imine bond in the pH-sensitive surface linker strategy (post-synthesis conjugation), and ii) incorporating an organosilane containing imine bonds (synthesis by co-condensation) [3]. The morphology of the nanoparticles synthesized by a modified Stöber method was observed by transmission electron microscopy. Characterizations were performed using dynamic light scattering, zeta potential, FT-IR spectroscopy, N₂ adsorption/desorption isotherms, thermogravimetry, UV-vis spectroscopy, and NMR. The release profiles were monitored at pH 7.4 and pH 5.0. Kinetic analysis was performed using conventional mathematical models such as zero-order, first-order, and power law. To evaluate the drug-matrix interaction, an empirical three-parameter compartmental model was used.

Results: Experimental results demonstrated the successful loading of DOX in mesoporous silica nanoparticles, with an average size of ca. 100 nm. Two types of nanoparticles were obtained: (1) those superficially functionalized with transferrin through an imine bond, and (2) those synthesized by co-condensation with an organosilane and subsequently surface-functionalized with transferrin. The release profiles exhibited a higher release at pH 5.0 compared to pH 7.4. Non-degradable nanomaterials followed zero-order kinetics for drug release, while DOX release from degradable matrix nanomaterials was better described by first-order kinetics. Additionally, non-Fickian anomalous transport mechanisms were observed in all release scenarios.

Conclusions: Tuning the framework of mesoporous silica nanoparticles to achieve controlled

release, including burst release, could be a better strategy to optimize anticancer drug delivery silica platforms.

Acknowledgments

This research was supported by ANID/FONDECYT iniciación 11200194 (F.A.), and ANID/FONDECYT regular 1221145 (J.M.).

References

- [1] Vtyurina N. et al. (2021), doi.org/10.1039/d1nr00901j
- [2] Cheng R. et al. (2023), doi.org/10.1016/j.bmt.2023.01.001
- [3] Travaglini L. et al. (2019), doi.org/10.1039/C8QM00438B

Ignacia Torres Fredes

Elizabeth Cortés

Marcelo Kogan

*Departamento de
química farmacológica y
toxicológica, Facultad de
ciencias químicas y
farmacéuticas,
Universidad de Chile*

Daniel Real

*Unidad de investigación y
desarrollo en tecnología
farmacéutica (UNITEFA,
CONICET, Argentina)*

Formulación de dispositivos impresos en 3D destinados a liberación controlada de fármacos mediante la incorporación de nanopartículas de oro de diferentes morfologías a materiales fotosensibles utilizando la técnica de impresión estereolitografía

Las nanopartículas de oro (NPs) generan calor al ser irradiadas gracias a sus propiedades plasmónicas. Esta característica depende del tamaño y la morfología de las partículas, lo cual puede aprovecharse para lograr la liberación controlada de sustancias activas, reduciendo así los efectos secundarios y evitando la liberación prematura en áreas no específicas. Los métodos de impresión en 3D ofrecen la posibilidad de combinar múltiples materiales en un mismo dispositivo, permitiendo incorporar nanopartículas y generar formulaciones innovadoras con geometrías especiales que son difíciles de lograr con otros métodos.

En este contexto, la estereolitografía se destaca como la técnica de impresión 3D con la mejor definición, además de trabajar en solución y sin requerir altas temperaturas. El objetivo de este estudio fue evaluar la inclusión de dos morfologías distintas de NPs de oro, nanoesferas (NEs) y nanobarras (NBs), en matrices poliméricas mediante la técnica de impresión 3D de estereolitografía. Esto permitiría lograr la liberación controlada de fármacos mediante la irradiación con dos longitudes de onda diferentes, 532 nm y 1064 nm.

Se obtuvieron nanoesferas con un tamaño de 27 nm y un plasmón a 532 nm, y nanobarras con una longitud de 60 nm, un ancho de 4 nm y un plasmón a 1086 nm. Como fármaco modelo, se utilizó la niclosamida. Se emplearon mezclas ternarias que combinaban un fotopolímero (PEGDA 250), un cosolvente (PEG400) y agua. Mediante el software DesignExpert se desarrolló un diseño de mezclas simples en donde se evaluó la solubilidad del fármaco en las mezclas ternarias y permitió determinar qué materiales permitían controlar la liberación del activo únicamente bajo la irradiación con la longitud de onda deseada.

Se seleccionaron 4 matrices en base a la solubilidad de la niclosamida y a su capacidad de impresión. Éstas se caracterizaron mediante estudios reológicos rotacionales, análisis termogravimétrico, calorimetría diferencial de barrido y espectroscopía infrarroja.

Posteriormente, se optimizaron dos materiales con el fin de lograr la menor liberación sin irradiación y la mayor liberación tras 15 minutos de exposición a las longitudes de onda en estudio. En el caso de la matriz con nanoesferas tras irradiación a 532 nm registró una

liberación creciente hasta 1,3 µg/mL donde se alcanzó una concentración constante desde los 10 hasta los 15 minutos, por otro lado, la matriz con nanobarras tras la irradiación a 1064 nm logró una liberación sostenida de 0,6 µg/ml alcanzando un plató de concentración a los 10 hasta los 15 minutos. Por último, se formularon dispositivos bicapa combinando las matrices con nanoesferas y con nanobarras, demostrando su capacidad para liberar de manera controlada y selectiva el fármaco, en base a la longitud de onda de irradiación.

Referencias

- [1] Báez D.F, et al. (2021), doi.org/10.2147/IJN.S260375
- [2] Healy A. V, et al. (2019), doi.org/10.3390/pharmaceutics11120645
- [3] Wang J, et al. (2016), doi.org/10.1016/j.ijpharm.2016.03.016
- [4] Lopez-Vidal, et al. (2022), doi.org/10.1016/j.ijpharm.2021.121311

Nanotransporters of therapeutic agents for colorectal cancer treatment: rational design of nanoparticles for drug encapsulation, transport, and release

Matías Rojas-Tapia

Center for Bioinformatics, Simulation, and Modelling (CBSM), Faculty of Engineering, Universidad de Talca, Talca, Chile

Eduardo

Cubillos-Llantén

Center for Bioinformatics, Simulation, and Modelling (CBSM), Faculty of Engineering, Universidad de Talca, Talca, Chile

Cristian Vilos

Universidad de Talca, School of Medicine, School of Medicine, Talca, Chile

Horacio Poblete

Center for Bioinformatics, Simulation, and Modelling (CBSM), Faculty of Engineering, Universidad de Talca, Talca, Chile

Colorectal cancer (CRC) is a prevalent form of cancer, ranking as the second most common in women and the third in men. Current treatment strategies primarily rely on chemotherapeutic drugs that exhibit inhibitory effects on cancer cell growth; however, they often lead to unintended damage to healthy cells. To mitigate these side effects, the development of drug delivery systems using polymeric nanoparticles has gained significant attention. Notably, nanoparticles based on poly(lactic-co-glycolic acid) (PLGA) and poly(lactic acid) (PLA) conjugated with DSPE-PEG, have emerged as promising candidates due to their good biocompatibility and ability to encapsulate both hydrophobic and hydrophilic therapeutic agents.

In this study, we investigate the mechanism of controlled drug release from polymeric nanoparticles by employing computational methodologies, including advanced molecular dynamics techniques and free energy calculations. Specifically, we focus on modeling PLA/PLGA: DSPE-PEG2000 polymeric systems to gain insights into the factors influencing the release kinetics of antitumor agents. By exploring the structural modification of DSPEPEG2000 through the addition of three different terminals (COO-, NH₃, and OCH₃), we elucidate their impact on the release behavior of the encapsulated drugs. Our results contribute to understanding the release mechanism and provide guidance for optimizing the design of polymeric nanoparticle-based drug delivery systems in CRC therapy.

Acknowledgments

Thanks to the Nano-biomaterials Laboratory, ND3 Lab. This work was supported by Ordinary Fondecyt N° 1211143 and 1201147.

References

- Torre, L. A. et al. (2016), doi.org/10.1158/1055-9965.EPI-15-0578
Matus, M. et al. (2018), doi.org/10.3762/bjnano.9.126
Cournia, Z. et al. (2017), doi.org/10.1021/acs.jcim.7b00564
Isralewitz, B. et al. (2001), doi.org/10.1016/S0959-440X(00)00194-9

Nanorods with plasmonic properties in the second biological window (NIR-II) functionalized with peptides capable of inhibit and disaggregate β -amyloid aggregates

Elizabeth
Cortés-Adasme¹
Pablo Cabrera¹

Freddy Celis²
²Laboratorio de Procesos
Fotónicos y
Electroquímicos, Facultad
de Ciencias Naturales y
Exactas, Universidad de
Playa Ancha, Valparaíso;
ATMOS-C, Centro de
Espectroscopía Atómica
y Molecular, Universidad
de Playa Ancha,
Valparaíso, Chile.

Marcelo Kogan¹
¹Departamento de
Química Farmacológica y
Toxicológica, Facultad de
Ciencias Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile,
Santiago 8380494, Chile;
Advanced Center for
Chronic Diseases
(ACCDiS), Sergio
Livingstone 1007,
Independencia, Santiago
8380494, Chile

One of the hallmarks of Alzheimer's disease (AD) is the aggregation of β -amyloid peptide (A β). A β is formed by the action of β -secretase and γ -secretase enzymes on the amyloid precursor protein and is associated with the formation of toxic oligomers, amyloid fibers, and senile plaques, which deposit in brain regions related to memory. Therefore, A β is considered an important biomarker for the diagnosis of the disease, and its soluble species such as oligomers and insoluble forms such as fibers are indicated as responsible for neuronal death and subsequent cognitive decline in the disease [1-2].

Given the significant role of A β aggregation, its disaggregation and inhibition of aggregation to reduce its toxicity represent a convenient strategy for potential Alzheimer's therapy. In this context, gold nanoparticles (GNPs) emerge as one of the promising scientific areas for possible diagnosis and treatment of AD. This is due to their physicochemical properties, low toxicity, and attractive biological applications [3]. GNPs possess properties such as plasmon resonance, which causes oscillation of free electrons when interacting with incident electromagnetic radiation. This property can occur in the visible to the infrared wavelength range [4]. In the case of gold nanorods (GNRs), this plasmon resonance can be tunable across these wavelengths simply by modifying their size. This advantage allows them to operate within the first and second biological windows (NIR-I, 700-950nm or NIR-II, 1000-1200nm).

The NIR-II window is more suitable for biological applications due to its greater tissue penetration depth, lower autofluorescence background, reduced photon scattering, and higher maximum permissible exposure compared to NIR-I [5]. However, it is necessary for these nanoparticles to specifically recognize these toxic aggregates. Therefore, various targeting molecules that specifically recognize A β toxic aggregates have been investigated. These molecules can be functionalized on the surface of these nanoparticles to guide the nanosystem towards the targets. Among these targeting molecules are D-type peptides as D1 peptides, which can recognize and bind predominantly to fibrillar aggregates, and D3 peptides, which recognize and bind to oligomeric aggregates of A β [6]. Additionally, these peptides are capable of disaggregating and inhibiting the formation of these toxic aggregates.

In this study, GNRs with plasmon resonance in the NIR-II range were synthesized and functionalized with polyethylene glycol to impart biocompatibility. Functionalization with D1

and/or D3 peptides as targeting molecules was performed to create a potential theragnostic system for Alzheimer's disease, aiming at the inhibition and disaggregation of β -amyloid toxic aggregates in vitro. The physicochemical characteristics of these systems were characterized using various techniques, along with the evaluation of peptide functionalization efficiency based on nanorod concentration.

Acknowledgments

Beca doctoral ANID 21200403; Fondap 15130011; Fondecyt 1211482.

References

- [1] Hettiarachchi S.D. et al. (2019), doi.org/10.1016/j.jconrel.2019.10.034
- [2] Sanati M. et al. (2019), doi.org/10.1021/acscchemneuro.8b00622.
- [3] Park J. E. et al. (2017), doi.org/10.1002/smt.201600032.
- [4] Jauffred L. et al. (2019), doi.org/10.1021/acs.chemrev.8b00738.
- [5] Cai K. et al. (2018), doi.org/10.1021/acscami.8b12758.
- [6] Bartnik D. et al. (2010), doi.org/10.1089/rej.2009.0924.

Desarrollo y optimización de un nanosistema liposomal híbrido como potencial plataforma para la liberación controlada del antioxidante epigallocatequina-3-galato

Ewaldo Zavala Urtecho

Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Facultad Ciencias Químicas y Farmacéuticas & Facultad Medicina, Universidad de Chile, Santiago, Chile

Ana L. Riveros

Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Facultad Ciencias Químicas y Farmacéuticas & Facultad Medicina, Universidad de Chile, Santiago, Chile

Javier Morales

Valenzuela Departamento de Ciencia y Tecnología Farmacéutica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile

Marcelo Kogan

Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Facultad Ciencias Químicas y Farmacéuticas & Facultad Medicina,

La epigallocatequina-3-galato (EGCG) es una molécula activa con importantes propiedades medicinales, desde efectos antiinflamatorios hasta efectos antineoplásicos. Sin embargo, estas propiedades se ven mermadas a causa de algunos problemas de autooxidación y epimerización que sufre la molécula [1, 2]. Una potente herramienta para mejorar estas características es la nanotecnología, y entre los pocos nanosistemas que han tenido éxito a nivel clínico están los liposomas. Varias formulaciones liposomales han sido aprobadas para su uso clínico, incluyendo medicamentos para cáncer, infecciones y vacunación [3]; y más recientemente la asociación de liposomas con otras nanopartículas, como las de oro, han mostrado importantes mejoras en la entrega espaciotemporal de moléculas activas mediante el uso de radiación infrarroja [4].

La obtención de los liposomas se realizó a través del método de hidratación de capa delgada de lípidos asociado a ciclos de extrusión decreciente; mientras que el recubrimiento con oro se realizó con una reducción directa de la sal de oro (HAuCl₄) sobre los liposomas [4]. La carga y eficiencia de encapsulación (EE) de la EGCG dentro de los liposomas se evaluó por cromatografía líquida de alta resolución (HPLC). Asimismo, para estimar la degradación de EGCG, se evaluó la estabilidad bajo condiciones adversas (50 °C e irradiación en el infrarrojo cercano, NIR). Por otro lado, la caracterización fisicoquímica del nanosistema liposomal se realizó por medio de DLS, NTA, STEM y UV-VIS.

El nanosistema liposomal compuesto por fosfolípidos (DPPC, DSPC, MSPC y DSPE) mostró características óptimas para uso biológico. En las mediciones por DLS se observó un tamaño promedio de 105,4±3,2 nm y un potencial Z (pZ) de 7,4±1,6 mV con un PDI igual a 0,06±0,02; valores que indican la obtención exitosa de un nanosistema altamente homogéneo y monodisperso, concordante con las imágenes de STEM. Por otra parte, la cuantificación por HPLC mostró una alta EE de EGCG en los liposomas, con valores superiores al 90%, por encima de las formulaciones liposomales promedio [3]. Asimismo, el estudio de estabilidad de EGCG libre mostró porcentajes bajos de degradación (8%), tras más de una hora de exposición directa a un láser NIR (808 nm), mientras que bajo 50 °C la degradación alcanzó un 15%. En contraste a estos resultados el nanosistema liposomal híbrido mostró ser un buen sistema de protección para la vehiculización de EGCG al evitar considerablemente su

degradación ante estos factores críticos para su estabilidad [5]. Así, en la EGCG encapsulada apenas se observó una degradación de hasta 5% en todas las condiciones antes descritas. En este trabajo se desarrolló y optimizó un nanosistema liposomal híbrido con una elevada EE de EGCG con potencial uso para la liberación controlada en terapia de patologías asociadas al estrés oxidativo, siempre que se logre una funcionalización específica.

Agradecimientos

Los autores agradecen especialmente el apoyo de la Agencia Nacional de Investigación y desarrollo (ANID): Beca Doctorado Nacional ANID 21212006 (EZU), FONDECYT 1211482 (MK), FONDECYT 1221145 (JM), FONDAP 1513011.

Referencias

- [1] Dai, W. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.jff.2019.103732
- [2] Sahadevan, R. et al. (2022), doi.org/10.1080/10408398.2022.2068500
- [3] Luiz, H. et al. (2023), doi.org/10.3390/biomedicines11020435
- [4] Bejarano, J. et al (2020), doi.org/10.1016/j.jconrel.2020.11.002
- [5] Maritim, S. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.ijpharm.2020.120051

Incorporación de una nanoválvula en nanopartículas core-shell GNR@mSiO₂ para el control de la liberación de fármacos activada por calentamiento plasmónico en la ventana biológica

Javier Avendaño-Godoy

Laboratorio de
Nanotoxicología y
Nanobiotecnología,
Universidad de Chile,
Chile / Laboratorio de
Farmacocinética,
Universidad de Chile,
Chile / Centro Avanzado
de Enfermedades
Crónicas (ACCDiS), Chile

Xavier Cattöen

Intitut Néel, Centre
National de la Recherche
Scientifique (CNRS),
Francia

Javier Morales
Valenzuela

Laboratorio de
Farmacocinética,
Universidad de Chile,
Chile

Marcelo J. Kogan

Laboratorio de
Nanotoxicología y
Nanobiotecnología,
Universidad de Chile,
Chile / Centro Avanzado
de Enfermedades
Crónicas (ACCDiS), Chile

Uno de los objetivos del área de la nanomedicina es lograr una liberación temporalmente controlada de fármacos desde los sistemas de entrega, para mejorar la eficacia, eficiencia y evitar los efectos adversos de las terapias convencionales [1]. Los nanosistemas con arquitecturas híbridas, como las nanopartículas core-shell correspondientes a nanobarras de oro (GNR) recubiertas con sílice mesoporosa (mSO₂), han estado recibiendo considerable atención como sistemas para la administración controlada de fármacos [2]. Las GNR presentan propiedades plasmónicas, por lo que pueden absorber y disipar energía de manera muy eficiente en forma de calor cuando son irradiadas. Una de las bandas plasmónicas de máxima absorción de las GNR se encuentra en la ventana biológica (NIR 670-900 nm). Dado que en esta longitud de onda los tejidos y fluidos biológicos presentan una mínima absorción, la luz puede penetrar más profundamente los tejidos humanos sin causar daño, interactuar con las GNR y provocar un aumento de la temperatura local [1,3]. La cubierta de mSO₂ es altamente accesible y porosa, por lo que, los poros pueden ser cargados con fármaco y la superficie puede ser funcionalizada con una nanoválvula activada por calentamiento plasmónico. El objetivo del presente trabajo fue incorporar una nanoválvula en nanopartículas GNR@mSO₂ para el control de la liberación de rodamina 110 (RD) activada por calentamiento plasmónico en la ventana biológica. Primero, se inmovilizó un tallo de [N-(6-aminohexil)aminometiltrietoxisilano] en la superficie de las nanopartículas, luego los poros de la cubierta de mSiO₂ se cargaron con RD. Finalmente, los poros se cerraron con un anillo de cucurbit[6]uril. La constante de unión del anillo al tallo disminuye exponencialmente con el aumento de la temperatura, de modo que a baja temperatura el anillo habita en el tallo evitando la liberación prematura del fármaco, pero a una mayor temperatura, el anillo se desliza y el poroso se abre, permitiendo una rápida liberación [4]. Se estudiaron los perfiles de liberación en un baño a diferentes temperaturas. En el nanosistema sin el tallo ni el anillo, se produjo una liberación mínima de RD a 25 y 37 °C, pero al aumentar la temperatura, el porcentaje de liberación aumentó, especialmente a 60 °C. Algo similar ocurrió con el nanosistema con el tallo. Pero cuando se agregó el anillo se produjo una liberación más rápida y un aumento en el porcentaje de liberación a 37, 45, 50 y 60 °C con respecto a los otros dos sistemas control a la misma temperatura. Esto probablemente se debe a que el

desplazamiento del anillo producto de la temperatura genera un efecto tipo succión, favoreciendo la liberación de RD. A 45 °C se alcanzó un alto porcentaje de liberación (77,5 ± 3.6%) después de 2 h. Actualmente se está trabajando en el estudio de los perfiles de liberación con irradiación NIR, lo que sería un aporte al conocimiento sobre este nuevo tipo de estrategia para el control de liberación de fármacos.

Agradecimientos

Beca ANID de Doctorado Nacional N° 21202096, Beca EIFFEL (Francia), ANILLO N° 210068, FONDAP 15130011 y FONDECYT N° 1211482.

Referencias

- [1] Guerrero et al. (2014), doi.org/10.2217/nnm.14.126
- [2] Kumar et al. (2020), doi.org/10.1039/D0TB01559H
- [3] Doane and Burda (2012), doi.org/10.1039/C2CS15260F
- [4] Croissant and Zink (2012), doi.org/10.1021/ja301880x

Efecto antibacteriano de micelas de núcleo lipídico cargadas con ciprofloxacino sobre Escherichia coli y Staphylococcus aureus

Francisco Solís Cabrera

*Departamento de
Ciencias Farmacéuticas,
Facultad de Ciencias,
Universidad Católica del
Norte, Antofagasta*

Wai-Houng Chou
Kam

*Departamento de
Ciencias Farmacéuticas,
Facultad de Ciencias,
Universidad Católica del
Norte, Antofagasta*

Patricia Pozo
Sanhueza

*Departamento de
Ciencias Farmacéuticas,
Facultad de Ciencias,
Universidad Católica del
Norte, Antofagasta*

Dania Martínez Araya

*Departamento de
Ciencias Farmacéuticas,
Facultad de Ciencias,
Universidad Católica del
Norte, Antofagasta*

El ciprofloxacino es una fluoroquinolona de tercera generación considerada como primera línea en el tratamiento de infecciones del tracto urinario, gonorrea y cistitis [1]. Este antibiótico puede ser administrado por vía oral, pero presenta limitaciones con la solubilidad acuosa y permeabilidad a membranas que impactan directamente a la biodisponibilidad y, posiblemente, en su efectividad [2,3].

En ese sentido, la nanotecnología es una estrategia que permitiría resolver dichas limitaciones mediante el desarrollo de nanopartículas (NPs). Uno de los tipos de NPs son las micelas de núcleo lipídico (LCM, del inglés lipid core micelles) que poseen sencillez de formulación, capacidad de autoensamblaje, biocompatibilidad, un diámetro entre 5 a 100 nm, etc. [4]. En términos farmacológicos tiene la particularidad de atrapar fármacos poco solubles en agua en su núcleo, mejorar la permeabilidad, disminuir la toxicidad del fármaco contenido, dirigirlas selectivamente al sitio de interés, entre otras características [5].

El objetivo de este trabajo de investigación es evaluar la acción antibiótica de ciprofloxacino, cargado en micelas de núcleo lipídico, sobre especies bacterianas de Escherichia coli (ATCC25922) y Staphylococcus aureus (ATCC 29213). La elaboración de las LCM fue realizada mediante el método de emulsificación en caliente de baja energía y la prueba de susceptibilidad antimicrobiana se hizo por microdilución en caldo. Los resultados preliminares muestran que la concentración utilizada en los ensayos (CIM para cada microorganismo) tiene efecto antimicrobiano para ambas bacterias. Sin embargo, el antibiótico cargado en LCM tiene actividad antimicrobiana similar a la actividad del fármaco de referencia (antibiótico sin ser cargado en LCM).

Agradecimientos

Agradecemos a la Vicerrectoría de Investigación y Desarrollo Tecnológico de la Universidad Católica del Norte, y a VRIDT-UCN Proyecto semilla 20220807013.

Referencias

- [1] MacDougall, C. (2019) ISBN-13: 978-1-4562-6356-0
- [2] Charalabidis, A. et al. (2019), doi.org/10.1016/j.ijpharm.2019.05.041
- [3] MacDougall, C. (2019) ISBN-13: 978-1-4562-6356-0
- [4] Mitchell, MJ. et al. (2021), doi.org/10.1038/s41573-020-0090-8.
- [5] Chou, WH. et al. (2020), doi.org/10.3390/pharmaceutics12121168

Wai-Houng Chou Kam
*Departamento de
Ciencias Farmacéuticas,
Facultad de Ciencias,
Universidad Católica del
Norte, Antofagasta, Chile*
Jafet Ortiz Quintero

Lorena García Nannig
*Departamento de
Bioquímica y Biología
Molecular, Facultad de
Ciencias Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile,
Santiago, Chile*

Javier O. Morales
*Departamento de
Ciencias y Tecnología
Farmacéutica, Facultad
de Ciencias Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile,
Santiago, Chile*

Micelas de núcleo lipídico funcionalizadas con cadena peptídica trifuncional como sistemas de transporte de moléculas de baja solubilidad acuosa hacia cardiomiocitos

Las micelas de núcleo lipídico (MNLs) corresponden a dispersiones coloidales nanoparticuladas en donde el material particulado se encuentra distribuido dentro de un medio dispersante. Estas MNLs están compuestas por una región hidrofóbica que componen el núcleo lipídico, y otra porción hidrofílica que se encuentra en contacto con el dispersante [1]. Estas nanopartículas han sido estudiado como sistema de vehiculización de fármacos, sobre todo para principios activos de baja solubilidad acuosa [2]. Entre los desafíos de estos sistemas, es poder lograr una adecuada concentración sistémica y que puedan alcanzar específicamente el tejido de interés, logrando una selectividad en el efecto del fármaco [3]. Por tanto, el objetivo principal de esta investigación fue desarrollar MNLs funcionalizadas con una cadena peptídica trifuncional como sistema de entrega de fármacos de solubilidad acuosa hacia cardiomiocitos, teniendo como vía de administración, la vía bucal. Para ello, utilizando la síntesis en fase sólida, se diseñó un péptido que contenía tres fragmentos en una sola secuencia: i) capacidad de potenciar la permeación bucal, ii) sensible a la actividad proteasa de la metaloproteinasa, y iii) direccionalización hacia cardiomiocitos. Posterior a ello, se funcionalizó un lípido con este péptido a través de la reacción maleimida-tiol y se procedió a elaborar las MNLs con rodamina, como molécula modelo, mediante emulsificación en caliente de baja energía [4]. Los resultados de esta investigación demostraron la capacidad de generar MNLs esféricas en escala nanométrica (14,4 nm) y de baja polidispersión (0,255), con una permeabilidad aumentada (70,3 cm/h) en comparación con el control. Asimismo, se demostró que el fragmento intermedio mantuvo la sensibilidad a corte proteolítico por metaloproteinasa (40,6% a 24 h). Finalmente, también se demostró que estos sistemas presentaron 5 veces más unión a cardiomiocitos en comparación con micelas no funcionalizadas. Por lo tanto, dado los presentes resultados, las MNLs funcionalizadas con este péptido trifuncional son sistemas potenciales para el transporte de fármacos de baja solubilidad acuosa a cardiomiocitos, a través de la vía bucal de administración y con sensibilidad a la actividad proteasa de la metaloproteinasa.

Agradecimientos

Beca ANID Doctorado Nacional n° 21170322; proyecto FONDECYT Regular 1181689

Referencias

- [1] Torchillin V.P. (2007). doi.org/10.1007/s11095-006-9132-0
- [2] Chou W.H. et al. (2020). doi.org/10.3390/pharmaceutics12121168
- [3] Mitchel M.J. et al. (2021). doi.org/10.1038/s41573-020-0090-8
- [4] Fritz H.F. et al. (2018), doi.org/10.1007/s13346-018-0521-9

Synthesis, characterization, and antibacterial evaluation of a nanostructured lipid carrier against *Helicobacter pylori*

Andrea C. Ortiz
*Facultad de Medicina y
Ciencia, Universidad San
Sebastián, Puerto Montt,
Chile*

Javier O. Morales
*Facultad de Ciencias
Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile*

Cristopher Soto
*Facultad de Odontología,
Universidad de Chile*

Denisse Bravo
*Facultad de Odontología,
Universidad Andrés Bello*

María Fernanda
González, Andrew
Quest
*Facultad de Medicina,
Universidad de Chile*

The nanotechnology in Pharmaceutical Sciences promotes the development of vehicles for the delivery of poorly water-soluble and low permeability drugs [1]. Besides, *Helicobacter pylori* is a highly prevalent bacterium causing gastric pathologies, including ulcers and inflammation. In this study, a nanostructured lipid carrier loaded with clarithromycin (NLC-CLA) was fabricated, with the goal of improving the performance of drug in reducing bacterial viability.

To characterize the NLC-CLA formulation, various parameters were assessed. The obtained results for hydrodynamic diameter, polydispersity index, and zeta potential were 213.5 ± 3.2 nm, 0.17 ± 0.01 , and -4.8 ± 1.1 mV, respectively. On the other hand, stability studies show a colloidal stability of at least 12 weeks at room temperature and at 4° C. In terms of drug loading efficiency, the incorporation of clarithromycin into the NLC was highly successful, with an encapsulation efficiency of approximately 98%. And the drug loading was determined to be approximately 3.6%. These results are crucial for maximizing the therapeutic effect while minimizing the required drug dose. Furthermore, the release profile of clarithromycin from the NLC was evaluated. Over a period of 5 hours, the maximum drug release reached approximately 35% of the total drug load (at pH 3 and 37,5°C). This time is adequate considering that *Helicobacter pylori* is found in the stomach, and it has an emptying time of approximately 3-5 hours.

Moving on to the microbiological evaluation, a broth dilution study was conducted to assess the antibacterial activity of NLC-CLA. The obtained results demonstrated that NLC-CLA exhibited a significantly lower minimum inhibitory concentration (MIC) compared to the free clarithromycin molecule. Specifically, the NLC-CLA formulation showed a two-fold reduction in the MIC, indicating an enhanced antibacterial effect. This improved efficacy can be attributed to the synergistic interaction between the NLC carrier and the bacterial membrane, which facilitates better drug delivery and increased drug-bacteria interaction. The physical proximity and the affinity of the NLC to the bacterial membrane contribute to potential damage inflicted on the membrane, thereby leading to a more potent antibacterial effect. In addition, it has been observed that the amphiphilic free fatty acids and their monoglycerides in the NLC formulation contribute to lowering the required concentration of clarithromycin in the formulation, improving the overall therapeutic efficacy due to the susceptibility of the bacterial membrane [2].

To ensure the safety of the NLC-CLA formulation, a cytotoxicity evaluation was performed using representative gastric cells. The results revealed that exposure to the antibacterial vehicle did not induce a reduction in cell viability. This finding indicates that the concentration

of NLC-CLA required to exert an antibacterial effect would be safe for the gastric epithelium.

Acknowledgments

FONDECYT 1181689; ANID National PhD Scholarship 21180654; REDI170653.

References

- [1] L. Bayón Cordero et al. (2019), doi.org/10.3390/nano9030474
- [2] G. Casillas-Vargas et al. (2021), doi.org/10.1016/j.plipres.2021.101093

Nanopartículas de oro conjugadas con el péptido AS4923 no afectan la viabilidad celular de macrófagos THP-1

Jorge Buchert Vargas

*Universidad de
Concepción*

Enrique Guzmán
Gutiérrez

*Universidad de
Concepción*

Jessica Lemus Jara

*Universidad de
Concepción*

Patricio Oyarzún Cayo

*Universidad San
Sebastián*

Braulio Contreras Trigo

*Universidad San
Sebastián*

Las nanopartículas de oro (AuNPs) han demostrado ser una plataforma versátil para conjugar moléculas como, por ejemplo, péptidos [1], convirtiéndose en candidatas para el diseño de vacunas de nueva generación basadas en epítopos. Se ha demostrado que este tipo de vacunas son capaces de estimular la respuesta inmune adaptativa tanto en experimentos in vitro como in vivo, pero solamente en modelo animal [2-3]. Por este motivo, la investigación busca dilucidar que este tipo de sistemas sea compatible con la especie humana y demostrar el uso de AuNPs para vehicular péptidos inmunogénicos permitiendo el diseño de nanovacunas innovadoras y de alta eficacia, en comparación a las vacunas convencionales.

Por lo tanto, es necesario realizar ensayos in vitro evaluando la viabilidad celular, por ejemplo, utilizando la línea celular humana THP-1 para desarrollar un modelo de macrófago in vitro [4], tratadas con nanopartículas de oro conjugadas con el péptido AS4923 (AuNPs-AS4923), que contiene el epítipo inmunogénico YVKQNT, caracterizado por su alta afinidad de unión al bolsillo del Complejo Mayor de Histocompatibilidad (MHC) de clase II en la molécula DRB1*0101 [5].

El objetivo de este trabajo fue determinar la viabilidad celular de macrófagos THP-1 tratados con nanopartículas de oro conjugadas con el péptido AS4923.

Metodología y Resultados: Se logró caracterizar físicamente las nanopartículas de oro conjugadas con el péptido AS4923 mediante espectrofotometría, microscopía electrónica de transmisión y dispersión dinámica de la luz, obteniendo una concentración de AuNPs-AS4923 con una concentración de 10,7 nM, morfología esférica y no agregadas, tamaño de 15 – 20 nm y potencial Z de -15,1 mV, respectivamente. Además, se preparó un modelo de macrófago a partir de células THP-1 induciendo su diferenciación utilizando forbol 12-miristato 13-acetato (PMA) y lipopolisacárido (LPS) y se determinó su fenotipo a través de RT-qPCR obteniendo que expresan niveles significativamente aumentados de ARNm para los genes que codifican para TNF- α y CD11b. Luego se determinó la viabilidad celular de estas células mediante el ensayo MTT e InCuCyte, posterior a 24 horas de incubación junto con las AuNPs-AS4923 en un rango de concentraciones entre 0 – 1000 pM, obteniendo que la viabilidad celular de macrófagos THP-1 se mantiene hasta una concentración de 100 pM, mientras que, a 1000 pM, la muerte celular aumenta significativamente desde el tiempo inicial, en el seguimiento de 24 horas a través del equipo InCuCyte.

Conclusión y proyecciones: Las AuNPs esféricas conjugadas con péptidos inmunogénicos en bajas concentraciones son viables en experimentos in vitro de células presentadoras de antígenos lo cual permite avanzar en esta investigación para estudios posteriores asociados al

procesamiento y presentación de antígenos, para poder respaldar que esta plataforma es un buen candidato para el diseño de vacunas de nueva generación en células humanas.

Agradecimientos

ANID FONDECYT N° 1221434

Referencias

- [1] Yeh Y. et al. (2012), doi.org/10.1039/c1nr11188d
- [2] Dykman L. et al. (2020), doi.org/10.1080/14760584.2020.1758070
- [3] Moshref M. et al. (2022), doi.org/10.1016/j.micpath.2022.105687
- [4] Chanput W. et al. (2014), doi.org/10.1016/j.intimp.2014.08.002
- [5] Kotraiah V. et al. (2021), doi.org/10.3389/fimmu.2021.690348

Formation of artificial membranes of lipid raft models by physical vapor deposition on silicon substrates

Nancy Gómez-Vierling

*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Nicolás Moraga

*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Daniel Saavedra

*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Marcelo Cisternas

*Universidad de
Valparaíso*

Ulrich G. Volkman

*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

The study of artificial membranes has recently greatly facilitated the development of rapid and cost-effective biosensors. In this context, one of our objectives at SurfLab IFIS UC was to achieve a Supported Lipid Bilayer (SLB) that emulates the current cellular membrane model, Lipid Rafts, using the innovative vapour-phase deposition method.

This study aims to determine the temperatures conducive to an optimal evaporation rate for cholesterol, 2-dioleoyl-sn-glycero-3-phosphocholine (DOPC), and sphingomyelin molecules within a high vacuum environment. Additionally, we explored the different phases formed by these molecules when subjected to temperature ramps. This crucial information guides the physical vapour deposition (PVD) of these molecules onto a silicon substrate in conjunction with dipalmitoylphosphatidylcholine (DPPC) molecules, with the ultimate aim of creating self-assembling artificial bilayers that faithfully replicate the current Lipid Rafts model observed in cellular membranes.

This research holds significant relevance by offering solvent-free alternatives for developing, producing, and storing phospholipid bilayer-based devices, such as sensors and biomimetic devices.

Acknowledgments

Fondecyt 1180939. NM, DS and NG-V: ANID PhD scholarship.

References

- [1] Cisternas et al. (2020), doi.org/10.3390/ijms21186819
- [2] Vahur Oja et al. (2009), doi.org/10.1021/je800395m

FTIR and SRE spectra analysis for supported lipids bilayers (SLB's) with dry incorporation of Gramicidin A on different substrates

Daniel Saavedra Torres

*Facultad de Física,
Pontificia Universidad
Católica*

Nicolas Moraga

*Facultad de Física,
Pontificia Universidad
Católica*

Ulrich Volkmann

*Facultad de Física,
Pontificia Universidad
Católica*

Marcelo Cisternas

*Escuela de Ingeniería,
Universidad de
Valparaíso*

Susana Rojas

*Escuela de Ingeniería,
Universidad de
Valparaíso*

Roberto Rodriguez

*Facultad de Física,
Pontificia Universidad
Católica*

We apply an unconventional method to grow supported lipid bilayers (SLBs), without the use of solvents, dry [1] and in the absence of gases, with the aim of synthesizing platforms for biosensors. For the characterization of the samples, an analysis of the Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) spectrum was performed to detect the functional groups of dipalmitoylphosphatidylcholine (DPPC), distearoylphosphatidylcholine (DSPC) and gramicidin A in the wavelength range of 1500 - 4000 cm^{-1} .

This analysis revealed a notable red shift at 1660 cm^{-1} , originally attributed to a peak at 1670 cm^{-1} , indicating the formation of a helical structure in Gramicidin. This results suggests the potential formation of Gramicidin channels within the evaporated phospholipid bilayers. Furthermore, electron paramagnetic resonance (EPR) analysis identifies a resonance response from vaporized DPPC. This signal may be due to the formation of free radicals.

Acknowledgments

FONDECYT 1180939 (UGV), ANID Doctoral Scholarships (DS, NM and NGV).

References

- [1] Cisternas Fruns, M. A. (2021), repositorio.uc.cl/handle/11534/60584
- [2] Dzikovski, B. G. et al. (2011), doi.org/10.1021/jp108105k

Homogenization of DPPC phospholipid bilayers deposited from their vapor phase onto single-crystal silicon substrates through annealing under different conditions (air, N₂, and vacuum)

Nicolás Moraga
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Daniel Saavedra
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Marcelo Cisternas
*Universidad de
Valparaíso*

Nancy Gomez
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Ulrich Volkmann
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

In this study at SurfLab Instituto de Física UC, the homogenization of dipalmitoylphosphatidylcholine (DPPC) phospholipid bilayers deposited from their vapor phase on single crystal silicon substrates was investigated. The main objective was to evaluate the effect of different annealing conditions on the homogeneity of the bilayers, using air, dry nitrogen (N₂) environment at different pressures, and vacuum. Previously, at SurfLab, the topographies of samples were studied after subjecting them to temperature ramps using air [1]. First, DPPC bilayers were deposited on single crystal silicon substrates by physical vapor deposition (PVD) with in situ control of the deposited thickness and deposition rate. Subsequently, the samples were annealed in different environments. First, annealing was performed in air, where the temperature and treatment time were controlled. Next, annealing was performed in a nitrogen environment at different pressures with control of temperature and treatment time. Finally, annealing was performed under vacuum to compare to earlier results of our group on Alkane films and to eliminate any possible contamination or moisture present in the environment.

This study demonstrates that the annealing process, in addition to the deposition rate, plays a critical role in the homogenization of DPPC phospholipid bilayers deposited on single crystal silicon substrates. Annealing conditions in air, nitrogen environment at different pressures, and vacuum were found to have different effects on the homogeneity of the bilayers. These results are of great importance for the design and fabrication of devices based on phospholipid bilayers, such as sensors and biomimetic devices.

Acknowledgments

NM, NC and DS: Conicyt / ANID Doctoral Grants, UV: Fondecyt 1180939 and support from the Instituto de Física Pontificia Universidad Católica de Chile.

References

- [1] Cisternas M. et al. (2020), doi.org/10.3390/ijms21186819

Synthesis and characterization of ciprofloxacin-loaded albumin nanoparticles for the treatment of urinary tract infections

Sofía V. Sánchez
*Drug Delivery Laboratory,
Departamento de
Ciencias y Tecnología
Farmacéuticas,
Universidad de Chile /
Advanced Center for
Chronic Diseases
(ACCDiS) / Center of
New Drugs for
Hypertension (CENDHY)*

Eva. C Arrúa
*Centro de Investigación y
Desarrollo en Materiales
Avanzados y
Almacenamiento de
Energía de Jujuy
(CIDMEJu),
CONICET-Universidad
Nacional de Jujuy,
Argentina*

Ricarda G. Vásquez
*Drug Delivery Laboratory,
Departamento de
Ciencias y Tecnología
Farmacéuticas,
Universidad de Chile /
Advanced Center for
Chronic Diseases
(ACCDiS) / Center of
New Drugs for
Hypertension (CENDHY)*

Paola Scavone
*Laboratorio de Biofilms
Microbianos,
Departamento de
Microbiología, Instituto de
Investigaciones
Biológicas Clemente
Estable, Montevideo,
Uruguay*

Javier O. Morales
*Drug Delivery Laboratory,
Departamento de
Ciencias y Tecnología
Farmacéuticas,
Universidad de Chile /
Advanced Center for
Chronic Diseases
(ACCDiS) / Center of*

Urinary tract infections (UTIs) represent a significant global health concern [1]. Uropathogenic *Escherichia coli* is the primary cause of these infections, which are becoming increasingly challenging to treat due to the emergence of antibiotic resistance and the formation of biofilms [2]. UTIs are the most prevalent healthcare-associated infections, with approximately one million cases reported annually [3]. About 80% of these infections are associated with indwelling urinary catheters, where bacterial biofilms form internally and externally, leading to catheter-associated urinary tract infections (CAUTIs) [4]. Nanotechnology presents a promising approach to the treatment of UTIs [5]. Therefore, this research aimed at developing and characterizing ciprofloxacin-loaded albumin nanoparticles (CPF-BSA NPs). The developed NPs were characterized for their entrapment efficiency (%EE), in vitro release profile, cytotoxicity, and antibacterial and antibiofilm potential. The physicochemical properties of CPF-BSA NPs were evaluated by dynamic light scattering, laser Doppler velocimetry, and transmission electron microscopy. These analyses revealed that CPF-BSA NPs had a spherical shape, with a hydrodynamic diameter of $123,4 \pm 3.2$ nm, Pdl of 0.17 ± 0.028 , and zeta potential of -38.8 ± 3.03 mV. The release profile of CPF from CPF-BSA NPs was evaluated in PBS and artificial urine media in dialysis bags. CPF showed a controlled release from BSA NPs in both media, achieving the complete release after 5 h in PBS and 3 hours in artificial urine. The in vitro CPF release data were also analyzed using kinetic models. The best-fit model in both cases was the first-order model. Cell viability was assessed on human bladder cancer cells using the resazurin assay after 24 h of treatment with the free drug (CPF), CPF-and empty BSA NPs. The results demonstrated that CPF-BSA NPs exhibited significantly lower cytotoxicity than free CPF compared to the control ($p \leq 0.05$). The antibacterial and antibiofilm properties of NPs were evaluated against clinically isolated *E. coli* 144. To determine the minimum inhibitory concentration, bacteria were incubated for 24 h with NPs loaded with different concentrations of CPF (0.0048 to 5 $\mu\text{g/mL}$) at 37 °C. Empty BSA NPs exhibited no antibacterial activity, while CPF and CPF-BSA NPs showed a MIC of 0.078 $\mu\text{g/mL}$. Finally, antibiofilm assays were conducted to assess the prevention and eradication of biofilms using the static biofilm assay. The results indicated that 5 $\mu\text{g/mL}$ of CPF, whether free or encapsulated in BSA-NPs, effectively prevented biofilm formation. Moreover, CPF-BSA NPs demonstrated a significantly higher ($p \leq 0.01$) reduction in biofilm biomass compared to free CPF. These findings suggest that CPF-BSA NPs are stable systems with suitable characteristics for drug delivery and are promising for treating UTIs and CAUTIs by reducing the cytotoxic effects of CPF and enhancing its antibiofilm potential.

Acknowledgments

This work was funded by Regular FONDECYT Project 1231154, ANID/PIA/ACT192144, FONDAP Project 15130011, Fondecip EQM170111(FE-SEM), National Doctoral Scholarship 21201831, all granted by Chilean National Agency for Research and Development (ANID).

References

- [1] Foxman (2014) , doi.org/10.1016/j.idc.2013.09.003
- [2] Flores-Mieles et al. (2015), doi.org/10.1038/nrmicro3432
- [3] Werneburg (2022), doi.org/10.2147/RRU.S273663
- [4] Clarke et al. (2020), doi.org/10.12788/jhm.3292
- [5] Sánchez et al. (2021), doi.org/10.3389/fcimb.2021.656496

Síntesis y evaluación de citotoxicidad de nanoesferas de oro funcionalizadas con PEG en fibroblastos cardíacos

Yanay Montano Peguero

*Facultad de Ciencias
Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile*

Danica Jiménez

*Facultad de Ciencias
Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile*

Karen Bolaños

*Facultad de Ciencias
Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile*

Sergio Lavandero

*Facultad de Ciencias
Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile*

Marcelo J. Kogan

*Facultad de Ciencias
Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile*

Antecedentes: Las nanopartículas de oro (NPAu) han sido investigadas y evaluadas para el diagnóstico y tratamiento de enfermedades cardiovasculares. La alta biocompatibilidad y propiedades versátiles de superficie han posibilitado que las NPAu sean utilizadas como biosensores ópticos, vehículos de administración de fármacos y agentes de contraste para la obtención de imágenes. Las NPAu pueden ser recubiertas con polietilenglicol (PEG) para conferirles una mayor estabilidad en solución y además puede ser funcionalizadas con otras moléculas, péptidos, etc. [3]. Para cada una de estas aplicaciones se requiere evaluar su citotoxicidad, en nuestro caso para el fibroblasto cardíaco, componente celular clave en la estructura y función del corazón.

Objetivo: Sintetizar nanoesferas de oro funcionalizadas con PEG y evaluar su citotoxicidad en cultivo primario de fibroblastos cardíacos de ratas neonatas.

Materiales y Métodos: Primeramente se realizó la síntesis de nanoesferas de oro de 12 nm, mediante el método de Turkevich y col [4]. Posteriormente se conjugaron con PEG-O-Me y PEG-O-NH₂. Se realizó la caracterización del nanosistema en cada etapa de síntesis, mediante espectroscopía UV-Vis, SEM, DLS, potencial Z y NanoSight. Para la evaluación de la citotoxicidad se emplearon fibroblastos cardíacos de ratas neonatas Sprague Dawley y los ensayos in vitro de Tripán Blue y LDH (del inglés, lactate dehydrogenase).

Resultados: Se sintetizaron nanoesferas de oro (NEAu-PEG-O-Me-NH₂) de 12 nm aproximadamente. El nanosistema se mantuvo estable en solución acuosa en el tiempo, almacenado a 4 °C y protegido de la luz. En los ensayos de viabilidad celular se evaluaron tanto las NEAu como las NEAu-PEG-O-Me-NH₂, en concentraciones desde 0.125-5 nM. En ambos ensayos de viabilidad celular, las NEAu y las NEAu-PEG-O-Me-NH₂, no afectaron la viabilidad celular de los fibroblastos cardíacos hasta concentraciones de 2.5 nM, a las 24 y 48 h de tratamiento.

Conclusión: Las NEAu (12 nm) y las NEAu-PEG-O-Me-NH₂ en el rango de concentración entre 0.1-1 nM no presentan efectos citotóxicos in vitro en cultivos primarios de fibroblastos cardíacos. El próximo paso será investigar in vivo los efectos citotóxicos y de diagnóstico de fibrosis de estos nanosistemas.

Agradecimientos

Proyectos: Fondecyt 1211482, Fondap 15130011, Anillo 210068.

Referencias

- [1] Bejarano J. et al. (2018) , doi.org/10.7150/thno.26284
- [2] Bejarano J. et al. (2020) , doi.org/10.1016/j.jconrel.2020.11.002
- [3] Her S et al. (2017) , doi.org/10.1016/j.addr.2015.12.012
- [4] Turkevich J et al. (1951). Discussions of the Faraday Society.

3D printed scaffolds with multi-hierarchical structures based on biocompatible resins and insulin-loaded PLGA nanoparticles for tissue engineering purposes

Fernando Esteban
Rodríguez Umazor
*Departamento de
Química, Facultad de
Ciencias Naturales,
Matemáticas y del Medio
Ambiente, Universidad
Tecnológica
Metropolitana*

Carmen Mabel
González Henríquez
*Departamento de
Química, Facultad de
Ciencias Naturales,
Matemáticas y del Medio
Ambiente, Universidad
Tecnológica
Metropolitana, Programa
Institucional de Fomento
a la Investigación,
Desarrollo e Innovación,
Universidad Tecnológica
Metropolitana*

Mauricio Sarabia
Vallejos
*Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián, Chile*

Juan Rodríguez
Hernandez
*Instituto de Ciencia y
Tecnología de
Polímeros-Consejo
Superior de
Investigaciones
Científicas (ICTP-CSIC),
Spain*

Enrique Martínez
Campos
*Group of Organic
Synthesis and
Bioevaluation, Instituto
Pluridisciplinar,
Universidad Complutense
de Madrid, Spain*

Discomfort or diseases related to the loss or failure of bone material are frequent health complications. The probability of bone diseases seems to increase with age, lifestyle, occupation, and degenerative pathologies that could cause bone demineralization. The growing use of 3D printing and nanotechnology has allowed the establishment of new strategies to develop innovative materials with high biocompatibility and functionality that can be used as a base to create medical devices adapted to the patient's needs [1].

This research aims to evaluate biocompatible resins for printing scaffolds in 2D/3D printers with wrinkled morphologies and multi-hierarchical structures coated with biodegradable nanoparticles (NPs) loaded with insulin as a growth factor to promote the osteogenic capacity of bone cells precursors. This project was divided into two main stages; firstly, two novel mixtures were used in 2D/3D scaffold printing. The first was based on 2-hydroxyethyl methacrylate (HEMA), 2-(dimethylaminoethyl) methacrylate (DMAEMA), and acrylic acid (AAc) as biocompatible monomers, which were crosslinked with polyethylene glycol diacrylate (PEGDA) and a biocompatible photo-initiator, using DOD (drop-on-demand) printing technology to obtain 2D films of polymers deposited on ozonated polycarbonate substrates. The polymer with the best results in terms of cell viability and antibacterial properties was selected to prepare a resin suitable for 3D printing by digital light processing (DLP). A RAFT (reversible addition-fragmentation chain transfer polymerization) agent, photocatalyst, and cocatalyst are incorporated at this point to render the mixture suitable for DLP printing with a 405 nm light projector. The 3D scaffolds included an interconnected internal structure of microchannels and micropores fabricated using a computer-aided design (CAD) and salt-leaching method. This type of structure favors cell proliferation, adhesion, and differentiation. In a second step, insulin-loaded poly(lactic-co-glycolic) acid (PLGA) NPs were prepared by the W1/O/W2 double emulsion solvent evaporation method [2]. The porous scaffold is immersed in an aqueous solution containing the charged NPs to be incorporated into the internal cavities of the structure, which was monitored by field emission scanning electron microscopy (FE-SEM). The 2D/3D scaffolds were chemically, physically, and mechanically characterized throughout each process, in addition to testing for biocompatibility and antibacterial properties using a specialized cell line for bone regeneration. Incorporating insulin-loaded biodegradable NPs has a favorable biological role for gene expression processes associated with the growth of bone precursor cells. The release of this growth factor

with a slowly degradable carrier makes it possible to promote cell proliferation and the future formation of the interconnected tissue.

Acknowledgments

The authors recognize the financial support from FONDECYT Grant N° 1220251 and N° 11230427. F. Rodriguez Umanzor would like to acknowledge the financial support provided by CONICYT through the Doctoral Scholarship Grant N° 21230964.

References

- [1] C. Laurencin, et al. (2006), doi.org/10.1586/17434440.3.1.49
- [2] X. Wang, et al. (2017), doi.org/10.2147/IJN.S150818

Nanopartículas de oro tipo Core-Shell para reducción de la toxicidad in vivo de especies solubles de β -amiloide

Pablo Cabrera

Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Independencia, Santiago, Chile

María Paz Oyarzún

Departamento de Ciencias Biológicas y Químicas, Facultad de Medicina y Ciencia, Universidad San Sebastián, Providencia, Santiago, Chile.

Valentina López

Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Independencia, Santiago, Chile / Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile

Rebeca Aldunate

Escuela de Biotecnología, Facultad de Ciencias, Universidad Santo Tomás, Santiago, Chile

Marcelo Kogan

Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Independencia, Santiago,

La enfermedad de Alzheimer (EA) es la demencia más prevalente en la población mayor para la cual no existen herramientas diagnósticas ni terapéuticas que permitan un diagnóstico temprano para acceder a un tratamiento oportuno [1, 2]. En la EA se forman especies tóxicas del péptido beta amiloide tales como los denominados oligómeros solubles y las fibras amiloides que son agregados insolubles [3]. En estudios previos se demostró que nanopartículas de oro funcionalizadas con péptidos que reconocen agregados insolubles de β -amiloide pueden ser desagregados [4]. En este trabajo se planteó el uso de nanopartículas de oro recubiertas con sílice mesoporosa funcionalizada con el péptido D3(AuNRs@SiO₂-D3), como una potencial herramienta para la terapia de la EA. El péptido D3 permite el reconocimiento selectivo de los oligómeros presentes en cerebro de pacientes que padecen la EA [5].

En primer lugar, se obtuvieron nanobarras de oro de 40x10 nm recubiertas con una capa de sílica. Estas nanopartículas se funcionalizaron con el péptido D3 que reconoce oligómeros tóxicos de beta amiloide. Para evaluar el efecto de desagregación de beta amiloide y reducción de su toxicidad, se han utilizado modelos in vitro e in vivo de *C. elegans* que expresan en péptido A β (1-42) (uno de los biomarcadores más relevantes de EA) en células musculares. Se utilizaron técnicas de microscopía confocal, fluorimetría y evaluaciones de parálisis in vivo para evaluar nuestro nanosistema.

Los resultados obtenidos indican que nuestro nanosistema es eficaz para promover la desagregación y la inhibición de la agregación de A β in vitro, correlacionando estos resultados con la mejora en el fenotipo asociado a la expresión de A β en células musculares en los modelos transgénicos de *C. elegans*.

Nuestro nanosistema posee un gran potencial como herramienta para la potencial terapia para EA ya desagregar agregados tóxicos de beta amiloide a nivel in vivo.

Agradecimientos

Beca doctoral ANID 21200617; Fondap 15130011; Fondecyt 1211482, Fondecyt postdoctoral 3180651.

Referencias

- [1] Pietrzak et al. (2018), doi.org/10.2174/1573406413666171002120847
- [2] Snowdon et al.(1996) , doi.org/10.1001/jama.275.7.528
- [3] Araya, E. et al. (2008) , doi.org/10.1007/s11671-008-9178-5
- [4] Morales-Zavala et al. (2017) , doi.org/10.1016/j.nano.2017.06.013
- [5] Van Groen et al. (2008) , doi.org/10.1002/cmdc.200800273

Fabrication of biocompatible and bioactive photocurable resins through 3D printing for applications in bone regeneration

S.A. Romero de la Fuente

Facultad de Ciencias Naturales, Matemáticas y del Medio Ambiente, Departamento de Química, Universidad Tecnológica Metropolitana, Santiago, Chile

P.C. Tapia-Huerta

Facultad de Ciencias Naturales, Matemáticas y del Medio Ambiente, Departamento de Química, Universidad Tecnológica Metropolitana, Santiago, Chile

C.M.

González-Henríquez

Facultad de Ciencias Naturales, Matemáticas y del Medio Ambiente, Departamento de Química, Universidad Tecnológica Metropolitana, Santiago, Chile / Programa Institucional de Fomento a la Investigación, Desarrollo e Innovación (PIDi), Universidad Tecnológica Metropolitana, Santiago, Chile.

M.A. Sarabia Vallejos

Facultad de Ingeniería, Arquitectura y Diseño, Universidad San Sebastián, Sede Santiago, Santiago, Chile

N. Cohn-Inostroza

Laboratorio de Nanobiomateriales, Instituto de Investigación en Ciencias Odontológicas, Facultad de odontología, Universidad de Chile

Nowadays, bone diseases considerably lower life expectancy. Only in 2019 occurred, over 178 million new fractures, while close to 15% of the population over 60 years old has suffered severe cartilage injuries [1][2]. That is why sciences like tissue engineering (TE) seek to combine the design and development of cellular scaffolds to repair and promote bone regeneration until complete functionality [3]. The increasing use of additive manufacturing (AM), popularly known as 3D printing, has enabled the development of techniques and strategies for manufacturing medical devices adaptable to the needs of patients. Accordingly, biocompatible and bioactive photocurable resins for the printing of three-dimensional scaffolds with internal microchannels were manufactured through photo-induced electron-energy transfer-reversible addition-fragmentation chain transfer polymerization (PET-RAFT) and digital light processing (DLP). These biocompatible resins were manufactured using poly(ethylenglycol) diacrylate (PEGDA250) as crosslinking agent, acrylamide (AAm), 2-(Dimethylamino)ethyl methacrylate (DMAEMA), 2-hydroxyethyl methacrylate (HEMA) and hydroxypropyl methacrylate (HPMA) as monomers, dibenzyl trithiocarbonate (DBTTC) and 4-cyano-4-[(dodecylsulfanylthiocarbonyl)sulfanyl] pentanoic acid (CDTPA) as RAFT agents, in addition to Eosin Y (EY) and Rose Bengal (RB) as photoinitiator and photoabsorber, respectively. As bioactive agents, β -tricalcium phosphate and nanohydroxyapatite (nHA) were synthesized at the laboratory and added to the monomeric mixture, aiming to improve the biocompatibility and mechanical resistance of the bone scaffolds. After resin fabrication, the printability of the scaffolds with micro-channels was evaluated and characterized by biological, morphological, chemical, and mechanical techniques.

Acknowledgments

The authors recognize the financial support from FONDECYT Grant N° 1220251 and N° 11230427.

References

- [1] A.-M. Wu et al. (2021) , doi.org/10.1016/S2666-7568(21)00172-0.
- [2] O. Johnell et al. (1997) , doi.org/10.1016/S0002-9343(97)90023-1.
- [3] F. Zhang et al. (2020) , doi.org/10.1002/adhm.201901358.

Desarrollo de películas poliméricas híbridas con micelas de núcleo lipídico cargadas con doxiciclina incorporadas mediante impresión por inyección de tinta

Gabriela Núñez Barraza
Universidad Católica del Norte

Nelson Díaz Vilca
Universidad Católica del Norte

Wai-Houng Chou Kam
Universidad Católica del Norte

Viviana Vera Lara
Universidad Católica del Norte

Javier Morales Montecinos
Universidad de Chile

Introducción: Doxiciclina es un antibiótico que presenta una moderada solubilidad acuosa y buena permeabilidad gastrointestinal [1]. Con ello, la solubilidad acuosa es el parámetro limitante de las formulaciones orales que contienen este antibiótico. Una estrategia ampliamente utilizada para aumentar la solubilidad acuosa de fármacos es el uso de las nanopartículas. Entre ellas, las micelas de núcleo lipídico (MNLs) son ventajosas ya que presenta una alta afinidad por fármacos poco solubles en agua en su núcleo lipídico siendo un potencial sistema para el transporte de esta clase de principios activos [2]. Por otra parte, los hidrogeles formados por la reticulación de polímeros hidrófilos han sido utilizados ampliamente como sistemas de administración de fármacos, entre los que se encuentran los polisacáridos naturales como el quitosano y el alginato. El quitosano posee numerosas ventajas en donde destaca su actividad antimicrobiana y la estimulación de la curación. Por otra parte, el alginato se extrae de algas pardas y presenta excelentes propiedades gelificantes. Esta mezcla ha sido utilizada para la formación de películas poliméricas delgadas y flexibles, constituyendo una forma farmacéutica de interés [3]. Sin embargo, un problema común de las formas farmacéuticas tradicionales es la existencia de riesgos de efectos secundarios e interacciones, dada que se fabrican en forma estándar y a dosis fijas. Considerando estos problemas, es que surge una amplia gama de tecnologías de impresión permitiendo personalizar la administración de fármacos de acuerdo con la necesidad del paciente [4]. La impresión por inyección de tinta es un método que implica el uso de un sustrato o matriz para la impresión y de una fase líquida cargada de fármaco [5]. Esta técnica permite el diseño de medicamentos específicos para tratar una enfermedad de acuerdo con las características del paciente, asegurando una mejor respuesta. Dado estos antecedentes, este trabajo investigación propone la utilización de películas poliméricas híbridas de quitosano y alginato como matriz capaz de contener micelas de núcleo lipídico, que transporta doxiciclina, a través de la impresión por inyección de tinta, como potencial forma farmacéutica para el tratamiento de infecciones bacterianas de interés clínico.

Objetivo: Evaluar películas poliméricas híbridas de quitosano y alginato, como una matriz capaz de contener micelas de núcleo lipídico cargadas con doxiciclina dispuestas a través de la impresión por inyección de tinta.

Resultados: Se obtienen micelas de núcleo lipídico que contienen doxiciclina que se sintetizan mediante el proceso de emulsificación en caliente de baja energía, bajo el protocolo descrito

por Díaz. Además de obtener, películas poliméricas híbridas de quitosano y alginato delgadas y flexibles, que sirva como una forma farmacéutica que contenga micelas de núcleo lipídico cargadas con doxiciclina.

Agradecimientos

Se extienden los agradecimientos al proyecto semilla UCN denominado "desarrollo de sistemas micelares nanoparticulados como transportadores de antibióticos para la optimización de la terapia antimicrobiana", además se agradece a el consorcio Science Up por el concurso "explora más allá de tus fronteras", también a la Universidad de Chile y al laboratorio Drug-delivery, finalmente se agradece a la Universidad Católica del Norte.

Referencias

- [1] Hofsäss, MA. et al. (2020) , doi.org/10.1016/j.xphs.2020.04.011
- [2] Chou, WH. et al. (2020) , doi.org/10.3390/pharmaceutics12121168
- [3] Karki, S. et al. (2016) , doi.org/10.1016/j.ajps.2016.05.004
- [4] Chou, WH. et al. (2021) , doi.org/10.1016/j.ijpharm.2021.120462
- [5] Montenegro-Nicolini, M. et al. (2017) , doi.org/10.1208/s12248-016-9997-8

Study of the interaction of plasmonic nanoparticles with plasma proteins: a comparison between static and dynamic regime

Carla Arroyo-Rivera¹

Estefanía Torres¹

Karla Vargas¹

Marcelo J. Kogan²

²Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Laboratorio de Nanobiotecnología, Universidad de Chile, Santos Dumont 964, Independencia, Chile.

Natalia Hassan^{1,3,4}

¹Programa Institucional de Fomento a la I+D+i, Universidad Tecnológica Metropolitana, Ignacio Valdivieso 2409, San Joaquín, Chile. -mail: nhassan@utem.cl,

³Advanced Center of Chronic Disease (ACCDiS), ⁴Millenium Nucleus in NanoBioPhysics

In recent years, noble metal nanoparticles (NP) have received significant attention in cancer medical research due to their unique efficacy and specificity in imaging, diagnosis, and therapy. Gold nanoparticles (GNPs) are widely used, particularly in cancer research, because of their ease of synthesis, adjustable size and shape, remarkable biocompatibility, unique optical properties, and surface plasmon resonance (SPR) properties [1]. When exposed to physiological fluids in these kinds of treatments, it is important to understand the interaction with biomolecules such as proteins, lipids, or nucleic acids. Particular attention is given to the immediate adsorption of proteins on the NP surface, since it forms a protein corona (PC) [2] that may modify structures of adsorbed proteins and also eliminate their physiological functions.

Plasma protein such as: albumin (BSA), myoglobin (MYO) and fibrinogen (FIB) were used to study long and short-term interactions in both static and dynamic regime, since it simulates the highly dynamic nature of blood and its heterogeneous flow velocity [3].

In this work, GNPs of different geometries were synthesized which were then interacted with three plasma proteins under a static and dynamic regime, by using microfluidics devices in order to assess the complexation, structural changes, stability and activity of proteins, to further understand the ensuing physiological responses.

Results indicated a strong interaction between GNPs and plasma protein (due to increase in the hydrodynamic diameter, corroborated with SEM and DLS, and differences in the SPR of each geometry) specially under dynamic conditions, where the time of interaction is major. Static regime outcomes are completely different from the former ones, mainly due to protein-protein interactions and the formation of PC.

Acknowledgments

Funding is welcomed for: Nucleus in nanobiophysics (NCN2021_021), Fondecyt 1230830, FONDAF 15130011 and Internal Project LPR21-09 by Universidad Tecnológica Metropolitana.

References

- [1] Yang Z. et al. (2021), doi.org/10.3389/fonc.2021.819329
- [2] Liu J. et al. (2017), doi.org/10.1016/j.actbio.2017.03.055
- [3] Orellana N. et al. (2021), doi.org/10.1039/d1nr03179a,

Multiple Beta-sheet breaker-functionalized gold nanoparticles as novel candidates in the treatment of Alzheimer's disease.

Andreas Tapia-Arellano
Programa Institucional de Fomento a la Investigación, Desarrollo e Innovación, Universidad Tecnológica

Metropolitana, Chile / Facultad de Cs. Qcas. y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Chile / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Chile / Millennium Nucleus in NanoBioPhysics

Elizabeth

Cortés-Adasme; Pablo Cabrera

Facultad de Cs. Qcas. y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Chile / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Chile

Karen Bolaños

Facultad de Cs. Qcas. y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Chile / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS), Chile / Program of Cell and Molecular Biology, Center for Studies on Exercise, Metabolism and Cancer (CEMC), Institute of Biomedical Sciences (ICBM), Facultad de Medicina, Universidad de Chile, Chile

Freddy Celis; Rebeca Aldunate; Natalia Hassan

Facultad de Cs. Naturales y Exactas, Universidad de Playa Ancha, Valparaíso / Facultad de Ciencias, Universidad Santo Tomás, Chile / Programa

Alzheimer's disease is one of the most important neurodegenerative illnesses and the most common dementia. One of the hallmarks of this disease is the aggregation process of amyloid- β peptide ($A\beta$). In physiological conditions, the $A\beta$ monomer is maintained in a soluble form but in pathological conditions it begins to aggregate, producing different toxic intermediaries until generating the $A\beta$ fibrils and senile plaques. Nowadays, it is known that these intermediate species, called oligomers, are toxic and responsible for neuron death both in vitro and in vivo studies [1]. Thus, the $A\beta$ aggregation process has become a main strategy to be inhibited, and specifically focused on decreasing the $A\beta$ oligomeric species. However, the current strategies have failed because they cannot either reach an adequate concentration in the brain or cross the brain-blood barrier that protects the central nervous system.

In this regard, Nanobiotechnology has acquired great relevance in the field of nanomedicine, where efforts have focused on the detection, diagnosis, and therapy of diseases. Gold nanoparticles (GNP) have stood out in this area because they are stable, biocompatible, and easy to synthesize. These GNP possess attractive properties and can be functionalized with different kinds of molecules to be used in drug delivery and targeting, and also they have been demonstrated to cross biological membranes such as the brain-blood barrier [2]. Thus, GNP have been used in strategies to destroy cancer cells or disaggregate the $A\beta$ peptide related to Alzheimer's disease.

In this study, multiple shapes of gold nanoparticles were synthesized since it has been observed that the $A\beta$ aggregation process is modified depending on the GNP shape present [3]. Then, GNP were functionalized with polyethylene glycol, to increase their stability and bioavailability, and with a beta-sheet breaker, the peptide D3, to target specifically the oligomeric species involved in the aggregation process of $A\beta$. These novel gold nanoparticles were characterized by physicochemical and imaging techniques, analysed their cytotoxicity in a human neuroblastoma cell line SH-SY5Y, and evaluated their inhibitory potential effect on a *C. elegans* model, which expresses the $A\beta$ peptide. The results showed that GNP exhibited similar physicochemical properties, a low cytotoxicity even at high GNP concentrations, and an inhibitory effect on the $A\beta$ aggregation process. Thus, these Beta sheet breaker-functionalized GNP become potential candidates in the treatment for Alzheimer's disease.

*Institucional de Fomento
a la Investigación,
Desarrollo e Innovación,
Universidad Tecnológica
Metropolitana, Chile /
Advanced Center for
Chronic Diseases
(ACCDiS), Chile /
Millenium Nucleus in
NanoBioPhysics*

Marcelo J. Kogan
*Facultad de Cs. Qcas. y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile,
Chile / Advanced Center
for Chronic Diseases
(ACCDiS), Chile.*

Acknowledgments

Postdoctorado Fondecyt 3220583 and 3220587, doctorado fondecyt 202110617 and 21200403, Millenium Nucleus in NanobioPhysics (N2BP) N°NCN2021_021, Fondecyt 1230830 and 1211482, Fondap 15130011.

References

- [1] Kulenkampff et al. (2021) , doi.org/10.1038/s41570-021-00254-9
- [2] Sibuyi et al. (2021), doi.org/10.1186/s11671-021-03632-w
- [3] Tapia-Arellano et al. (2021), doi.org/10.1016/j.msec.2021.112269

Melanoma cell-derived exosomes with inclusion of gold nanorods for potential photothermal therapy in metastatic cancer

Karen Bolaños Jiménez

Advanced Center of Chronic Diseases, Santiago, Chile / Center for studies on Exercise, Metabolism and Cancer (CEMC), Laboratory of Cellular Communication, Program of Cell and Molecular Biology, Faculty of Medicine, Institute of Biomedical Sciences (ICBM), Universidad de Chile, Santiago, Chile / Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile

Daniela León

Advanced Center of Chronic Diseases, Santiago, Chile / Center for studies on Exercise, Metabolism and Cancer (CEMC), Laboratory of Cellular Communication, Program of Cell and Molecular Biology, Faculty of Medicine, Institute of Biomedical Sciences (ICBM), Universidad de Chile, Santiago, Chile / Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile.

Eyleen Araya

Departamento de Ciencias Químicas, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Andres Bello, Santiago, Chile

Cutaneous melanoma is an aggressive type of cancer, with a rapid progression, resistance to chemotherapy, and metastatic potential to the lung. Conventional chemo- and radiotherapy are the principal approaches for treating metastasizing tumors, but the lack of targeting results in serious side effects and low treatment efficacy.

Nanoparticles can increase selectivity, given that they can accumulate at specific locations due to the Enhanced Permeation and Retention effect. In this respect, plasmonic NPs, such as gold nanorods (AuNRs) are interesting due to their ability to convert light into heat (30-40% efficiency). Also, light absorption can be modulated by changing their axis ratio and tuning to the Near Infrared (NIR) biological window (700-980 nm), where biomolecules display low absorption. Therefore, the heat produced after NIR-irradiation can be used for controlled drug delivery, as well as photothermal tumor ablation.

To increase the tumor accumulation of AuNRs, exosomes (sizes from 40-150 nm) have attracted considerable attention due to their remarkable biocompatibility and natural cell-accumulation selectivity. Thus, we proposed to load exosomes with AuNRs. We used murine melanoma B16F10 cells as the exosome-producing cell line, given that these cells reportedly metastasize selectively to the lungs in a C57BL/6 mice model

We proposed two strategies for incorporating AuNRs into exosomes: by functionalizing the AuNRs with folic acid (AuNR-FA, via folic acid receptors) or using an arginine-rich cell-penetrating peptide (AuNR-r8, electrostatic interaction with the cell membrane).

The AuNR, AuNR-FA, and AuNR-r8 were characterized by UV-VIS-NIR and displayed the characteristic peaks at 757nm, 737nm, and 750nm. The DLS presented two peaks 3 and 52nm; 7 and 79nm; 5 and 60nm, the diameter increased at each step of functionalization. Also, the Z potential was found to be 34 ± 1 mV, -20 ± 1 mV, and -2 ± 1 mV, due to the CTAB displacement from the AuNR surface in the functionalization. B16F10 cells were incubated with AuNR-FA or AuNR-r8 and two methodologies of exosome isolation were evaluated: ultracentrifugation (UC) and the exospin (ES).

TEM showed the characteristic morphology and size of the AuNRs (main aspect ratio=4) and Exos (90-130nm). For the AuNR-containing exosomes Exos-AuNR-FA UC, Exos-AuNR-FA ES, Exos-AuNR-r8 UC, and Exos-AuNR-r8 ES, TEM images revealed the inclusion of AuNRs in 10, 8%, 17%, and 5%. In addition, the gold content in the isolated Exos-AuNR was determined by GFAAS, with a gold content of $7535\mu\text{g/Kg}$, $2370\mu\text{g/Kg}$, $6853\mu\text{g/Kg}$, and $3918\mu\text{g/Kg}$. Also, sizes of 132 ± 3 nm for Exos alone, 134 ± 3 nm, 141 ± 2 nm, 133 ± 2 nm, and 142 ± 3 nm for Exos with NRs were determined by NTA.

Marcelo J Kogan
*Advanced Center of
Chronic Diseases,
Santiago, Chile /
Departamento de
Química Farmacológica y
Toxicológica, Facultad de
Ciencias Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile,
Santiago, Chile*

Andrew Frederick
Geoffery Quest
*Advanced Center of
Chronic Diseases,
Santiago, Chile / Center
for studies on Exercise,
Metabolism and Cancer
(CEMC), Laboratory of
Cellular Communication,
Program of Cell and
Molecular Biology,
Faculty of Medicine,
Institute of Biomedical
Sciences (ICBM),
Universidad de Chile,
Santiago, Chile.*

In Western blotting Alix, TSG-101, and CD81 were observed in cell lysates, Calnexin, was not detected in all the isolated Exos and Exos-AuNR. These results suggest that we successfully obtained AuNR-loaded exosomes from a B16F10 cell line for potential application in photothermal therapy.

Acknowledgments

The authors acknowledge FONDECYT postdoctoral award 3220587 (KB), ANID 21210568 (DL), FONDECYT 1190623 (EA), 1210644 (AFGQ) and FONDAP 15130011 (AFGQ, MK), for financial support.

References

- [1] Sharma, P. et al. (2020), doi.org/10.1038/s41598-019-56542-4
- [2] Bolaños, K et al. (2020), doi.org/10.1039/D0TB01246G
- [3] Weissleder, R. et al. (2001), doi.org/10.1038/86684
- [4] Lara, P. et al (2020), doi.org/10.1186/s12951-020-0573-0
- [5] Wang, J. (2018), doi.org/10.1002/adfm.201707360

Adsorción de grupos aminos aromáticos en nanomateriales a base de carbono

Sofía Flores^{1,2}

Valeria del Campo^{1,3}

Natalia Hassan^{2,3}

¹Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María

²Programa Institucional
de Fomento a la I+D+i,
Universidad Tecnológica
Metropolitana

³Núcleo Milenio en
NanoBioFísica

La nanomedicina ha hecho aportes significativos para la salud de las personas, desarrollando implantes, terapias, medicamentos y reparación de tejidos entre otros [1]. Para diseñar materiales implantables, que imiten las funciones biológicas requeridas, es importante comprender la respuesta del cuerpo humano a estos materiales. Para ello es fundamental comprender la interacción entre las superficies de estos materiales y las biomoléculas, como lo son los aminoácidos, unidad principal de las proteínas.

En este trabajo estudiamos experimentalmente la interacción entre nanomateriales a base de carbono, y grupos aminos aromáticos. En particular la adsorción de triptófano en grafeno. Se ha realizado el crecimiento de grafeno por depósito químico en fase de vapor y hemos analizado la naturaleza de la interacción mediante mediciones de absorbancia, espectroscopía Raman, microscopía electrónica (SEM) y de fuerza atómica (AFM). En primera instancia se ha observado la adsorción de triptófano en nuestros sistemas que están siendo analizados a través de la cuantificación de éstos. Para una concentración de 10 μM y una superficie de grafeno de 2,284 cm^2 se observa un cambio en la absorbancia de 0,002, lo que equivale a una concentración de 9,79 μM .

Agradecimientos

Las autoras agradecen el apoyo financiero de los proyectos: ANID-Fondecyt 1210490; ANID-ECOS210038-C21E08; ANID-FONDAP-1522A0006 and ANID - Millennium Science Initiative Program - NNBP # NCN2021_021.

Referencias

[1] Riehemann K. et al. (2013), doi.org/10.1002/anie.200802585.Nanomedicine

Desarrollo de un nanosistema lipídico vectorizado con péptido de reconocimiento de células tumorales de cáncer de ovario para la entrega controlada de Morina

Jorge Sanchez-Hoyos,
Harold Gómez-Estrada,
*Grupo de Investigación
en Química Orgánica
Medicinal, Facultad de
Ciencias Farmacéuticas,
Universidad de
Cartagena,
Cartagena-Colombia*

Pablo Reyes , Fredys
Sanchez-Hoyos,
Ewaldo
Zavala-Urtecho ,
Marcelo Kogan,
*ACCDIS, Facultad de
Ciencias Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile,
Independencia, Santiago,
Chile.*

Eyleen Araya-
Fuentes.
*Laboratorio de
Nanotecnología,
Departamento de
Química, Facultad de
Ciencias Químicas,
Universidad Andrés Bello,
Santiago, Chile.*

El cáncer de ovario es una de las principales causas de muerte por cáncer entre mujeres, ocupando el quinto lugar en la estadística. Afecta principalmente a mujeres mayores y, lamentablemente, no existen fármacos terapéuticos efectivos a largo plazo [1]. Ante la necesidad de nuevas opciones terapéuticas, la nanotecnología se presenta como una herramienta prometedora al facilitar el acceso de fármacos al sitio específico de acción al ser vectorizado con péptidos de reconocimiento [2]. En este sentido, se ha demostrado que la Morina, compuesto natural presente en diversas plantas, posee efectos antitumorales significativos en distintos tipos de cáncer. Al igual que otros bioflavonoides, la Morina presenta una baja solubilidad en agua y una permeabilidad limitada, lo que puede afectar su actividad biológica [3]. En este trabajo, tiene como objetivo desarrollar un sistema nanolipídico cargado con Morina y vectorizado con el péptido FSH β 33-53, el cual está dirigido a células cancerosas de ovario que sobreexpresan el receptor FSH. Se ha desarrollado un nanosistema que contiene Morina encapsulada en liposomas. Estos liposomas se conjugaron con el péptido FSH β 33-53 y dipalmitoilfosfatidilcolina (DPPC), junto con una mezcla de otros lípidos para una entrega controlada [4]. Para la formación de estos liposomas se empleó el método de hidratación del film lipídico, seguido de etapas de extrusión. Los liposomas resultantes fueron caracterizados por medio de técnicas como espectrofotometría UV-visible, dispersión dinámica de la luz y microscopía electrónica de transmisión (TEM). A su vez, se cuantificó el porcentaje de encapsulación del compuesto para determinar la concentración dentro de los liposomas. Todo ello se llevó a cabo con el objetivo de asegurar la carga de una dosis efectiva [5]. En cuanto al tamaño de los liposomas, los mismos se encuentran en el rango de 100 ± 20 nm, con una polidispersidad de 0,07 y un potencial Zeta menor a $+3 \pm 2$ mv. Este nanosistema puede tener múltiples aplicaciones farmacológicas, ya que su tamaño y composición son ideales para la administración de medicamentos y tratamientos específicos. En estudios posteriores el efecto de los nanosistemas lipídicos vectorizados sobre la viabilidad celular de la línea celular A2780 de cáncer de ovario mediante el ensayo colorimétrico MTS.

Agradecimientos

Proyecto: Fondecyt 1211482, Fondap 15130011, fondecyt 1230303 Universidad de Cartagena, pasantía internacional resolución n° 00478-2022.

Referencias

- [1] American Cancer Society (2023), www.cancer.org/cancer/types/ovarian-cancer/about/keystatistics.html#:~:text=Ovarian%20cancer%20ranks%20fifth%20in,is%20about%201%20in%20108.
- [2] Sharma et al. (2022), doi.org/10.1021/acsomega.2c03974
- [3] Jangid et al. (2018) , doi.org/10.1039/C8RA04139C
- [4] Ruiz ortega (2011) <http://hdl.handle.net/20.500.12984/7821>
- [5] Bejarano et al. (2020), doi.org/10.1016/j.jconrel.2020.11.002

Lotse L. Blamey,
Giannina Espina, Jenny
M. Blamey
*Fundación Científica y
Cultural Biociencia,
Santiago, Chile*
Jenny M. Blamey
*Universidad de Santiago
de Chile*

Biosynthesis of metallic silver, copper and zinc nanoparticles with antimicrobial properties by the thermophilic Antarctic bacterium *Geobacillus* sp. ID17

Nanoscale materials have emerged as novel antimicrobial agents, owing to their high surface area-to-volume ratio and the unique chemical and physical properties, which increase their contact with microbes and their ability to permeate cells. Metallic nanoparticles (e.g. silver, copper and zinc) have shown to exert antibacterial, antifungal, and even antiviral effects, being currently used in medical applications.

In order to synthesize antimicrobial nanoparticles, a variety of chemical and physical procedures are currently used. However, these methods are fraught with many problems including the use of toxic solvents, generation of hazardous by-products, and high-energy consumption. There is an increasing pressure to develop clean, nontoxic and environmentally friendly procedures for green synthesis of metallic NPs.

One approach to achieve this objective is to take advantage of the array of microbiological resources in nature. Microorganisms play an important role in adsorbing metals from their environment. They have a large metabolic repertoire for adapting at higher concentrations of metals, reducing toxicity through changing the redox state of metallic ions present in their surroundings, which might lead to the formation of metallic bionanoparticles, through intracellular or extracellular routes [1].

These biologically synthesized metallic NPs differ from the chemically produced ones in their physical properties, opening additional technological opportunities. In addition, when synthesized by extremophilic microorganisms, bionanoparticles possess higher chemical stability [2].

At Fundación Biociencia, we have successfully obtained different biosynthesized nanoparticles using the thermophilic Antarctic bacterium *Geobacillus* sp. ID17. The cells were incubated with the corresponding salt: AgCl, CuSO₄, ZnCl₂ at 65 °C for 19 h and reduction was evidenced by a change in the culture appearance. BioNPs were then collected by cell disruption, centrifugation and biphasic separation. The properties of the different metallic bioNPs obtained were evaluated using transmission electron microscopy and energy-dispersive X-ray analysis. Additionally, plate assays confirmed antimicrobial properties against *Escherichia coli* and *Bacillus subtilis* of the silver, copper and zinc bioNPs.

Acknowledgments

Fundación Biociencia, DEVCOM ARL, Universidad de Santiago de Chile.

References

- [1] Salem, S. Salem et al. (2021), doi.org/10.1007/s12011-020-02138-3
- [2] Daniela L. Correa-Llantén et al.(2013), doi.org/10.1186/1475-2859-12-75

Propolis combined with honey-copper nanoparticles enhance antibacterial activity: potential application in chronic wound healing

Limberg Jaldin Crespo

*Instituto de Ciencias e
Innovación de la
Universidad del
Desarrollo*

Jéssica Martínez
Arenas

*Instituto de Ciencias e
Innovación de la
Universidad del
Desarrollo*

Fabia Zúñiga

*Instituto de Ciencias e
Innovación de la
Universidad del
Desarrollo*

Marcelo Ezquer

*Instituto de Ciencias e
Innovación de la
Universidad del
Desarrollo*

Chronic wounds present a significant healthcare challenge, often complicated by the presence of multidrug-resistant bacteria (MD-RB). This study elucidates the potential of natural agents combined with nanotechnology as a potent alternative against MD-RB. Propolis extract combined with honey-copper nanoparticles (PE + H-CuNP) was characterized by antioxidant capacity, transmission electron microscopy (TEM), dynamic light scattering (DLS), and polydispersity index (PDI). The DPPH radical scavenging capacity was 37 %, TEM analysis revealed spherical nanoparticles with an average size of 2.7 ± 0.6 nm. The nanoparticles exhibited stability, as indicated by a ζ -potential of -24.8 ± 4.9 mV. A moderate degree of size distribution in the nanoparticle formulation was observed with a PDI value of 0.4 ± 0.02 . Antibacterial activity of (PE+H-CuNP) against *Staphylococcus aureus* methicillin-resistant (SA-MR) and *Pseudomonas aeruginosa* carbapenem-resistant (PA-CR), showed a 100 % ± 1 and 74 % ± 5 of inhibition, respectively. The combination (PE + H-CuNP) demonstrated an enhanced antibacterial effect compared to individual components. In conclusion, this study highlights the potential of natural agents and nanotechnology in developing effective therapies for infected chronic wound healing, providing a potential substitute for traditional antibiotics.

Acknowledgments

Al programa de Doctorado en Ciencias e Innovación de la Universidad del Desarrollo.

References

- [1] N. A. Ismail (2019), doi.org/10.1016/j.msec.2019.109899
- [2] D. F. Pancu (2021), doi.org/10.3390/antibiotics10040401
- [3] A. I. Ribeiro (2022), doi.org/10.1021/acsnm.1c03891

Development of a microfluidic platform as an interaction interface for detection of exosomes derived from breast cancer cell lines

Felipe Rojas G.
*Microfluidics for
Nanobiotechnology
Laboratory (MINANO
Lab), Universidad
Tecnológica
Metropolitana, Chile*

Cabeza Carolina H.
*School of Medicine and
Center for Research in
Health and Society
(CEISS), Faculty of
Medical Sciences,
Universidad Bernardo
O'Higgins, Chile*

Natalia Hassan L.
*Microfluidics for
Nanobiotechnology
Laboratory (MINANO
Lab), Universidad
Tecnológica
Metropolitana, Chile*

Rina Ortiz D.
*Laboratory of Bioassays,
Center for Biomedical
Research and Obstetrics,
Faculty of Medicine,
University of Valparaíso,
Chile*

Cancer corresponds to the second cause of death from diseases at a national and global level, it is imperative that there are faster, cheaper, and more effective ways to detect this disease early, thus avoiding its progression [1,2]. Likewise, much less invasive methods are sought than current diagnoses and treatments, such as conventional biopsy and chemotherapy. Liquid biopsy is a term that refers to the sampling and analysis of non-solid biological tissue, most commonly blood, but also saliva, urine, cerebrospinal fluid, and other body fluids, in which tumor markers may be found [3]. Microfluidics, which is the manipulation of fluids at the micrometer scale, is an integrated application that can capture and detect either circulating tumor cells or other tumor-derived molecules, through the design and manufacture of microdevices capable of sensitively and specifically detecting components desired by researchers, functioning as analytical devices.

Exosomes are small extracellular vesicles between 30-150 nm in size, secreted by most eukaryotic cells, and have recently been found to play an important role in many cellular processes, such as cell communication and immune response. Breast and ovarian cancer patients have been reported to contain higher concentrations of exosomes than healthy individuals, suggesting that cancer may increase the overall abundance of exosomes in the body [4]. Recent studies have confirmed that cancer cells, prior to metastasis, they release large amounts of exosomes that contain tumor-specific markers and that facilitate tumor development and the metastatic process, proposing exosomes as effective markers of tumor progression [5].

Our goal is design and fabricate a microdevice with the microfluidic lab-on-a chip approach, which will contain nanotechnological elements that allow the specific and quantitative efficiency detection of early cancer markers from liquid biopsy.

Methods. We fabricated a microfluidic device to capture exosomes, using a design with zigzag channels, composed inside by a 3D nanostructure of monodisperse colloidal silica bioconjugated with specific monoclonal antibodies of exosomal surface proteins (CD81, CD63, Lactadherin) from breast cancer patients.

We have developed with a greater efficiency a three-dimensional structure of monodisperse colloidal silica nanoparticles bioconjugated with antibodies of exosomal surface proteins validated by epifluorescence and scanning electron microscopy.

Projections. We are working on validating the effectiveness and efficiency in detection of

exosomes derived from breast cancer cell lines positive for CD63, CD81, Lactadherin and VE-cadherin proteins by immunofluorescence.

Acknowledgments

This work was supported by FONDECYT 11200778, ANID. University of Valparaíso, School of Obstetrics and Center for Biomedical Research, Faculty of Medicine, Chile. Microfluidics for Nanobiotechnology Laboratory (MINANO Lab) of the Universidad Tecnológica Metropolitana, Chile.

References

- [1] Torre, L. A. et al. (2015), doi.org/10.3322/caac.21262
- [2] Howlader N. et al. SEER Cancer Statistics Review, 1975-2016. National Cancer Institute (2019)., seer.cancer.gov/csr/1975_2016/
- [3] Kulasinghe, A., et al. (2018), doi.org/10.3390/mi9080397
- [4] Galindo-Hernández, O. et al. (2013), doi.org/10.1016/j.arcmed.2013.03.002
- [5] Melo, S. A. et al. (2014), doi.org/10.1016/j.ccell.2014.09.005

Sebastián Santander

Nicolas
Padilla-Manzano

Luis Felipe Álvarez

Laura Tamayo

*Departamento de
Química, Facultad de
Ciencias, Universidad de
Chile, Las Palmeras
3425, Santiago 7800003,
Chile*

Efecto de la funcionalización de poli(anhídrido maleico-co-estireno) con aminoácidos de distinto índice hidropático en la respuesta bioactiva de mallados poliméricos

Las heridas crónicas representan un gran problema para los sistemas de salud en el mundo, como así también para los pacientes que sufren este tipo de afecciones. En Chile el tratamiento convencional de heridas crónicas se basa en el desbridamiento del sitio de la herida y la posterior aplicación de gasas que actúan como una barrera física protectora a las alteraciones del medio externo, sin embargo, esto no impide que la herida se infecte retardando su cicatrización. En este escenario, el tratamiento ideal para heridas crónicas se basa en el uso de apósitos bioactivos elaborados a partir de polímeros capaces de liberar agentes activos que promuevan la cicatrización y/o prevengan infecciones, no obstante, pese a las significativas ventajas de este tipo de apósitos, existe una problemática asociada con el control de la velocidad con que se liberan, la cual se debe ajustar a las características de cada herida.

En este contexto, el presente trabajo se basó en la elaboración de mallados poliméricos bioactivos electrohilados de poli(anhídrido maleico-co-estireno) [PSMA] funcionalizado aminoácidos de diferentes índices hidropáticos; L-glutamina, L-fenilalanina y L-tirosina obteniendo derivados de los copolímeros denominados PSMA@Gln, PSMA@Phe y PSMA@Tyr, respectivamente. La característica bioactiva de cada mallado fue proporcionada por la incorporación de agentes activos: caléndula, cal, como agente cicatrizante y nanopartículas de plata, NPAg, como agente antibacteriano.

A partir de las soluciones poliméricas de PSMA y sus derivados se elaboraron mallados poliméricos mediante la técnica de electrohilado. Luego, los mallados fueron caracterizados morfológicamente mediante microscopía electrónica, medidas de ángulo de contacto y capacidad de absorción de agua. La respuesta bioactiva se evaluó por ensayo de citotoxicidad frente a fibroblastos NIH3/3T3, ensayo hemolítico, y ensayo antibacteriano contra cepas *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 y *Staphylococcus aureus* ATCC 33592 resistente a la metilicina.

Los resultados obtenidos, mostraron una mayor humectabilidad para PSMA@Gln, lo que concuerda con el valor del índice hidropático del aminoácido. Sin embargo, la liberación de NPAg fue mayor para PSMA y más controlada para PSMAf, mientras que las curvas de liberación de Cal no mostraron un comportamiento relacionado con la humectabilidad de los

mallados, debido al carácter apolar del agente activo. Por último, las diferencias en la humectabilidad de los mallados también afectaron a su bioactividad.

Agradecimientos

Proyecto Fondecyt regular 1200853

Referencias

- [1] Rezvani E. et al. (2019), doi.org/10.1002/app.47738
- [2] Khazaei A. et al. (2013), doi.org/10.5935/0103-5053.20130145
- [3] Nussbaum S. et al. (2018), doi.org/10.1016/j.jval.2017.07.007
- [4] Tamayo L. et al. (2022), doi.org/10.1016/j.ijpharm.2021.121292

Síntesis y caracterización de nanopartículas de oro multifuncionalizadas con ciclodextrinas y péptido de reconocimiento de células tumorales de cáncer de ovario para la formulación y entrega controlada de epigallocatequina-3-galato (EGCG)

Fredys Sanchez-Hoyos,
Adriana Gauna, Marcelo
Kogan.

*ACCDIS, Facultad de
Ciencias Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile,
Independencia, Santiago,
Chile*

Maycol Huerta-Matus,
Eyleen Araya-Fuentes.

*Laboratorio de
Nanotecnología,
Departamento de
Química, Facultad de
Ciencias Químicas,
Universidad Andrés Bello,
Santiago, Chile.*

Carmen Romero
Osse, Maritza P.
Garrido Palma

*Laboratorio de
Endocrinología y Biología
de la Reproducción,
Departamento de
Obstetricia y Ginecología,
Hospital Clínico
Universidad de Chile*

Claudio Olea

*Laboratorio de Radicales
Libres y Antioxidantes,
Facultad de Ciencias
Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile,
Independencia, Santiago,
Chile.*

El cáncer de ovario es uno de los tipos de cáncer más frecuentes en el mundo, ocupando el octavo lugar en la lista de diagnósticos de cancer. En 2020, más de 313.000 mujeres recibieron un diagnóstico de cáncer de ovario, y aproximadamente 207.000 murieron a causa de esta enfermedad. De hecho, el cáncer de ovario es la segunda causa más común de muerte por cánceres ginecológicos [1]. Para combatir esta enfermedad, se están proponiendo nuevas alternativas basadas en el uso de compuestos naturales. Uno de ellos es el EGCG (epigallocatequina-3-galato), que ha demostrado ser prometedor en numerosos campos gracias a su potencial actividad anticancerígena y prooxidante [2,3]. La tecnología de nanopartículas de oro (NpAu) es una estrategia eficaz para la vehiculización de los complejos de inclusión de ciclodextrina (CD) y fármaco, que permite una dosificación controlada y una vectorización mejorada empleando péptidos de reconocimiento hacia células de cáncer de ovario. El objetivo de este trabajo es obtener NpAu esféricas de 30 nm multifuncionalizadas con CD-NH₂ y péptidos de reconocimiento de células de cáncer de ovario para la formulación y entrega controlada de EGCG. Para direccionar el sistema, se plantea la implementación del péptido FSH β 33-53, el cual es específico al receptor FSH, sobreexpresado en el cáncer de ovario. La CD se utilizará para formar complejos de inclusión con la molécula EGCG, mejorando su estabilidad. Las NpAu funcionarán como nanovehículo para transportar los complejos de inclusión y ser vectorizado por el péptido, mejorando la selectividad y eficacia del tratamiento [4,5]. Se logró sintetizar exitosamente NpAu esféricas de 30 nm con un plasmón de 526 nm utilizando la estrategia de síntesis a altas diluciones a una relación molar de 15 ([Citrato]/[oro]). La síntesis fue reproducible y se obtuvo una concentración final de 0,97 nM. Además, se logró estabilizar las NpAu con PEG carboxilo y metoxilo. El grupo carboxilo del PEG nos permitió funcionalizar la CD-NH₂ y el péptido FSH. Se obtuvieron tres nanosistemas funcionalizados con diferentes proporciones de CD-NH₂ y péptido. El seguimiento fisicoquímico mostró una variación en el diámetro hidrodinámico y potencial zeta de los nanosistemas. El potencial zeta fue el factor determinante para visualizar la funcionalización, al variar significativamente en cada proporción de funcionalización al disminuir el FSH. Posteriormente, se evaluó el efecto citotóxico de los nanovehículos sin carga

de EGCG en concentraciones de hasta 1 nM, utilizando el ensayo colorimétrico de MTT en la línea celular A2780. De acuerdo con la norma ISO 10993-5, los resultados indicaron que los nanovehículos no tuvieron un efecto citotóxico significativo, con un porcentaje de viabilidad superior al 80%. En los próximos estudios, se investigará la formación de complejos de inclusión con EGCG para su posterior análisis de actividad prooxidante, inhibición de proliferación e internalización celular en la línea A2780.

Agradecimientos

Fondecyt 1211482, Fondap 15130011, Fondecyt 1230303, Beca Minciencia Doctorado Exterior - 8852 (Colombia).

Referencias

- 1] American Cancer Society. (2023),
www.cancer.org/cancer/types/ovarian-cancer/about/key-statistics.html
- 2] Almatroodi et al. (2020), doi.org/10.3390/molecules25143146
- 3] Dobrzynska et al. (2020), doi.org/10.3390/biom10091268
- 4] Yao et al. (2020), doi.org/10.3389/fmolb.2020.00193
- 5] Amina et al. (2020), doi.org/10.2147/IJN.S279094

Colloidal nanomedicines with prolonged release based on interactions involving aromatic groups

María Gabriela Villamizar Sarmiento¹

Oswaldo Yáñez
Núcleo de Investigación en Data Science, Facultad de Ingeniería y Negocios, Universidad de las Américas, Santiago 7500000, Chile

Mario E. Flores, Ignacio Moreno-Villoslada
Laboratorio de Polímeros, Instituto de Ciencias Químicas, Facultad de Ciencias, Universidad Austral de Chile, Valdivia 5090000, Chile

Fernando González-Nilo
Center for Bioinformatics and Integrative Biology (CBIB), Facultad de Ciencias de la Vida, Universidad Andres Bello, Av. República 330, Santiago 8370146, Chile

Gonzalo Álvarez-Acevedo¹
Felipe A. Oyarzun-Ampuero¹
¹Department of Sciences and Pharmaceutical Technology, University of Chile, Santiago de Chile 8380494, Chile

Polymeric drug delivery systems in the form of nanoparticles (NPs) are advantageous for controlled administration of drugs into the body, helping to achieve desired target tissues, prolonging drug release and providing stable drug concentration in blood [1]. Among the different drugs, it deserves special attention the vast number of active molecules accomplishing these four requisites: possessing aromatic residues, bearing ionizable groups, showing low molecular weight (≤ 500 Da), and being water-soluble [2]. Unfortunately, following traditional nanoencapsulation strategies, these drugs are hardly encapsulated [3-5]. Interestingly, this kind of drugs should potentially undergo aromatic-aromatic interactions with aromatic excipients such as aromatic polymers [4, 5].

In this investigation, colloidal nanomedicines containing the aromatic drug chloroquine and the polymer poly(sodium 4-styrenesulfonate) have been theoretical designed and experimental synthesized, following the simple mixture of two aqueous solutions. Theoretical calculations show higher binding energy between both the aromatic polymer and chloroquine, and a higher tendency to release water from their hydration spheres, as compared to the binding between the drug and the aliphatic polymer poly(sodium vinyl sulfonate). Molecular dynamics simulations show the tendency of formation of stable 10 nm structures, even combining short polymer chains, highly diluted reactants, and short reaction time (in the range of μ s). Rapid mixing experiments in a stopped flow equipment show nanoparticle formation in the range of tenths of seconds. Experimental studies in the range of minutes, evidence spheroidal nanoparticles with almost quantitative association efficiency, 48.6 % of drug loading, size of 170 – 410 nm, low polydispersity ($PdI = 0.25 - 0.47$), and negative zeta potential (-18 – -45 mV). They provide drug release for 30 days, and are stable to NaCl exposure, pH gradient, several temperature values, and long-term storage. Furthermore, we demonstrate that the increasing in the reaction volume of reactants allowing scale up. Our studies demonstrated that these highly loaded drug nanoparticles are based on the occurrence of site-specific short-range interactions between the drug and the aromatic excipient such as π -stacking. In the absence of the aromatic group in the polymer, weak interactions and unstable formulations are evidenced, both theoretically and experimentally. These theoretical and experimental studies promote the efficiently production of drug / polyelectrolyte formulations with therapeutical applications. The selected components could be considered as potential medicines or as model components to design, develop, characterize and scale up medicines comprising other combinations of drugs and polymers.

Acknowledgments

This work was supported by FONDECYT 3210549 (M.G.V-S), FONDECYT 1201899 (F.A.O-A), FONDECYT 1210968 (I.M-V.), FONDEQUIP EQM160157 (F A. O-A), FONDAP 15130011 (F A. O-A) and ANID PhD fellowship award 21202337 (G.A-A).

References

- [1] Begines B. et al. (2020), doi.org/10.3390/nano10071403
- [2] Tomar V. et al. (2019), doi.org/10.1016/B978-0-12-809633-8.20157-X
- [3] Jin X. et al. (2019), doi.org/10.1093/nsr/nwz018
- [4] Villamizar-Sarmiento M.G. et al. (2019), doi.org/10.1021/acs.molpharmaceut.9b00097
- [5] Villamizar-Sarmiento M.G., et al. (2021), doi.org/10.1016/j.ejpb.2021.05.023

Efecto de nanopartículas de Quitosano en la inhibición de la formación de biofilm oral in vitro de bacterias del género Streptococcus

Belén González

Departamento de Ciencias de Ambiente, Facultad de Química y Biología, Universidad de Santiago de Chile

Gabriela Pulgares

Departamento de Ciencias de Ambiente, Facultad de Química y Biología, Universidad de Santiago de Chile

Alexander Gamboa

Departamento de Ciencias de Ambiente, Facultad de Química y Biología, Universidad de Santiago de Chile

Tamara Bruna

Centro de Investigación AustralBiotech-UST, Santiago

Nelson Caro

Centro de Investigación AustralBiotech-UST, Santiago

El desarrollo de la nanotecnología se ha presentado como una potente alternativa para inhibir la formación de las biopelículas bacterianas, donde el uso de polímeros naturales para la elaboración de nanopartículas se ha ido haciendo cada vez más frecuente. Uno de los polímeros que se ha usado para tal propósito es el quitosano, copolímero de glucosamina y N-acetil glucosamina, obtenido mediante desacetilación alcalina de la quitina, el cual posee una actividad antimicrobiana contra un amplio espectro de bacterias, hongos y levaduras [1]. Las nanopartículas de quitosano (NQo) fueron fabricadas mediante gelificación inotrópica, las que presentaron una estructura esférica de ~60 nm, las propiedades fisicoquímicas de la formulación de NQo mostraron una viscosidad cinemática de 1,1 (mm²/s), Tensión superficial de 73,2 (mN/m), un Radio Hidrodinámico de 310,4 nm, una carga superficial de +49,9 (mV) y un PDI de 0,4. Estas NQo, fueron enfrentadas, a cepas de colección del genero Streptococcus evaluando su actividad antimicrobiana frente a las especies mutans, sanguinis y mitis para evaluar su capacidad antimicrobiana (CAM). Adicionalmente, evaluamos la formación de biofilm in vitro tanto en superficies bióticas y abióticas de las cepas de Streptococcus en mono y co-cultivos. En esta línea, se evaluó el efecto de estas NQo en las distintas etapas de la formación de biofilm en superficie biótica. Finalmente, se determinó difusión de Nqo por método de Kirby-Bauer, obteniendo un halo de 1,2 cm² veces mayor al control (Gm). Estos hallazgos indican que el uso de nanopartículas orgánicas, pueden resultar una interesante estrategia destinada al control de enfermedades orales

Referencias

- [1] Achig Vega, B. A. (2019), doi.org/10.13140/RG.2.2.17004.82563
- [2] Vergara, K. M. A. et al.(2011) ISSN 0034-7507
- [3] Garcés, J. C. O. et al.(2013). ISSN 0120-971X
- [4] Chimenos-Küstner, E. et al. (2017), doi.org/10.1016/j.medcle.2017.05.023
- [5] Luyo, A. G. P. (2005), api.semanticscholar.org/CorpusID:161464626

Comparing the effect of different type of nanofibers alignment methods on muscle cells development

Dragica Bežjak
*Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Benjamín Schleyer
*Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Cristian Acevedo
*Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Tomás P. Corrales
*Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Diego Cortés
*Max Planck Institute for
Polymers, Mainz,
Germany*

Electrospun nanofiber scaffolds have been used for tissue engineering applications as they can be fabricated with biocompatible and biodegradable biomaterials, which are suitable for cell development. One of the advantages of electrospun scaffolds is that nanofibers orientation can be manipulated, allowing us to manufacture scaffolds with aligned or random nanofiber orientation [1]. Aligned electrospun scaffolds are of special interest for use with muscle cells since these organize into aligned elongated cells. Aligned nanofiber scaffolds could guide the development of these types of cells. Other desirable characteristic for scaffolds is that they should mimic the properties of extracellular matrix, such as stiffness, which is very important for cell to adhere, migrate, proliferate, and differentiate [2]. In this work, scaffolds were made from an electrospun blend of polyvinyl alcohol, salmon gelatin and chitosan. Aligned nanofibers were made using two different electrospinning collectors: microstructured static collector and rotating collector. Nanofibers alignment was evaluated from scanning electron microscopy images. The effect of both types of scaffolds on cell development was evaluated using epifluorescence microscopy. Young's modulus was measured using AFM with colloidal probe technique [3]. Alignment of nanofibers was found in both types of scaffolds manufactured with the different collectors, however, only in the scaffold made by rotating collector we observed an effect of nanofibers on muscle cell alignment. The stiffness of the scaffolds, measured as Young's Modulus, was very similar to what is reported in literature for muscle. Here we present a new type of scaffold that has been proven to be suitable for muscle cell alignment and development that could be used in the field of muscle tissue engineering.

Acknowledgments

To ANID National Doctoral Scholarship 21211207 and ANID- Max Planck Project MPG190023.

References

- [1] Jin et al. (2018), doi.org/10.1016/j.msec.2018.06.065
- [2] Choi et al. (2008), doi.org/10.1016/j.biomaterials.2008.03.031
- [3] Kappl & Butt (2002), doi.org/10.1002/1521-411719

Nanopartículas Plasmónicas con derivado curcuminoide para detección de beta-Amiloide en la Enfermedad de Alzheimer

Valentina López

Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile / Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile

Pablo Cabrera; María Paz Oyarzun

Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS)

Nicole Parra

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile

Monica Soler

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile

Marcelo Kogan

Departamento de Química Farmacológica y Toxicológica, Facultad de Ciencias Químicas y Farmacéuticas, Universidad de Chile / Advanced Center for Chronic Diseases

El Alzheimer es una enfermedad neurodegenerativa, cuya manifestación clínica es la disminución de habilidades cognitivas, principalmente asociadas a la memoria. Una de las principales causas de esto es la acumulación de placas amiloideas entre las células nerviosas, conformadas por el péptido β -amiloides ($A\beta$), producido por el corte proteolítico del péptido precursor de amiloide (APP). Estas placas amiloideas se componen de especies solubles e insolubles de $A\beta$, siendo las solubles las primeras en generarse en esta enfermedad. Dentro de los métodos de diagnóstico y seguimiento utilizados actualmente se encuentran la tomografía computarizada de emisión mono-fotónica (SPECT) y la resonancia magnética de imagen (MRI), las cuales arrojan resultados cuando se observa daño estructural y el deterioro cognitivo es irreparable. También existen metodologías para detección temprana, pero sin resultados concluyentes o difíciles de llevar a cabo por sus elevados costos [1].

Los CRANAD son derivados curcuminoideos que poseen un grupo dicetona central unido a BF₂, siendo este último el que desplaza la respuesta fluorescente del sistema al near IR, el que lo hace de interés en imagenología como un potencial método de diagnóstico in vivo. La molécula CRANAD-102 tiene una alta afinidad por los agregados solubles de $A\beta$ y al unirse a estos posee un máximo de emisión de fluorescencia a 700 nm, lo que podría permitir una detección temprana en la primera ventana biológica (700-900 nm) [2]. Por otra parte, las nanovarillas de oro por su propiedad de Resonancia de Plasmón Superficial Localizada (RPSL) pueden presentar bandas plasmónicas en la región infrarroja donde se encuentra la ventana biológica. Por lo tanto, para mejorar la sensibilidad de la detección del CRANAD-102 se quiere aprovechar la propiedad de fluorescencia amplificada por superficie de las nanobarras de oro, modificando la molécula curcuminoide para su posterior funcionalización a la nanopartícula [3]. En el presente estudio, se propone utilizar nanopartículas de oro recubiertas con sílice mesoporosa para su futura funcionalización covalente con el derivado curcuminoide CRANAD-102, como una potencial herramienta de diagnóstico en la EA.

La metodología utilizada para la obtención de las nanobarras se realiza de acuerdo al protocolo de síntesis mediado por semillas o núcleos descrito por Nikoobakht y El-Sayed. También se presentará la caracterización de las nanobarras mediante espectrofotometría de UV visible, espectroscopía de fluorescencia y SEM. Por otra parte, se presentará la síntesis de la sonda fluorescente CRANAD-102 estructuralmente modificada, primero siguiendo el método de Pabon para la síntesis del curcuminoide y posteriormente la incorporación del grupo BF₂. Y

finalmente se presentará la caracterización del CRANAD-102 modificado realizado mediante resonancia magnética nuclear de ^1H , y espectroscopías FTIR, UV visible, y de fluorescencia.

Agradecimientos

Fondecyt 1201962 y 1211482; Fondap 15130011; Fondecyt postdoctoral 3200610 y 3180651; Beca doctoral ANID 21200617.

Referencias

- [1] Pietrzak, Katarzyna et al. (2018), doi.org/10.2174/1573406413666171002120847
- [2] Li, Yuyan et al. (2017), doi.org/10.1039/c7sc02050c
- [3] Cabrera, Pablo et al. (2022), doi.org/10.1016/j.nano.2022.102569

microRNAs vehiculizados en Nanopartículas de oro direccionalizadas con FSH33, como agente antitumoral sinérgico sobre células de cáncer ovárico

Ana Luisa Riveros
Facultad Ciencias Químicas y Farmacéuticas, U. de Chile / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS)

Maritza P Garrido
Departamento de Obstetricia y Ginecología, Facultad de Medicina, U. de Chile

Orlando Donoso González; Marcelo Kogan
Laboratorio de Nanobiotecnología y Nanotoxicología, Facultad Ciencias Químicas y Farmacéuticas, U. de Chile / Advanced Center for Chronic Diseases (ACCDiS)

Eyleen Araya
Departamento de Ciencias Químicas, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Andrés Bello

Carmen Romero
Laboratorio de Endocrinología y Biología Reproductiva, Hospital Clínico Universidad de Chile / Departamento de Obstetricia y Ginecología, Facultad de Medicina, U. de Chile.

Uno de los enfoques más innovadores para el tratamiento del cáncer ha sido la administración de microRNA (miR) para compensar aquellos que están desregulados [1]. Estas moléculas biogénicas desempeñan un papel multiregulador esencial en procesos celulares como proliferación, supervivencia y metástasis, entre otros. Recientemente, se ha demostrado que los efectos tumorales del factor de crecimiento nervioso y su receptor en células de cáncer epitelial de ovario (COE) dependen de la regulación de los niveles de miR-145 y que su regulación al alza podría utilizarse como posible estrategia terapéutica [2]. Por otro lado, el miR-23b ha mostrado desempeñar un papel importante para la integridad y función endotelial, para el desarrollo embrionario y la angiogénesis postnatal [3], así como también en procesos oncogénicos, estos miRs combinados podrían tener un efecto sinérgico sobre el COE [4]. Sin embargo, para una terapia efectiva, los miRs necesitan ser protegidos de ribonucleasas y ARN no codificantes. En este aspecto, la nanotecnología es una alternativa atractiva para desarrollar agentes terapéuticos seguros y eficaces, especialmente basados en nanopartículas de oro (AuNPs). Las AuNPs presentan interesantes propiedades optoelectrónicas y excelente biocompatibilidad [5]. Su rica química superficial permite su funcionalización con una gran variedad de especies como fármacos, péptidos y material genético, entre otros. Estos agentes activos permanecen protegidos contra la degradación producida por la luz, la oxidación o el ataque enzimático. Además, su acumulación en la superficie de las AuNPs permite usar dosis más concentradas, promoviendo así una mejor respuesta biológica. En este trabajo se propone funcionalizar AuNPs con miR-145 y miR-23b, para transportarlos y usarlos en el tratamiento de COE. Además, se propone direccionar el nanosistema de manera específica, funcionalizándolo con el péptido FSH33 como ligando del receptor FSH específicamente expresado en células de ovario [6]. De esta manera, se espera obtener una formulación compuesta por dos nanosistemas: AuNPs-FSH33/miR-145 y AuNPs-FSH33/miR-23. Las AuNPs fueron sintetizadas por el método de Turkevich [7], posteriormente fueron parcialmente estabilizadas con SH-PEG-NH₂ y funcionalizadas con el péptido FSH33, mostrando un plasmón centrado en los 522 nm, un aumento del diámetro hidrodinámico de 47 a 73 nm, y un cambio de la carga superficial de -43 a -4 mV. El nanosistema AuNPs-FSH33 presentó un diámetro de 10 nm, igual a las AuNPs de síntesis. Al asociarse el miR-145 para formar el nanosistema: AuNPs-FSH33/miR-145, se observó un plasmón en 522 nm, un aumento del diámetro hidrodinámico a 193 nm y un cambio de la carga superficial a -12 mV. El sistema es

estable por al menos 8 días. Como proyección, el nanosistema AuNPs-FSH33/miR-23 será construido y la eficiencia de ambos nanosistemas de manera sinérgica será evaluada frente a células de cáncer epitelial de ovario.

Agradecimientos

FONDECYT 1220479, 1230303; FONDAP 1513001, EQM 170111.

Referencias

- [1] Ch. C. Esau et al. (2007), doi.org/10.1016/j.addr.2007.03.007
- [2] M. P Garrido et al. (2020), doi.org/10.3390/ijms21207657
- [3] S. Oikawua et al. (2018), doi.org/10.1152/ajpheart.00742.2017
- [4] J. Yan et al. (2016), doi.org/10.1186/s13046-016-0307-1
- [5] N. Elahi et al. (2018), doi.org/10.1016/j.talanta.2018.02.088

Felipe Oyarzún Ampuero
Universidad de Chile

Tecnologías poco contaminantes para el atrapamiento/encapsulación de moléculas activas en vehículos de tamaño nanométrico y evaluación en diversos modelos patológicos: diseño, desarrollo, caracterización, evaluación in vitro y validación in vivo

Nuestro grupo de investigación, en colaboración con varios investigadores destacados de Chile, ha investigado profusamente la encapsulación/atrapamiento de moléculas activas de distinta naturaleza fisicoquímica (pequeñas, grandes, hidrosolubles, liposolubles, inestables y mezclas complejas de moléculas solubles + estructuras dispersas, entre otras) y utilizando diversos excipientes (polímeros biodegradables y no biodegradables, oligosacáridos, tensoactivos, aceites y crioprotectores, entre otros). En todos los casos, se buscó promover/mantener el efecto biológico de las moléculas activas contenidas en las formulaciones. Entre las formulaciones desarrolladas podemos destacar complejos, nanopartículas, nanoemulsiones, nanocápsulas, microgeles que contienen nanoestructuras y esponjas activadas con exosomas, entre otras. Como factor común, estas formulaciones se elaboraron a través de tecnologías verdes/poco contaminantes (en medio acuoso, con solventes miscibles en agua y/o con baja aplicación de energía), utilizando reactantes aprobados por las agencias regulatorias para desarrollar alimentos/medicamentos y procurando una exhaustiva caracterización fisicoquímica con validaciones biológicas/terapéuticas. En esta exposición destacaremos los resultados obtenidos con nanopartículas en base a interacciones aromático-aromático fármaco-polímero para liberación controlada de fármacos [1], nanopartículas poliméricas cargadas con péptidos para el tratamiento de enfermedades del sistema nervioso central [2], nanoemulsiones y nanocápsulas para el tratamiento/prevención del cáncer [3], nanovehículos para eliminar *Helicobacter pilori*, microgeles con nanoemulsiones cargadas con activos inestables [4] y esponjas enriquecidas con secretoma (factores solubles + exosomas) de células madre para el tratamiento de enfermedades que cursan con deficiencia vascular (psoriasis vulgaris, cáncer, etc.) [5]. A la luz de estos resultados, estamos proyectando nuevas investigaciones con el fin de obtener nuevas formulaciones y nuevas validaciones en modelos preclínicos/clínicos. Nuestra motivación es que estas nanoformulaciones puedan convertirse en productos de interés terapéutico y disponibles comercialmente como medicamentos y nutraceuticos.

Agradecimientos

Proyectos: Fondecyt (11121481, 1161450 y 1201899), FONDAP (15130011), FONDEF ID16I10258 y EQM 160157

Referencias

- [1] Villamizar-Sarmiento M.G. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.ejpb.2021.05.023
- [2] González L.F. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.jconrel.2020.11.019
- [3] Guerrero S. et al. (2018), doi: 10.1039/c8nr06173d
- [4] Alarcón-Alarcón C. et al. (2018), doi.org/10.1016/j.foodhyd.2018.04.033
- [5] Carrillo D. et al. (2022), doi.org/10.1002/btm2.10443

Improved filtration efficacy and breathability of eco-friendly biofilters against SARS – CoV 2 virus using rotary jet spinning technology

Gloria Oporto Velasquez
*Wood Science and
Technology, West Virginia
University (WVU)*

Edward Sabolsky
*Mechanical and
Aerospace Engineering,
WVU*

Rakesh Gupta
*Chemical and Biomedical
Engineering, WVU*

The global health crisis caused due to SARS – CoV 2 virus (COVID – 19) has increased the use of personal protective equipment and led to the disposal of a tremendous number of masks made of non-biodegradable polymers. The commercial N95 and the surgical masks are usually made of polymers such as polypropylene and polyester, which are not recyclable and do not degrade over time. In addition to the health crisis, COVID -19 indirectly caused an environmental crisis, especially the disposal of N95, surgical, and single-use non-woven masks made with non-biodegradable polymers. Polylactic acid (PLA) is a well-known eco-friendly polymer that is recyclable and biodegradable, capable of replacing polypropylene and other such polymers as non-woven fibers to manufacture N95s and surgical masks. In this work, the non-woven nano- and micro-fibers of PLA were produced by a rotary jet spinning (RJS) technique that has the potential for mass production. The process parameters that aid the formation of nanoporosity within the microfibers were discussed. The microstructure of the fibers was analyzed by scanning electron microscopy (SEM) and a non-invasive X-ray microtomography (XRM) technique was employed to study the three-dimensional (3D) morphology and the porous architecture. Particulate matter (PM) and aerosol filtration efficiency were tested by OSHA standards with a broad range (10–1000 nm) of aerosolized saline droplets. The viral penetration efficiency was tested using the ΦX174 bacteriophage (~25 nm) with an envelope, mimicking the spike protein structure of SARS-CoV-2. Although these fibers have a similar size used in N95 filters, the developed biofilters present superior filtration efficiency (~99%) while retaining better breathability (<4% pressure drop) than N95 respirator filters.

Acknowledgments

The research was co-funded by the National Science Foundation's (NSF) Rapid Response Research (RAPID) grant under the award 2031637 and the National Institute of Food and Agriculture, U.S. Department of Agriculture, McIntire Stennis, under the award WVA00814, Accession No. 1023936.

References

- [1] Choi S. et al. (2021), doi.org/10.1002/advs.202003155
- [2] Du, W. et al. (2021), doi.org/10.1038/s43246-021-00160-z
- [3] Molina, A. et al. (2020), arxiv.org/abs/2004.13494.
- [4] Ren, L. et al. (2015), doi.org/10.1021/acs.macromol.5b00292
- [5] Soo, X. Y. D. et al. (2022), doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.151084

Polyarginine nanocapsules as a carrier for Astaxanthin intranasal delivery to treat neuroinflammatory diseases

Jimena Cordero

Machuca

*Department of
Pharmaceutical Science
and Technology,
University of Chile,
Independencia, Santiago,
Chile.*

Rodrigo Naves

*Program of Immunology,
Institute of Biomedical
Sciences, Faculty of
Medicine, Universidad de
Chile, Santiago, Chile*

Felipe

Oyarzún-Ampuero

*Department of
Pharmaceutical Science
and Technology,
University of Chile,
Independencia, Santiago,
Chile / Advanced Center
of Chronic Diseases
(ACCDiS),
Independencia, Santiago,
Chile.*

Neuroinflammatory diseases are a group of disorders resulting from abnormal immune responses in the nervous system, causing inflammation and tissue damage. Although, nowadays therapies increase survival rates, there are still unsolved problems. One of the main problems is that administered drugs cannot cross the blood-brain barrier (BBB) and deliver the active molecule at adequate concentrations in target sites. For this reason, the nasal route has been proposed to deliver therapeutic agents into the brain by bypassing the BBB [1]. Astaxanthin (AST) is a carotenoid obtained from the microalga *Haematococcus pluvialis* that has great antioxidant, anti-inflammatory, and neuroprotective activity [3]. Polyarginine (PARG) is a cationic polymer that has been reported to enhance nasal delivery without toxic effects on the nasal epithelium [2]. We proposed that AST could have therapeutic effects on multiple sclerosis but its low aqueous solubility and poor stability represent a challenge [4]. To improve AST stability and bioavailability, PARG nanocapsules (NCs) containing AST were developed. The NCs were synthesized using the modified solvent displacement method described previously by Guerrero [5]. PARG was tested at different concentrations (0.06 - 0.25 mg/mL). This strategy permitted us to obtain PAA NCs in the range of 157 - 204 nm, with PDI values (0.1 - 0.2), and positive zeta potential between 33.8 and 57.5 mV, confirming the adherence of polyarginine on the oily droplet's surface. The positive zeta potential is relevant since the NCs are designed to be mucoadhesive and promoting the nasal absorption of AST when administrated by the nasal route. Cell viability was assessed using flow cytometry using DI TNC1 astrocytes treated with NCs for 48 hours. Results showed that the NCs at concentrations of 0,06 mg/mL and 0,125 mg/mL maintain cell viability above 90 %. These results are promising as they demonstrate the safety of the NCs. With these results, in vitro and in vivo experiments will be carried out to evaluate its therapeutic effect.

Acknowledgments

Beca Doctorado Anid 21201535, Fondecyt 1201899, Fondecyt 1231672, Fondecyt EQM 160157.

References

- [1] Bonferoni, MC. et al.(2019), doi.org/10.3390/pharmaceutics11020084.
- [2] Miyamoto, M. et al. (2001), [doi.org/10.1016/S0939-6411\(01\)00149-7](https://doi.org/10.1016/S0939-6411(01)00149-7)
- [3] Chang, MX., Xiong F. (2020), doi.org/10.3390/molecules25225342
- [4] Lu, W. et al. (2020), doi.org/10.1016/b978-0-12-817067-0.00007-5
- [5] Guerrero, S. et al. (2018), doi.org/10.1039/c8nr06173d

Amlodipine entrapment by aromatic-aromatic drug-polymer interactions: a proof of principle testing poly (sodium 4-styrenesulfonate) and hydroxypropylmethylcellulose phthalate

Gonzalo
Álvarez-Acevedo
*Department of
Pharmaceutical Science
and Technology,
University of Chile,
Independencia, Santiago,
Chile / Advanced Center
of Chronic Diseases
(ACCDiS),
Independencia, Santiago,*

María Gabriela
Villamizar-Sarmiento
*Department of
Pharmaceutical Science
and Technology,
University of Chile,
Independencia, Santiago,
Chile / Advanced Center
of Chronic Diseases
(ACCDiS),
Independencia, Santiago,
Chile*

Ignacio
Moreno-Villoslada
*Institute of Chemical
Sciences, Faculty of
Sciences, Austral
University of Chile,
Valdivia, Chile.*

Felipe
Oyarzún-Ampuero
*Department of
Pharmaceutical Science
and Technology,
University of Chile,
Independencia, Santiago,
Chile / Advanced Center
of Chronic Diseases
(ACCDiS),
Independencia, Santiago,
Chile / Center of New
Drugs for Hypertension
(CENDHY), University of
Chile & Pontifical Catholic
University of Chile,
Santiago, Chile.*

The prolonged/controlled release of certain drugs, which present difficulties at being formulated using traditional methods, remains as a current issue. In general, these drugs are hydrophilic/ionic, with aromatic functional groups and showing low molecular weight (HALMD). Given the presence of aromatic groups, the use of oppositely charged aromatic polymers has been reported as an attractive possibility for the encapsulation of HALMD [1]. This type of formulations, supported on aromatic-aromatic drug-polymer interactions, are potentially capable of providing high stability of the formulation, allowing for sustained drug release [2].

In this study, formulations based on the simple combination in aqueous medium of aromatic drugs and polymers, both oppositely charged, are shown as a strategy for drug entrapment and delivery. The selected drug is the amlodipine (Am), the anionic polymers are poly(sodium 4-styrenesulfonate) (PSS) and hydroxypropylmethylcellulose phthalate (HPMCP). Different molar charge ratio (n+/n-) and final molar concentration (n++n-) were tested. Concentration of the polymer was fixed at 2.2×10^{-3} M and drug varies between 2.2×10^{-4} M and 2.2×10^{-3} M. The formulations were characterized by: dynamic light scattering for hydrodynamic diameter and polydispersity, laser Doppler velocimetry for zeta potential, nanoparticle tracking analysis to quantify particle concentration, ultrafiltration to determine association efficiency, and diafiltration to elucidate drug entrapment and thermodynamic or kinetic drug release behavior. The mixture of Am and PSS at n+/n- lower than 0.4 (n++n- $\leq 3.1 \times 10^{-3}$ M), provides soluble complexes. In the range of n+/n- 0.4 to 0.8 (n++n-: 3.1×10^{-3} - 4×10^{-3} M), nanoparticles with size between 200 to 400 nm, low polydispersity index (≤ 0.3), zeta potential of -50 mV, and a particle concentration of 1.1×10^{10} particles/mL (n+/n- 0.6) are observed. Above this n+/n-value, the formation of massive aggregates with size between 10 and 40 μm is evidenced. In the context of Am and HPMCP soluble complexes appear in a n+/n- lower than 0.2 ($\leq 2.6 \times 10^{-3}$ M). In the range of n+/n- from 0.2 to 0.4, low PDI nanoparticles with size in the range of 250-450 nm are presented, showing a zeta potential of approx. -40 mV, and concentration of 7.4×10^8 particles/mL (n+/n- 0.4). Above this ratio, the formation of massive aggregates with size larger than 20 μm are observed. Interestingly, for the Am/PSS formulations, kinetic interactions predominate, in contrast to Am/HPMCP formulations where thermodynamic prevail, as evidenced by diafiltration. Importantly, in all cases, the association efficiency is

above 90%. Drug release studies will elucidate how variables affect the stability and prolonged/controlled release.

This strategy to entrap hydrophilic drugs through aromatic-aromatic drug-polymer interactions present an alternative for prolonged release systems, showing versatility purposes by providing different formulations.

Acknowledgments

Anid 21202337, Fondecyt 1210968 y 1201899, Fondequip EQM 160157.

References

[1] Moreno-Villoslada et. al (2007), doi.org/jp071782m

[2] Villamizar-Sarmiento et. al (2019)

La naturaleza del agua en la zona de constricción del canal CiHv1 podría explicar elementos faltantes en el mecanismo de conducción de protones

Darío Basáez
Universidad de Valparaíso

Juan Alvear
Universidad de Valparaíso

José Gárate
Universidad San Sebastián

Carlos Gonzalez
University of Miami

Nicolás Espinoza
Universidad de Valparaíso

El canal de protones sensible a voltaje (Hv1) es un canal que permea protones selectivamente a través de la membrana. El mecanismo de permeación de esta proteína es aún controversial por la falta de resolución estructural en su estado abierto. Actualmente hay dos hipótesis que intentan explicar el mecanismo de permeación. La primera propone que la conducción de protones ocurre de manera similar al mecanismo de Grothuss, en donde se propone un continuo de agua durante la conformación abierta, así los protones saltan a través de los puentes de hidrógeno formados entre moléculas de agua. Contrario a esta hipótesis, el segundo modelo establece que el continuo de agua es interrumpido por la interacción entre el filtro de selectividad (FS) con la 2da o 3ra arginina del sensor de voltaje. Este modelo propone que el FS se protona para permitir la conducción. A pesar de esto, ninguno de los dos modelos satisface la evidencia experimental, ya que hay datos que sugieren que la asparagina conservada de la alfa hélice S4 es importante en el mecanismo de conducción. Dado que la conducción de protones no puede ser separado de estudios de la naturaleza del agua, con técnicas electrofisiológicas, evaluamos como mutaciones de adición de carga en la posición 264 del canal Hv1 de *C. intestinalis* afectaban las propiedades conductoras de la proteína y por simulaciones de dinámica molecular exploramos el cambio de los perfiles de hidratación, orientación del ángulo de dipolo de las moléculas de agua y eventos de permeación de agua en el canal nativo y los mutantes estudiados por electrofisiología. Así, construimos modelos de la proteína y sus distintos mutantes por homología en estados abiertos y cerrados de estado salvaje y las mutantes N264R y N264E mediante dinámica molecular aplicando voltajes de 150mV y -150mV. Observamos que la mutante N264E genera un canal superconductor de protones mientras que la N264R genera un canal poco conductor. Con nuestros resultados en dinámica molecular predecimos que las mutaciones afectan las características de hidratación del canal y de la orientación de los dipolos de las aguas en la zona de constricción del canal. Por otro lado, se observó que en ovocitos inyectados con Hv1 poseían un mayor coeficiente de permeabilidad, sugiriendo que la proteína permite el movimiento de agua y que es visualizado en la dinámica molecular. Se identificó en la vía de permeación aminoácidos que generan puentes salinos justo en la zona de constricción del canal y que no solamente es el filtro de selectividad con la 2da y 3ra arginina las que interactúan. A su vez las mutantes generan cambios drásticos en el perfil electrostático del canal. Se propone un modelo de conducción de protones el cual posee dos elementos críticos: (1) la configuración de las

moléculas de agua en la zona de constricción del canal, además de una zona permanentemente hidratada que permite el paso de protones y, (2) el perfil electrostático de la proteína.

Agradecimientos

Al núcleo de nanobiofísica y a la universidad de Valparaíso por hacer posible dicha investigación.

Karla Santacruz-Gomez
*Departamento de Física,
Universidad de Sonora.*

Sergio Águila Puentes2
*Departamento de
Modelación de
Nanomateriales, Centro
de Nanociencias y
Nanotecnología*

Helena Chávez Duarte
*Maestría en
Nanociencias, Centro de
Nanociencias y
Nanotecnología.*

Combatiendo el cáncer de mama con terapia plasmónica fototérmica y quimioterapia in situ: Nanoestructuras de DOX-Au@SiO₂-NDs

El cáncer de mama, una patología que afecta a una gran cantidad de mujeres a nivel mundial [1], plantea un desafío médico inminente en términos de tratamiento. Una innovadora estrategia involucra la fusión de la terapia hipertérmica con la administración de quimioterapia in situ. En este sentido, se han reportado diferentes nanoestructuras biocompatibles, como la sílica, que incorporan nanopartículas metálicas [2] o magnéticas [3] como agentes de generación y liberación de calor; y doxorubicina (DOX) [4].

En este trabajo, se diseñó una nanoestructura que incorpora nanopartículas de oro, doxorubicina (DOX) y nanodiamantes dentro de una matriz de sílice (DOX-Au@SiO₂-NDs). Nuestros resultados muestran que se obtuvieron nanoestructuras de DOX-Au@SiO₂-NDs de unos 190 nm. Tras excitar el plasmón de superficie utilizando un láser de 785 nm, se observó un incremento de temperatura de ~ 19 oC in vitro. Al combinar la precisión de la TPFT con la efectividad de la quimioterapia in situ, confirmamos un aumento significativo del efecto citotóxico en células malignas de mama (MDA-MB-231) en comparación con el grupo de control. Adicionalmente, la evaluación de la capacidad de los nanodiamantes para reportar la temperatura intracelular, dentro de este sistema nanoestructurado, se encuentra en progreso.

Agradecimientos

Al financiamiento otorgado por CONAHCyT a través del proyecto de Ciencia Básica número A1-S-28227.

Referencias

- [1] Coughlin, S. S., Ekwueme, D. U. (2009), doi.org/10.1016/j.canep.2009.10.003
- [2] Yang, Y. et al. (2017), doi.org/10.1016/j.jcis.2017.08.050
- [3] Kumar, H. et al. (2023), doi.org/10.2174/1389201023666220428084920
- [4] Arcamone F. (2012), Doxorubicin: anticancer antibiotics. Elsevier.

Desarrollo de un implante bioimpreso con nanopartículas poliméricas para la entrega controlada de péptidos hormonales en corvina (*Cilus gilberti*)

Javier Muñoz Dávila
*Instituto de Ciencias
Químicas Aplicadas,
Universidad Autónoma
de Chile, San Miguel*

Paula A. Santanta
*Instituto de Ciencias
Químicas Aplicadas,
Universidad Autónoma
de Chile, San Miguel*

Manuel Ahumada
*Centro de
Nanotecnología Aplicada,
Universidad Mayor,
Huechuraba*

Grissel Trujillo de
Santiago,
*Centro de
Biotecnología-FEMSA,
Tecnológico de
Monterrey, Nuevo León,
México*

Mario Álvarez
*Departamento de
Bioingeniería,
Tecnológico de
Monterrey, Nuevo León,
México*

Felix Acosta
*Grupo de Investigación
en Acuicultura (GIA),
IU-ECOQUA,
Universidad de Las
Palmas de Gran Canaria,
Las Palmas, Islas
Canarias, España*

La acuicultura es una de las principales actividades económicas de Chile [1], y por esta razón se ha promovido el cultivo de nuevas especies de peces marinos, tales como corvina (*Cilus gilberti*). Sin embargo, su desarrollo en cautiverio afecta las respuestas fisiológicas del animal como consecuencia de la alteración de diversos procesos biológicos como el apetito [2]. Grelina es una hormona peptídica que actúa como factor orexigénico en teleosteos, pero su acción ha sido evidenciado solo en pocas especies. Hasta ahora, se ha demostrado su efecto en peces a través de inyecciones del péptido, pero debido a que su vida media es baja, se requiere más de una inyección para asegurar una correcta absorción [3]. Lo anterior, provoca una excesiva manipulación del pez que genera señales de estrés, enmascarando el efecto de la molécula. Por esta razón, este trabajo tuvo como objetivo desarrollar un implante hormonal de grelina utilizando técnicas de bioimpresión 3D con nanopartículas poliméricas. El polímero fue elaborado en base a alginato, mientras que las nanopartículas utilizadas para la conjugación con la hormona fueron preparadas en base a poliácido láctico-co-glicólico (PLGA)/ polivinilalcohol (PVA). La caracterización de las nanopartículas conjugadas con el péptido fue realizada por metodologías tales como espectroscopia de UV-Vis, Fluorescencia, Infrarrojo con transformada de Fourier y microscopias electrónicas, demostrando una alta eficiencia del proceso. Luego, las nanopartículas-péptido fueron incorporadas en implantes poliméricos utilizando la técnica de impresión caótica con alginato. Para facilitar el análisis de los implantes, el péptido de grelina de corvina fue acoplado al fluoróforo fluoresceína. Los análisis de microscopía de fluorescencia permitieron confirmar la correcta incorporación del péptido conjugado a nanopartículas en el implante. Nuestra investigación sienta las bases para generar nuevos prototipos de implantación hormonal en peces de interés acuícola.

Agradecimientos

La investigación fue financiada por los proyectos FONDECYT Regular 1230712 y ANID Vinculación internacional FOVI220076.

Referencias

- [1] Miranda, CD. et al. (2018), doi.org/10.3389/fmicb.2018.01284.
- [2] Álvarez, CA. et al. (2020) , doi.org/10.1016/j.aquaculture.2020.735316
- [3] Álvarez, CA. et al. (2023), doi.org/10.1016/j.aquaculture.2023.739468

Efficacy of antifouling additives in materials

Katherine Delgado
*Departamento de
Matemáticas y Ciencias
de la Ingeniería,
Universidad Bernardo
O'Higgins, Santiago,
Chile*

The search of materials that can avoid microorganism growth in different types of surfaces and environment is an attractive research field. Among these materials, nanoparticles (NPs) based on metals or oxides, have shown promising results in this subject. In order to use these properties, one promising approach involves the incorporation antifouling additives, such as copper NPs, into materials such as coatings or polymers [1]. These additives come in various micrometric and nanometric geometries. The performance of these materials with different concentrations of additives has been thoroughly studied for up to a year, with a focus on their ability to prevent the adhesion of microorganisms, to kills or stops their growth.

Examples on this subject have shown that the incorporation of these copper nanoparticles into polymeric matrix permit to applied them on different surfaces, showing excellent antimicrobial properties [2]. Moreover, these nanoparticles can be obtained on sustainable manner using different biomaterials such as leaves, or bacteria, allowing to obtain a narrow size distribution of the NPs [3]. Finally, some works have been done in the incorporation of antifouling additives, like copper nanoparticles or graphene-oxide, in polymeric matrices like LDPE, preventing the proliferation of biofouling organisms.

Thus, in this work it is presented the different antimicrobial additives that we have been develop in the last years, and their incorporation into different materials such as coating or polymer. Furthermore, some of these additives have been tested in marine environments to demonstrate their antifouling ability.

Acknowledgments

Katherine Delgado thanks Projects UBO/VVCMEI-20202, UBO/VVCMEII-04 and Beca Santander Jóvenes Profesores Investigadores 2019.

References

- [1] Cao S. et al. (2010), doi.org/10.1007/s11434-010-4158-4
- [2] Delgado K. et al. (2011), doi/10.1111/j.1472-765X.2011.03069.x
- [3] Tarafdar J. C. et al. (2013), doi.org/10.1155/2013/141274

Tópico T4: Nanotecnología para la conversión y almacenamiento de energía

Efecto magnetocalórico en una monocapa y bicapa de grafeno

María Esperanza
Benavides Vergara
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María y
Millennium Nucleus in
NanoBioPhysics (NNBP)*

Francisco Peña
Recabarren
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María y
Millennium Nucleus in
NanoBioPhysics (NNBP)*

Desde que el efecto magnetocalórico (MCE) fue observado por primera vez en 1881 [1], este ha sido foco constante de estudio a través de los años, sin embargo, últimamente este efecto ha llamado bastante la atención debido a las diversas aplicaciones en el campo de la refrigeración en las que puede ser usado. Por esta razón es que la investigación y el estudio del efecto magnetocalórico se ha centrado en encontrar al material o compuesto que brinde más eficiencia y que sea más amigable con el medio ambiente. Dentro de los diversos materiales que pueden presentar el efecto, el grafeno por su parte resulta ser uno con gran potencial para este propósito. Los diversos usos que se le da a este material se deben a sus excelentes características ópticas, térmicas y mecánicas donde destacan su alto grado de flexibilidad, resistencia y su alta conducción térmica y eléctrica [2]. Todo lo antes mencionado, sumado al hecho de que los métodos de su producción son amigables con el medio ambiente [3], lo hacen un candidato atractivo para el estudio del efecto magnetocalórico y su uso en la técnica de refrigeración magnética.

En este trabajo se ha estudiado la respuesta térmica para un sistema tipo grafeno monocapa y uno bicapa (con apilamiento del tipo AB), analítica y numéricamente, al aplicarle un campo magnético externo variable. Hemos utilizado para el cálculo de las energías de los sistemas estudiados una aproximación de baja energía empleando la ecuación de Dirac [4]. Por otra parte, las cantidades termodinámicas han sido derivadas en el ensemble canónico donde nos hemos centrado principalmente en la variación de la entropía normalizada al número de capas. Los resultados de esta investigación sugieren que, al realizar una comparación entre la monocapa y bicapa, para así determinar cuál de los dos casos tiene una mejor respuesta térmica, hemos encontrado que a baja temperatura la respuesta de la bicapa es mayor que la de la monocapa, mientras que a alta temperatura se observa que la monocapa responde de mejor forma térmicamente. Estos resultados abren el interés para analizar la influencia de esta respuesta térmica a mayor número de capas de grafeno en el sistema.

Agadecimientos

Los autores agradecen el apoyo financiero de Fondecyt, Iniciación en Investigación 2020 Grant No. 11200032 y “Millennium Nucleus in NanoBioPhysics” proyecto NNBP # NCN2021_021.

Referencias

- [1] Warburg, E. (1881), doi.org/10.1002/andp.18812490510
- [2] Tiwari, S. K. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.jsamd.2020.01.006
- [3] Paredes, J. I. et al. (2011), doi.org/10.1039/C0JM01717E
- [4] Min, H. et al. (2008), doi.org/10.1143/PTPS.176.227

Desarrollo de un ánodo de óxido de níquel-cobre con topografía fractalica para baterías de ion-litio

J. Tapia, T. Hoffmann, L. Troncoso, M. Flores, J. Lisoni

Universidad Austral de Chile

M. Flores, R. Espinoza

Universidad de Chile

C. Zúñiga, D.

Alburquenque, F.

Tasca

Universidad de Santiago de Chile

Las baterías de ion-litio (LiBs) son ampliamente utilizadas en aplicaciones portátiles y de almacenamiento de energía debido a su alta densidad de energía y larga vida útil [1]. Sin embargo, su capacidad y la estabilidad ciclable se ven limitadas por el uso de materiales anódicos de inserción convencionales tales como el grafito [2]. En este estudio se investigó un ánodo de conversión de óxido de níquel-cobre con topografía fractalica para mejorar el rendimiento de LiBs en comparación con películas delgadas [3].

Utilizando deposición electroquímica a densidad de corriente constante de $-1\text{A}/\text{cm}^2$, se formaron estructuras fractalicas de Ni-Cu sobre acero inoxidable (SS304). El SS304 se eligió por su compatibilidad con el montaje para mediciones electroquímicas en celdas tipo Swagelok. Se variaron tiempos (1-15 s), concentraciones molares (0.8 y 0.32 M) y relaciones entre precursores de Ni y Cu (Ni:Cu=4:1, 16:1). Luego, se aplicó un calentamiento térmico a $500\text{ }^\circ\text{C}$ durante 4 horas en aire para generar el óxido, i.e. NiCuOx (notación simplificada de estequiometría).

Las muestras se caracterizaron con difracción de rayos X, microscopía electrónica de barrido y análisis de energía dispersiva de rayos x, las que permitieron obtener las fases cristalinas, la composición química, la morfología superficial, y su distribución elemental. La dimensión fractalica (DF) se obtuvo por medio del análisis de imágenes FESEM usando la metodología de box-counting. Además, se realizaron ensayos de voltametría cíclica (CV) para evaluar los procesos de óxido-reducción en el compuesto de NiCuOx en una solución de LiPF₆, comúnmente usada como electrolito en LiBs.

El depósito está formado por estructuras tipo helecho, con DF ~ 2.7 , independiente de las condiciones de síntesis, lo cual indicaría reproducibilidad de la morfología del Ni-Cu obtenido. Los mismos valores de DF se mantienen para el material oxidado de NiCuOx. La distribución elemental de Ni, Cu y O fueron uniforme, con una relación Ni:Cu similar a la composición en la solución, i.e. $\sim 4:1$, y un contenido de O ~ 50 at%. El óxido reveló fases cristalinas de NiO y CuO tipo Fm-3m y C2/c, respectivamente.

Las curvas CV mostraron picos de procesos de óxido-reducción, identificados de la siguiente forma: -0.35 V , corresponde a la reducción del NiO a Ni. El segundo pico, localizado a -1.20 V , se relaciona con la formación de la interfaz sólido-electrolito o SEI. Los picos a 1.20 V y 1.49 V respectivamente, sugieren la disolución parcial de la capa SEI y la posterior oxidación de Ni a NiO [4].

Nuestros primeros resultados muestran que el proceso para la síntesis de NiCuOx aquí propuesto y con estructura fractalica presenta un comportamiento electroquímico adecuado

para ser utilizado en LiBs. Nuevos experimentos se están realizando para comparar la performance de este material con un sistema tipo película delgada.

Agradecimientos

JL y LT agradecen a Instituto Milenio en Amoníaco Verde como Vector Energético – MIGA (ICN2021_023) y los Fondecyt Regulares 1230945 (JL) y 1220630 (LT). Las imágenes de microscopía electrónica se obtuvieron en la Unidad de Microscopía Electrónica de la UACH (UME).

Referencias

- [1] A. Manthiram (2017), doi.org/10.1021/acscentsci.7b00288
- [2] P.U. Nzereogu et al. (2022), doi.org/10.1016/j.apsadv.2022.100233
- [3] G.T. Teixidor et al. (2009), doi.org/10.1016/j.electacta.2009.05.060
- [4] Y. Liu et al. (2022), doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.165693

Effect of alkyl side chains on BDT derivative donor molecules in OPV devices fabricated by vacuum thermal evaporation

Diego Pablo Vilches
Astudillo

*Departamento de
Química Inorgánica,
Facultad de Química y de
Farmacia, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile*

Felipe Alfonso Angel
Figueroa

*Departamento de
Química Inorgánica,
Facultad de Química y de
Farmacia, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile /
Centro de
Nanotecnología y
Materiales Avanzados,
CIEN-UC, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile /
Centro de Energía,
CE-UC, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile*

Solution processing methods have been widely used to deposit films for organic photovoltaic (OPV) devices at a laboratory scale [1]. Whether the materials are small-molecules or polymers, alkyl side chains (AlkSCs) are typically added to the active layer molecules to increase their solubility [2]. However, the effect of the AlkSCs on the molecular packing, besides its solubility, has not been extensively studied. Vacuum Thermal Evaporation (VTE) appears as a robust technique for deposition with high reproducibility [3], where the role of the AlkSCs on the solubility and molecular packing can be decoupled. A set of 4 small-molecule donors were synthesized to evaluate this effect, with benzo[1,2-b-4,5-b']dithiophene (BDT) as the core unit coupled with unsubstituted, linear, and branched substituted thiophene rings. In the free positions of the central benzene ring, thiophenes or branched-alkoxy groups were also coupled. Molecules were synthesized from commercial reactive through a Stille coupling reaction, purified by chromatography column. Molecular structure was confirmed through H-NMR.

Further characterizations were conducted to assess the properties of the molecules. Differential scanning calorimetry and thermogravimetric analysis showed that the molecules are stable ($T_{d95} < 350$ °C) with low melting points (varying between 39 and 110 °C). UV-Visible spectroscopy in solution, film, and cyclic voltammetry was used to determine the energy band gaps (E_g). The results indicate that AlkSCs do not affect the optical or electrochemical properties of the materials. The devices were fabricated by VTE on glass substrates pre-patterned with ITO, following the structure: ITOs|MoO_x (8 nm)|BDT:C60(40:60) (80 nm)|Bphen (8 nm)|LiQ (1 nm)|Al (100 nm). JV characteristics and external quantum efficiency were measured. The results showed that the device made with the BDT derivative with linear AlkSC has the lowest J_{sc} of the series by one order of magnitude, implying a poor active layer morphology, most likely due to the linear AlkSC of the donor molecule and its intermolecular interaction with the fullerene acceptor during the film deposition. The device with the BDT molecule without the AlkSC presents a higher J_{sc} than its counterparts, mainly attributed to the lack of side chains, allowing a better stacking between donor and acceptor in the active layer. Mobility measurements further confirm this tendency. These results demonstrate that the molecular packing of the donor and acceptor is crucial to the morphology of the resulting active layer. Subsequently, AlkSCs do not affect optical and electrochemical properties and worsen the performance of small-molecule-based OPV devices.

Acknowledgments

Proyectos FONDECYT 11181205, FONDEQUIP EQM120021, PAI 79170049.

References

- [1] Tang, H. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.matt.2020.09.001
- [2] Kong, M. et al. (2020), doi.org/10.1080/15421406.2020.1741824
- [3] Yagui, J. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.optmat.2020.110354

Estudio de la fuerza de adhesión de partículas de soiling con microscopía de fuerza atómica

Cristobal Ruiz
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Valeria del Campo
*Universidad Técnica
Federico Santa María /
Núcleo Milenio en
NanoBioFísica*

Tomás Corrales
*Universidad Técnica
Federico Santa María /
Núcleo Milenio en
NanoBioFísica*

La obtención de energía de forma más amigable con el medio ambiente en los últimos años ha llevado al desarrollo de nuevo conocimiento y nuevas tecnologías. Una de las tecnologías más prometedoras, y con alto interés, es la energía solar fotovoltaica.

La energía generada con paneles fotovoltaicos es de gran interés por la alta disponibilidad de radiación en áreas como planicies y desiertos. Esta tecnología lleva años siendo desarrollada y perfeccionada, pues las mejoras a los módulos fotovoltaicos pueden ser implementadas en todos los ámbitos; desde su instalación hasta sus componentes.

Los componentes son donde centraremos la investigación, en específico en la capa protectora transparente de vidrio. Esta capa se debe limpiar y cuidar constantemente en las instalaciones, pues al ensuciarse o dañarse generan bajas importantes en la eficiencia del módulo fotovoltaico [1]. Es el ensuciamiento de los módulos por material particulado el que puede generar bajas en la eficiencia y pérdidas de energía, este se conoce como soiling [2].

En este trabajo mediremos la fuerza de adhesión de partículas de soiling sobre vidrio con microscopía de fuerza atómica (AFM) y luego compararemos los resultados con investigaciones previas [3], [4]. Para medir la fuerza de interacción primero fabricamos una sonda coloidal con un cantilever sin punta y una partícula del soiling recolectado de paneles solares instalados en el Desierto de Atacama. El método para fabricar esta sonda [5] consiste en utilizar un micromanipulador para acercar la viga del cantilever sin punta a una muestra con un grano de arena previamente escogido con un microscopio óptico. Luego fijamos este grano a la punta de la viga para obtener la sonda que con la que mediremos la fuerza de adhesión entre el grano de arena y diversas superficies utilizando AFM.

Con la sonda fabricada medimos la fuerza entre el grano de arena y una oblea de silicio, un vidrio recién sacado de la caja (FOB) y un vidrio limpiado con isopropanol. Observamos que la fuerza de adhesión entre la partícula y el silicio es $48,9 \pm 1,4$ nN, mientras que entre la partícula y el vidrio limpio es $117,6 \pm 12,5$ nN. Por último, para el vidrio FOB tenemos una distribución de fuerzas muy grande con una media entre 130 y 160 nN.

Comparando con las investigaciones previas [4], obtuvimos valores parecidos a las encontradas con nuestro experimento, lo que valida nuestro método de creación de sonda coloidal y la medición de fuerza de adhesión.

Por otro lado, el caso del vidrio FOB, la distribución de fuerzas encontrada puede deberse a la presencia de un desecante que se utiliza para que los vidrios no se peguen entre sí. Este desecante podría generar mayor adhesión de partículas de arena, lo que provocaría este cambio en la fuerza si el sustrato no se encuentra limpio, como es el caso del vidrio FOB en

comparación con el vidrio limpiado.

Agradecimientos

El autor de este trabajo agradece el apoyo financiero de los siguientes proyectos: “Graphene as transparent current spreading electrode in silicon heterojunction solar cells” proyecto ANID-ECOS210038 #C21E08; “Millennium Nucleus in NanoBioPhysics” proyecto ANID - Millennium Science Initiative Program NNBP # NCN2021_021, “Glass nanopatterning for self cleaning photovoltaic modules” proyecto Fondecyt # 1210490; “Óxidos conductores nanoestructurados” proyecto PI_LIR_2020_16, “Programa de Investigación y Desarrollo de Tecnologías Fotovoltaicas de alta Radiación y Climas Desérticos” proyecto 17PTECES-75830, CORFO, “Solar Energy Research Center” proyecto FONDAP # 15110019 y Fondecyt regular #1211901 “Multiscale mechanical properties of hygroscopic nanofibers”.

Referencias

- [1] D. Olivares et al. (2021), doi.org/10.1016/j.solmat.2021.111109.
- [2] K. K. Ilse et al. (2018), doi.org/10.1016/j.rser.2018.09.015.
- [3] H. F. Varga et al. (2021), doi.org/10.1021/acs.est.0c06196.
- [4] H. F. Varga et al. (2022), doi.org/10.1021/acs.est.2c00164.
- [5] M. Zakerin (2013). Dissertation: “The effect of elastic modulus and equilibrium vapor adsorption on capillary forces Dissertation”

José Fernando Ibarra
Ibarra

*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Galo Ramírez Jofré
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Roxana Arce
*Universidad Nacional
Andrés Bello*

Electrodo de nanotubos de carbono/ferrita de cobalto aglutinado con el líquido iónico N-octilpiridinio hexafluorofosfato. Actividad hacia la reacción de evolución de hidrógeno a pH neutro

La producción de hidrógeno mediante la electrolisis del agua es una reacción electroquímica ampliamente estudiada en la actualidad. En Chile, esta reacción desempeña un papel fundamental en la transición hacia combustibles que no contribuyan al efecto invernadero. El costo de un electrolizador está influenciado en gran medida por el tipo de catalizador utilizado. Por lo tanto, el desarrollo de catalizadores de bajo costo y alta eficiencia en la producción de hidrógeno impulsa el avance de esta industria. Se han investigado diversos materiales, como los óxidos de metales de transición, entre ellos el óxido de hierro, el óxido de cobalto y la ferrita de cobalto, debido a su bajo costo y abundancia. No obstante, su baja conductividad requiere su combinación con materiales conductores que faciliten la transferencia electrónica [1]. Por otro lado, la síntesis de estos materiales en forma nanométrica potencia sus propiedades, mejorando su actividad en reacciones de conversión de energía [2]. Basándose en esta premisa, se propuso la fabricación de un electrodo de pasta de carbono compuesto por nanotubos de carbono y ferrita de cobalto, utilizando el líquido iónico hexafluorofosfato de N-Octilpiridinio como aglutinante (MWCNT/LI/CoFeOx). Se evaluó la actividad de este electrodo en la producción de hidrógeno a pH neutro mediante voltametría cíclica, y se obtuvo un potencial de pie de onda de -220 mV vs RHE, un resultado interesante en comparación con sistemas similares [3]. Además, se comparó este sistema con electrodos compuestos por óxido de hierro y óxido de cobalto (MWCNT/LI/FeOx, MWCNT/LI/CoOx) para corroborar el efecto sinérgico entre el hierro y el cobalto. Se observó una mejora en la actividad con la presencia de ambos metales en la ferrita de cobalto, lo cual también se evidenció mediante espectroscopía de impedancia electroquímica, donde el sistema MWCNT/LI/CoFeOx presentó una menor resistencia a la transferencia de carga. Se realizaron diversas caracterizaciones morfológicas de los sistemas y de los nanocompuestos sintetizados mediante espectroscopía de difracción de rayos X, espectroscopía Raman y microscopía electrónica (FE-SEM), lo que confirmó la estructura nanométrica de los compuestos. Finalmente, se llevaron a cabo diversas caracterizaciones electroquímicas, como el estudio de la estabilidad mediante cronoamperometría, la determinación del mecanismo de reacción a partir de las pendientes de Tafel y el cálculo del área electroactiva del electrodo estudiado. En conclusión, la inclusión de la ferrita de cobalto en la pasta carbonosa aglutinada con líquido iónico aumenta la

conductividad y mejora la actividad del electrodo hacia la reacción de producción de hidrógeno. Esto genera un electrodo estable y de bajo costo para la producción de hidrógeno.

Agradecimientos

Agradecimientos al FONDECYT regular 12201 y al Centro de Investigación en Nanotecnología y Materiales Avanzados (CIEN-UC)07 del Dr Galo Ramírez.

Referencias

- [1] Jiang, J. et al. (2019) , doi.org/10.1016/j.jpowsour.2019.04.022
- [2] Maduraiveeran, G. et al. (2019), doi.org/10.1016/j.pmatsci.2019.100574
- [3] Kashyap, V. et al. (2022) , doi.org/10.1039/D2NR04170G

Estudio de XRD y EDS en películas delgadas de LNMO

Benjamín Ignacio Silva
Rojas

*Laboratorio de
Superficies y
Nanomateriales, Facultad
de Ciencias Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

Francisca Luco

*Laboratorio de
Superficies y
Nanomateriales, Facultad
de Ciencias Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile*

Marcos Flores

*Departamento de Física,
Facultad de Ciencias
Físicas y Matemáticas de
la Universidad de Chile*

El progreso de la tecnología y la masificación de los dispositivos electrónicos ha creado la necesidad de maximizar la eficiencia y disminuir el daño medioambiental de la producción de baterías. El óxido de litio-níquel-manganeso (LNMO) es considerada una de las mejores alternativas como material catódico en baterías ion litio (LIBs). Esto se debe a que el LNMO tiene un costo de producción y un impacto medio ambiental mucho menor que aquellos materiales catódicos actuales, como lo es el óxido de litio cobalto (LiCoO_2) y sus derivados, manteniendo una capacidad de almacenamiento similar. En esta investigación, estudiamos el efecto de la temperatura y el solvente en la síntesis de LNMO mediante espectroscopia por dispersión de energía (EDS) y difracción de rayos X (XRD).

Se formaron 2 soluciones, con los distintos solventes que estudiamos, etanol y agua destilada. Utilizando acetatos de litio, de níquel y manganeso se formaron soluciones cuya razón molar Li:Ni:Mn fuese de 2:1:3, por la estequiometría de la molécula que deseamos formar. Durante 24 horas, las soluciones fueron agitadas y expuestas a una temperatura de 50 °C para la solución con etanol y de 70 °C para la solución con agua destilada. Posteriormente, fueron depositadas sobre un sustrato plano de acero inoxidable, mediante spin coating y deposición directa con micropipeta. A continuación, se sometieron las muestras a un proceso de recocimiento en un horno CVD con un gradiente de oxígeno constante, durante 1 hora.

Para estudiar el efecto de la temperatura, se realizó el proceso a 5 temperaturas: 500 °C, 600 °C, 700 °C, 800 °C y 900 °C. Esto nos permite observar la evolución de la formación de LNMO entre 500 °C y 900 °C.

Con los resultados de la difracción de rayos X cotejamos con bases de datos que registran planos cristalinos característicos de la molécula, con lo que podemos afirmar la presencia u ausencia de LNMO en la muestra. Los resultados de espectroscopía permiten saber la concentración de los elementos presentes en la muestra y observando las razones estequiométricas entre níquel y manganeso podemos saber el tipo de LNMO que se sintetizó. Los datos de XRD también nos entregan más características sobre la calidad de la muestra, como lo es la evolución del grado de cristalinidad, el tamaño de cristal y el estrés elástico de las muestras. De esta forma, podemos concluir el efecto del solvente y la temperatura de recocimiento sobre la síntesis de LNMO en etanol y agua destilada.

Agradecimientos

Para el proyecto Fondecyt regular N° 1191799. También, para el laboratorio de Superficies y Nanotecnología y el laboratorio de Nanomateriales y Polímeros de la Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas.

Referencias

- [1] B. Slautin et al. (2018), doi.org/10.3390/batteries4020021
- [2] L. Tian et al. (2009), doi.org/10.1016/j.jpowsour.2009.03.002.
- [3] W. Tang et al. (2011), doi.org/10.1016/j.elecom.2010.12.015
- [4] Stephanie L. Spence (2022), doi.org/10.1021/acseenergylett.1c02759
- [5] A. Pandey et al (2021), doi.org/10.1007/s10854-020-04998-w

Geles como electrolitos para supercapacitores de estado sólido

Fernanda Jiménez
Maldonado¹

Leonardo Vivas^{1,2}

Dinesh Pratap Singh^{1,2}

¹Departamento de Física,
Facultad de Ciencias,
Universidad de Santiago
de Chile (USACH), Av.
Victor Jara 3493,
Santiago, Estación
Central 9170124, Chile.
ANID – ²Instituto Milenio
de Investigación en
Óptica, Alto Nahuelbuta
2510, Casa 4, San Pedro
de la Paz, Concepción
4130691, Chile

La creciente demanda de nuevos y mejores dispositivos electrónicos ha impulsado el desarrollo tecnológico de nuevos y más eficientes dispositivos de almacenamiento de energía que hacen de soporte vital a estos aparatos, además se busca que sean seguros de usar y amigables con el medio ambiente. Un dispositivo de almacenamiento que cumple estas especificaciones es el supercapacitor, es un dispositivo que permite almacenar energía comparable a la de una batería convencional, además de que puede cargarse y descargarse más rápido y por muchos más ciclos de carga y descarga que las baterías que usamos hoy en día. En este trabajo mostramos el ensamblado de un supercondensador de estado sólido [1-2] formado por un gel electrolítico biodegradable hecho a base de agar-agar y por electrodos basado en óxido de grafeno reducido decorado con nanopartículas de oro (rGO/Au). El gel electrolítico se sintetizó usando un método rápido por microondas y se formó a partir de una solución de KOH y KI que gelifica con la incorporación de agar-agar. De la caracterización electroquímica [3] del supercapacitor se obtuvieron curvas de voltametría cíclica de las que se calculan valores de capacitancia específica de 17 Fg^{-1} a una velocidad de barrido de 5 mVs^{-1} . La capacitancia específica del dispositivo mejora al sustituir el gel electrolítico por uno sintetizado a partir de una solución de KOH, KI y oxígeno de grafeno, del que se obtiene un valor de 20 Fg^{-1} . Además, se observa que la eficiencia electroquímica de los dispositivos se mantiene por 20 mil ciclos de carga y descarga y la integridad física del gel no muestra cambios significativos durante estos ciclos. Son resultados prometedores para el posible uso de estos materiales como dispositivos de almacenamiento de energía.

Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por los proyectos ANID, FONDECYT Regular 2023, N°1231714 y Millennium Science Initiative Program-ICN17_012.

Referencias

- [1] Xing Hu et al 2018. doi.org/10.1149/2.0481807jes
- [2] B. Jinisha et al 2019. doi.org/10.1007/s10008-019-04428-w
- [3] S. Zhang et al 2014. doi.org/10.1002/aenm.201401401

Geles como electrolitos para supercapacitores de estado sólido

Síntesis de rGOAg para aplicaciones en supercapacitores

Belén Orellana Contreras

*Physics Department,
Faculty of Science,
University of Santiago of
Chile (USACH), Santiago,
Chile ANID / Millennium
Science Initiative
Program, Millennium
Institute for Research in
Optics, San Pedro de la
Paz, Concepción, Chile*

Dinesh Pratap Singh

*Physics Department,
Faculty of Science,
University of Santiago of
Chile (USACH), Santiago,
Chile ANID / Millennium
Science Initiative
Program, Millennium
Institute for Research in
Optics, San Pedro de la
Paz, Concepción, Chile*

Leonardo Vivas

*Physics Department,
Faculty of Science,
University of Santiago of
Chile (USACH), Santiago,
Chile ANID / Millennium
Science Initiative
Program, Millennium
Institute for Research in
Optics, San Pedro de la
Paz, Concepción, Chile*

El grafeno ha surgido como un nanomaterial dimensional de gran interés en los últimos años debido a que ha mostrado características sobresalientes como su alta conductividad eléctrica y térmica, excepcional resistencia mecánica y gran área superficial que ha llevado a que se estudie con posibles aplicaciones en campos como la electrónica, la conversión y almacenamiento de energía y en la nanotecnología en general.

En este estudio se muestra la síntesis de óxido de grafeno reducido (rGO) con nanocompositos de nitrato de plata a diferentes molaridades (1 mol/L, 0.1 mol/L, 0.01 mol/L) como posible material para ser usado en supercondensadores. Primero se obtuvo óxido de grafeno mediante el método de Hummers mejorado, luego se hace la reducción de este añadiendo ácido ascórbico. Se llevaron a cabo varias pruebas para caracterizar los materiales obtenidos: microscopía electrónica barrido, espectroscopía UV-visible y espectroscopía Raman.

Las micrografías obtenidas mediante SEM muestran capas de rGO y sobre estas nanopartículas de plata distribuidas uniformemente. Las pruebas de espectroscopía Raman, mostraron desplazamientos en los picos característicos del rGO debido a la interacción con las nanopartículas de plata. Esto indica que las nanopartículas de plata presentaron una buena adhesión a las partículas de rGO.

También se fabricaron electrodos para realizar pruebas electroquímicas en una configuración de tres electrodos y estudiar la posibilidad del uso de estos materiales en la fabricación de supercapacitores. De la caracterización electroquímica se obtuvieron resultados de voltametría cíclica y carga/descarga, en un medio alcalino (KOH) a 2 mol/L, con una ventana de potencial de -1 a 0 V, con las cuales se calculó la capacitancia específica, densidad de energía y potencial. De estos resultados pudimos concluir que los valores de capacitancia específica muestra un significativo aumento en nuestros materiales al compararlos con los valores de capacitancia específica del rGO sintetizado por nosotros.

Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por los proyectos ANID, FONDECYT Regular 2023, N°1231714 y Millennium Science Initiative Program-ICN17_012.

Referencias

- [1] H. C. Youn (2015), doi.org/10.1002/cssc.201500122
- [2] Leonardo Vivas and Dinesh Pratap Singh (2022), doi.org/10.3389/fenrg.2021.794604
- [3] Songfeng Pei and Hui-Ming Cheng (2012), doi.org/10.1016/j.carbon.2011.11.010

T412: Nanotecnología para la conversión y almacenamiento de energía

Leonardo Vivas
*Departamento de Física,
Facultad de Ciencias,
Universidad de Santiago
de Chile (USACH),
Estación Central,
Santiago, Chile.*

D. Pacheco-Catalán
*Centro de Investigación
Científica de Yucatán,
Carretera Sierra Papacal
– Chuburná Puerto,
Mérida, Yucatán, Mexico*

Dinesh Pratap Singh
*Departamento de Física,
Facultad de Ciencias,
Universidad de Santiago
de Chile (USACH),
Estación Central,
Santiago, Chile*

Síntesis rápida de nanopartículas de CdMoO_4 y CdWO_4 para ser usadas junto a rGO en supercondensadores de alta eficiencia

Al usar rGO dopado con nanomateriales, como de óxidos metálicos, se logra un significativo aumento en la capacidad de almacenamiento de energía en supercapacitores simétricos [1]. En este estudio mostramos al óxido de grafeno reducido (rGO) dopado con CdMoO_4 y CdWO_4 y utilizado como material activo en el ensamblaje de dispositivos supercapacitores simétricos hace que aumente la capacitancia específica al compararlos con dispositivos hechos con electrodos de solo rGO. El óxido de grafeno GO se sintetizó mediante el método de Hummer modificado [2] y los resultados de espectroscopia Raman dan muestra de una efectiva reducción mediante la incorporación de Hidrazina al GO para obtener rGO. Las nanopartículas de CdMoO_4 y CdWO_4 se sintetizaron mediante un método rápido y de bajo costo por microondas [3,4], mediante difracción de rayos x se observa que las nanopartículas muestran una fase cristalina bien definida y el estudio morfológico realizado por SEM muestra estructuras porosas [5,6]. Se ha preparado una mezcla simple de rGO/ CdMoO_4 y rGO/ CdWO_4 para fabricar electrodos y hacer un estudio electroquímico en las configuraciones de dos y tres electrodos, con el fin de estudiar y comparar sus prestaciones electroquímicas con resultados obtenidos en electrodos de rGO. En general, al comparar la capacitancia específica (C_p) se observa un aumento de esta en las mezclas de rGO/ CdMoO_4 y rGO/ CdWO_4 cuando se comparan con la C_p encontrada para rGO. De ambas mezclas, es de destacar que la mezcla de CdMoO_4 /rGO muestra una C_p mayor a 750 Fg^{-1} en medidas realizadas a 5 mVs^{-1} , que al compararlas con los valores obtenidos para rGO ($C_p = 225 \text{ Fg}^{-1}$) en medidas realizadas a la misma velocidad, observamos que la presencia de nanopartículas de CdMo_4 entre las capas de rGO produce un considerable aumento de la C_p . Además, al estudiar el rendimiento, observamos que la eficiencia se mantiene durante al menos 5000 ciclos de carga/descarga. Esto indica el gran potencial de este material para ser utilizado como dispositivo de almacenamiento de energía.

Agradecimientos

Este trabajo es financiado por el proyecto ANID- Fondecyt Postdoctorado 3210225.

Referencias

- [1] Vivas, L. et al. (2022), doi.org/10.3389/FENRG.2021.794604/BIBTEX.
- [2] Marcano D. C. et al. (2010), doi.org/10.1021/nn1006368
- [3] Phuruangrat, A. et al. (2011), doi.org/10.1016/j.jpccs.2010.12.003
- [4] Anitha, T. et al. (2019), doi.org/10.1039/c9dt01931f
- [5] Liu H. et al. (2010), doi.org/10.1007/s11581-009-0345-1

T413: Nanotecnología para la conversión y almacenamiento de energía

Electrodos de pastas nanocarbonosas, líquido iónico y nanopartículas de óxidos de metales de transición depositados sobre carbón vítreo. Actividad hacia la electrooxidación de hidracina.

Valentina Paz Cavieres
Ríos

*Facultad de Química y de
Farmacia, Departamento
de Química Inorgánica,
Pontificia Universidad
Católica de Chile, Macul,
Santiago, Chile*

Jose Ibarra Ibarra

*Facultad de Química y de
Farmacia, Departamento
de Química Inorgánica,
Pontificia Universidad
Católica de Chile, Macul,
Santiago, Chile*

Galo Ramírez Jofré

*Facultad de Química y de
Farmacia, Departamento
de Química Inorgánica,
Pontificia Universidad
Católica de Chile, Macul,
Santiago, Chile*

Roxana Arce

*Facultad de Ciencias
Exactas, Departamento
de Ciencias Químicas,
Universidad Andrés Bello,
Santiago, Chile*

La hidracina (N_2H_4) es un compuesto de carácter básico, utilizado ampliamente en industrias farmacéuticas y químicas, así como también en industrias agrícolas. Sin embargo, es un contaminante ambiental, dado que es extremadamente tóxico para humanos, plantas y animales. Por lo tanto, la detección selectiva y sensible de N_2H_4 abre un campo muy interesante [1].

En este contexto, la electrocatálisis cumple un rol fundamental, dado que busca la implementación de nuevos electrocatalizadores capaces de reducir el sobrepotencial de oxidación de este compuesto, donde se espera que la reacción ocurra vía 4 electrones, generando N_2 como producto final.

Los electrodos de pasta de carbono (CPE) son un tipo de electrocatalizador, compuestos de un polvo de carbono y un aglutinante. Los nanotubos de carbono (CNTs) son buenos candidatos para la fabricación de CPE, puesto que presentan gran área superficial, alta conductividad eléctrica y buena estabilidad química. Dentro de los aglutinantes, se puede implementar el uso de líquidos iónicos (IL), como el OPyPF6, puesto que mejoran la transferencia electrónica dentro de la pasta carbonosa, debido a su carácter conductor. Los CPE presentan grandes ventajas, sin embargo, exhiben baja actividad para algunas detecciones electroquímica.

Por lo mismo, las nanopartículas de óxidos de metales de transición (MONP), como el óxido de cobalto Co_3O_4 , surgen como una solución a esta problemática, dada su construcción cristalina, evitan la aglomeración de partículas en la superficie del CPE [2].

En este trabajo se generaron suspensiones utilizando CNTs de pared múltiple (MWCTN), OPyPF6 y Co_3O_4 . Se midió la actividad de estos sistemas frente a la oxidación de hidracina. Las medidas voltamétricas se realizaron en buffer Britton- Robinson 0,1 M (pH 9), entre -0,2 y 1,2 V con una concentración de N_2H_4 de 5 mM, a 100 mV/s. El sistema MWCTN/IL/MONP presentó diferencias en la actividad al compararlas con el electrodo de carbón vítreo, demostrando la influencia que tiene el uso de IL y MONP en la actividad hacia hidracina.

Agradecimientos

Proyecto Fondecyt 1220107, Millenium Institute on Green Ammonia as Energy Vector MIGA, ANID/Millennium Science Initiative Program/ICN2021_023.

Referencias

[1] S. Nehru et al. (2019), doi.org/10.1166/jnn.2020.17379

[2] M. Sun et al. (2015), doi.org/10.1039/c4nr05838k.S

T414: Nanotecnología para la conversión y almacenamiento de energía

Síntesis de nanopartículas de LiMn_2O_4 utilizando nanocelulosa como agente reductor

Rodrigo Del Río Quero
*Facultad de Química y de
Farmacia, Pontificia
Universidad Católica de
Chile*

Macarena Kroff
*Facultad de Química y de
Farmacia, Pontificia
Universidad Católica de
Chile*

Francisco Fuentes
*Facultad de Química y de
Farmacia, Pontificia
Universidad Católica de
Chile*

María José Rubio
*Facultad de Química y de
Farmacia, Pontificia
Universidad Católica de
Chile*

Mauricio Isaacs
*Facultad de Química y de
Farmacia, Pontificia
Universidad Católica de
Chile*

Las necesidades de almacenamiento de energía y a su vez la búsqueda de procesos que sean más amigables con el medio ambiente ha llevado a la búsqueda de rutas sintéticas que utilicen materiales sustentables para la obtención de materiales activos en dispositivos de almacenamiento de energía. En este sentido en nuestro laboratorio se ha desarrollado una ruta sintética para LiFePO_4 utilizando el poder reductor de los grupos funcionales de nanocelulosa [1]. Esto ha llevado a desarrollar una ruta hidrotermal asistida por microondas para la obtención de LiMn_2O_4 . En esta ruta, KMnO_4 , LiOH y nanocelulosa se hace reaccionar en un vial de microondas por 30 min, para luego ser sometidas a un tratamiento térmico a $450\text{ }^\circ\text{C}$ por 2 horas a fin de carbonizar el exceso de nanocelulosa. Luego de la síntesis el material fue caracterizado, obteniéndose nanopartículas de un tamaño promedio de 40-70 nm. Estas nanopartículas fueron caracterizadas por difracción de rayos X, espectroscopía Raman, Microscopía FESEM.

El material obtenido fue utilizado para preparar películas sobre una lámina de aluminio utilizando PDVF como aglutinante y un 10 % de carbón. Estos electrodos se montaron en una celda de tipo botón donde fue posible registrar su voltamperograma cíclico, espectro de impedancia electroquímica y sus curvas de carga descarga. El material así obtenido presentó una capacidad del orden de 60 mA h g^{-1} . Este bajo valor comparado con el valor teórico, ha llevado a evaluar la etapa de tratamiento térmico a fin de disminuir el contenido de carbono proveniente de la nanocelulosa y así aumentar su capacidad.

Acknowledgments

Los autores agradecen el financiamiento mediante el proyecto FONDECYT 1191359, Instituto Milenio en Amoníaco Verde como vector energético ICN2021-023 y M.K. agradece su beca doctoral ANID 21160394.

References

[1] Kroff M. et al. (2023), doi.org/10.3390/polym15122628

Electrosíntesis de poliindol nanoestructurado adornado con nanorod de MnO₂ y evaluación de sus propiedades como supercondensador

Ramírez, A.M.R.

Departamento de Ciencias Químicas y Recursos Naturales, Facultad de Ingeniería y Ciencias, Universidad de La Frontera, Av. Francisco Salazar, 01145 Temuco, Chile

Lorca-Ponce, J.

Centro de Nanotecnología Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad Mayor, Camino la Pirámide 5750, 8580745-Santiago, Chile

Vergara, A.

Centro de Nanotecnología Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad Mayor, Camino la Pirámide 5750, 8580745-Santiago, Chile

Camarada, M.B.

Institute of Inorganic and Analytical Chemistry, University of Freiburg, Albertstrasse 21, 79104 Freiburg, Germany

Jonathan Cisterna

Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Católica del Norte, Sede Casa Central, Av. Angamos 0610, Antofagasta, Chile

El óxido de manganeso (MnO₂) ha atraído recientemente la atención debido a que se han estudiado sus interesantes propiedades pseudocapacitivas, alcanzando una elevada capacitancia específica para sistemas de tres electrodos [1]. Sin embargo, esto no garantizaría una conductividad óptima, ya que los electrodos formados por MnO₂ tienen una baja conductividad, de 10⁻⁵ a 10⁻⁶ Scm⁻¹, problema que se traduce en una baja eficiencia. Sin embargo, el problema de la conductividad aún está lejos de resolverse. Por lo tanto, la posibilidad de que las nanoestructuras de MnO₂ se apoyen en polímeros conductores (CP) como sustrato puede ser una solución prometedora para la conductividad del electrodo de MnO₂. Los CP presentan una alta conductividad en estado dopado y consiguen una mayor capacitancia específica utilizando una morfología nanoestructurada. Así, se han reportado poliindoles nanoestructurados obtenidos por voltamperometría cíclica y con una disposición perpendicular, que presentan una libre difusión de los iones dopantes [2-3]. En consecuencia, resulta interesante estudiar el efecto sinérgico generado por la obtención de nanoestructuras de PIn adornadas con nanoestructuras de MnO₂, evaluando sus propiedades capacitivas.

De esta manera, en una primera etapa son obtenidos nanorod de MnO₂ por vía química, los cuales son caracterizados por XPS, XRD y Raman, confirmando su obtención. Mientras que, a través de micrografía TEM y SEM se describen las dimensiones de los nanorods de MnO₂ obtenidos mediante reacción hidrotermal, y su distribución sobre el polímero conductor posterior a la incorporación durante la electropolimerización de 6-indole carboxi-ácido (6-ICA) sobre vidrio conductor (ITO), respectivamente. A través de esta última microscopía se observa que el electrodo modificado ITO|6-PICA|MnO₂ obtenido en condiciones óptimas presenta una interesante homogeneidad en la superficie. Posteriormente, los electrodos modificados se caracterizaron electroquímicamente mediante voltamperometría cíclica y perturbación galvanostática, utilizando una disolución de 0.5 mol L⁻¹ de H₂SO₄. A partir de ello, se observa inicialmente que la velocidad de barrido utilizada durante la electropolimerización está directamente relacionada con la incorporación de los nanorods de MnO₂, consiguiéndose un aumento de la capacitancia del 42% en condiciones óptimas respecto al electrodo modificado sin MnO₂. Por otro lado, el estudio a corriente constante, muestra que en concentraciones óptimas de nanorods de MnO₂ suspendidos en disolución, que varió entre el 0,05% y el 1%, es posible obtener un aumento de la capacitancia del 44% respecto al electrodo modificado en ausencia de MnO₂.

Finalmente, estos resultados muestran una importante tendencia a la mejora de las propiedades capacitivas a través de un efecto sinérgico, siendo un posible candidato para dispositivos de almacenamiento de energía.

Agradecimientos

AMRR thanks ANID – FONDECYT 1230426.

Referencias

- [1] Fic K. et al. (2018), doi.org/10.1016/j.mattod.2018.03.005
- [2] Ramirez A.M.R. (2019), doi.org/10.1016/j.elecom.2019.04.007
- [3] Ma X. et al. (2015), doi.org/10.1016/j.electacta.2015.07.148

T416: Nanotecnología para la conversión y almacenamiento de energía

Síntesis de electrodos de FeMo para reducción de nitrógeno a amoníaco

Daniel Correa Encalada
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Rodrigo del Río Quero
*Pontificia Universidad
Católica de Chile (PUC)
Facultad de Química y
Farmacia Millennium
Institute on Green
Ammonia as Energy
(MIGA)*

Mauricio Isaacs
*Pontificia Universidad
Católica de Chile (PUC)
Facultad de Química y
Farmacia Millennium
Institute on Green
Ammonia as Energy
(MIGA)*

Enrique A. Dalchiele
*Facultad de Ingeniería
Facultad de Física
Universidad de la
República*

Zachary Schultz
*Department of Chemistry
and Biochemistry, The
Ohio State University*

Considerando que, producir amoníaco (NH_3) a través del proceso Haber-Bosch tradicional es altamente contaminante, llevar a cabo la reacción de reducción de nitrógeno o NRR por su nombre en inglés, para obtener esta materia prima mediante electrocatálisis es una alternativa prometedora debido a que presenta una reducción significativa en las emisiones de gases de efecto invernadero [1, 2]. En este contexto, el desarrollo de nuevos electrocatalizadores que cumplan con este requisito es fundamental, por un lado, debido a la importancia en la reducción de emisiones de dióxido de carbono, CO_2 , y, por otro lado, por la relevancia que ha adquirido el amoníaco como vector energético debido a la facilidad que este presenta como medio de transporte de hidrógeno [3].

De esta manera, en este trabajo se muestra la fabricación de electrodos de hierro y molibdeno (FeMo) mediante electrólisis a potencial constante y su posterior aplicación en NRR. El material sintetizado presenta entre su composición diferentes óxidos, tales como trióxido de molibdeno, hematita, y la formación de molibdato de hierro según las caracterizaciones realizadas por espectroscopía Raman, DRX y XPS. Además, presenta una morfología plana y homogénea, teniendo una distribución atómica entre hierro y molibdeno de 1:1, según la información proporcionada por la caracterización con FESEM y un análisis EDS respectivamente.

Estos electrodos fueron utilizados para la NRR en una celda de un compartimiento utilizando un electrolito neutro acuoso. Como electrodo de referencia se utilizó un electrodo de Ag/AgCl y un alambre de platino como contraelectrodo; la electrólisis se llevó a cabo a diferentes potenciales, partiendo desde el potencial de pie de onda de la curva de polarización, a -0.8 V hasta -1.2 V, potencial en el cual se logró observar el mayor valor de densidad de corriente al comparar la curva en blanco medida con argón con la curva medida con nitrógeno. Estas medidas permitieron determinar que para el electrodo FeMo una electrólisis de 3 horas presenta un mejor desempeño a un potencial de -0.9 V, presentando una tasa de rendimiento geométrica ($r_{\text{NH}_4^+}$) para el amoníaco de $4.73 \mu\text{g h}^{-1} \text{cm}^{-2}$ con una eficiencia faradaica (EF%) de 8.22%. Es importante destacar que la detección y cuantificación del amoníaco producido se realizó mediante la reacción de azul de indofenol, producto cuya longitud de onda de absorción máxima se encuentra a 650 nm.

Considerando estos antecedentes, se está trabajando en la obtención de nanohilos de FeMo para evaluar su comportamiento, utilizando la misma metodología de síntesis. Para esto, se está trabajando en depósitos sobre plantillas porosas de policarbonato, reforzadas con una capa de oro obtenida por CVD y una capa de cobre depositado por electrólisis.

Agradecimientos

Beca de Doctorado Nacional n°21211041 Proyecto Fondecyt 1191359. Instituto Milenio sobre amoníaco verde como vector de energía MIGA, ANID/Programa de Iniciativa Científica del Milenio/ICN2021_023.

Referencias

- [1] Wang D. et al. (2018), doi.org/10.1002/cssc.201801632
- [2] Wang Z. et al. (2019), doi.org/10.1021/acssuschemeng.9b01991
- [3] Yang X. et al. (2022), doi.org/10.1002/cssc.202102648

Surface functionalization of nanostructured vanadium pentoxide for lithium-ion batteries applications

Juan Fernández
Universidad de Chile

Fabian Dietrich
*Universidad de la
Frontera*

Eduardo Cisternas
*Universidad de la
Frontera*

Samuel Hevia
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Marcos Flores
Universidad de Chile

Nowadays, research aimed at improving the performance of lithium batteries (LiB) have been increasing, since the demand for energy storage is expected to grow 300% by 2030 [1]. Particularly, research is focused on enhance the charge/discharge capacity, efficiency, and lifespan, where the cathode of batteries is of great relevance, since the battery performance critically depends on it.

The most commonly used cathodes for LiBs are $\text{LiMn}_x\text{Ni}_y\text{Co}_z\text{O}_2$ in hybrid or electric vehicles and LiCoO_2 in other small devices such as cellphones. However, V_2O_5 has attracted much attention due to its high theoretical charge capacity (294 mAh/g) [3]. For this reason, it is expected to improve the stability of this material in battery testing and several strategies have been developed, among which the surface coating stands out to prevent the reduction action of the electrolyte [4].

In this work, V_2O_5 thin films were fabricated and functionalized with two different molecules, 4-aminobenzoic acid (PABA) and 4-phenylazobenzoic acid (PPBA). The samples were characterized by atomic force microscopy (AFM), conductive AFM (C-AFM), and angle resolved x-ray photoelectron spectroscopy (AR-XPS). Therefore were tested as cathode for lithium-ion batteries and afterwards it was made a postmortem analysis. Additionally, density functional theory simulations (DFT) were performed to compare with the experimental results.

The chemical composition of the surfaces was mainly V^{+5} with a low proportion of V^{+4} oxide state in a ratio $\text{V}^{+5}:\text{V}^{+4}$ close to 8:1 for the bare surface, and the proportion increases close to 24:1 when functionalizing with molecules. Furthermore, the topography of samples presents disk-shaped structures with atomically flat terraces connected throw seps, typical of laminar materials, also the molecules does not affect in roughness. Moreover, the terraces present higher conductivity than borders and the functionalization with molecules just increases that difference by increasing the conductivity in terraces and lowering it in the step. By comparing XPS results with DFT simulation, it was concluded that the molecules form a self-assembled monolayers (SAMs) onto vanadium pentoxide surfaces. Additionally, the bare and PPBA capped samples were tested as cathode for lithium-ion batteries. The oxidation and reduction peaks of vanadium pentoxide were observed, afterwards in cyclability measurements it was observed that PPBA capped V_2O_5 presents a higher charge/discharge capacity and also higher coulombic efficiency, probably due to the increase in electronic conductivity through the terraces. After battery testing, the vanadium pentoxide cathodes were disassembled and analyzed by XPS, where it was observed a reduction in degraded lithium salts concentration compared to HF in the surface, accompanied by an increase in the total Li_2CO_3 concentration

in the PPBA capped surface, which may indicate the formation of a protective CEI by the presence of the molecule.

Acknowledgments

Thanks to MultiMat and to fondecyt 1191779 for financing this work.

References

- [1] Shaqsi A. Z. A. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.egy.2020.07.028
- [2] Zhang Y. et al. (2015), doi.org/10.1007/s11431-015-5933-x
- [3] Hevia S. et al. (2022), doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.151710
- [4] Dietrich F. et al. (2021), doi.org/10.1021/acs.jpcc.1c01774

Electroreduction of nitrogen compounds to ammonia, using Cu₂O catalysts stabilized with conductive polymers

Luis Herrán

MIGA ICN2021_023

Diego Veliz

MIGA ICN2021_023

Esteban Landaeta

MIGA ICN2021_023

Jessica Honores

MIGA ICN2021_023

Mauricio Isaacs

MIGA ICN2021_023

Ammonia (NH₃) is an elemental precursor in various chemical processes, so its use has become widespread in several fields, such as fertilizer precursor and hydrogen storage. Currently, the Haber-Bosh process is the main method of industrial ammonia production worldwide. This synthetic methodology requires a considerable amount of energy and capital, in addition to the enormous mass of pollutants it releases into the environment [1]. Therefore, "greener" approaches have been sought for its generation. One of them is the electrocatalytic nitrogen reduction reaction (NRR), which is produced in the aqueous phase, using ambient conditions and protons from water as a source of hydrogen [2]. Along with this reaction, there are other nitrogenous compounds that can be converted into ammonia by electroreduction, such as NO_x, which stand out for being atmospheric pollutants, having a polar character and, therefore, being more soluble in water [3].

To achieve this electrochemical process, the use of a Cu₂O-based catalyst will be studied. This material, of low synthetic cost, has already been studied in electrochemical and photocatalytic conversion processes [4]. In conjunction, a conductive polymer (polycarbazole) will be used, which would decrease the overpotential present in the electrocatalytic process and increase the stability of the material [5].

The present study aims to evaluate the electrocatalysis of nitrogen compounds, for the generation of ammonia and the possible by-products generated from both the reduction of N₂ and the reduction of other nitrogen compounds (NO²⁻ and NO³⁻).

We propose the facile and low cost synthesis of a Cu₂O/PCz/FTO based electrode. This working electrode is synthesized by electrodeposition, by cyclic voltammetry, of carbazole on a FTO electrode surface. Subsequently, by chronopotentiometry, using copper sulfate and lactic acid, Cu₂O nanostructures were deposited. The electrode characterization was performed by FE-SEM-EDX microscopy, Raman and UV-Vis DR spectroscopy, and electrochemical methods.

Finally, electrocatalytic tests were performed on the prepared electrode in the presence of different nitrogen compounds (NO³⁻, NO²⁻ and N₂). From these tests, different concentrations of ammonia and hydrazine were obtained, respectively. From these processes, a faradaic efficiency close to 30% using N₂ and a potential of -0.8V for ammonia generation (vs Ag/AgCl) stand out. On the other hand, regarding the generation of hydrazine, a faradaic efficiency of 75% from NO²⁻ at a potential of -0.8V (vs Ag/AgCl) stands out. Together with this, it is established that the catalytic activity and electrode stability are substantially improved as a consequence of the polymer used.

Acknowledgments

This work was supported by Millennium Institute on Green Ammonia as Energy Vector - MIGA (ICN2021_023) supported by the Millennium Scientific Initiative by the Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID).

References

- [1] K.Wang et al. (2018), doi.org/10.1016/j.crcon.2018.06.004
- [2] Egill Skúlason et al. (2012), doi.org/10.1039/C1CP22271F
- [3] Dr. Tong Mou et al. (2021), doi.org/10.1002/cplu.202100356
- [4] Felipe Matamala et al. (2021), doi.org/10.1016/j.matlet.2021.129663
- [5] F. Bekkar et al. (2020), doi.org/10.3390/polym12102227

Fluorescence Carbon dots (CQDs) produced via hydrothermal carbonization incorporated with Graphene Oxide

Daniel Saavedra
*Institute of Physics,
Faculty of Physics, P.
Universidad Católica de
Chile*

José Fernández
*Institute of Physics,
Faculty of Physics, P.
Universidad Católica de
Chile*

Marcelo Cisternas
*School of Industrial
Engineering, University of
Valparaíso*

Donovan Diaz
*Institute of Physics,
Faculty of Physics, P.
Universidad Católica de
Chile*

Ulrich Volkman
*Institute of Physics,
Faculty of Physics, P.
Universidad Católica de
Chile*

Carbon quantum dots (CQDs) have received increasing attention due to their excellent photostability, low toxicity, and tunable fluorescence performance [1].

In this study, carbon dots were prepared by carbonization of chitosan via hydrothermal carbonization method [2].

To improve the stability, graphene oxide synthesized by Hummer method was incorporated. The obtained CDs were characterized by various techniques including FTIR, AFM, TEM, UV-Vis and fluorescence.

The results obtained are aimed at incorporating carbon dots into nanostructured surfaces to enhance hydrogen production by photocatalytic water splitting.

Acknowledgments

FONDECYT 1180939 (UGV), ANID Doctoral Scholarships (DS and JF).

References

- [1] Wu, Q., Zhang, S. et al. (2023), doi.org/10.1007/s12274-022-5189-2
- [2] Zattar, A. P. P. et al. (2021), doi.org/10.1080/1536383X.2020.1854742

Evaluation of thermal evaporation as deposition method for polymer-based OPV devices

Alexis González
Departamento de Química Inorgánica, Escuela de Química, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile

Patricio Sobarzo
Research Laboratory for Organic Polymers (RLOP), Escuela de Química, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile

Claudio Terraza
Research Laboratory for Organic Polymers (RLOP), Escuela de Química, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile

Cesar Saldías
Departamento de Química Física, Escuela de Química, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile

Felipe Angel
Departamento de Química Inorgánica, Escuela de Química, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile / Centro de Nanotecnología y Materiales Avanzados, CIEN-UC, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile

The extensive study of π -conjugated polymers as active materials in organic photovoltaic (OPV) devices is due to their ease of polymerization and optoelectronic properties, producing devices with power conversion efficiencies (PCE) of around 19% [1]. The fabrication of these devices at a laboratory scale is obtained by the solution deposition methods, which present limitations in batch reproducibility on an industrial scale. The study proposes using thermal evaporation as an alternative method, which offers advantages such as uniform deposition, control of film thickness, and compatibility with large-scale manufacturing. A methodology was developed to selectively evaporate a fraction of the polymeric material, depositing shorter chains on a substrate [2]. The polymer PAZ2ThA2 [3] was used for the development of the method and the fabrication of OPV devices. The thermal evaporation process was carried out at a temperature close to T_g of the polymer (250 °C). The deposition rate reached a maximum of 2 Å/s and then decreased with time, limiting the time required for deposition in subsequent experiments. Bilayer-based OPV devices were fabricated, varying the thickness of the polymeric film. Current-Voltage (J-V) and external quantum efficiency (EQE) measurements were conducted to evaluate the performance of the devices with different polymer thicknesses. The results show that with a 9 nm thickness of the polymer, a high short-circuit current (J_{sc}) and EQE were generated. In each experiment, a portion of the polymer was deposited at the beginning and the end of evaporation to later identify the composition of the evaporated fractions using size exclusion chromatography (GPC) and UV-visible techniques, confirming the control and reproducibility of the method. Bulk-heterojunction devices will be fabricated to confirm further the method's feasibility in obtaining reproducible vacuum-processed polymer-based OPV devices.

Acknowledgments

FONDECYT 11181205. FONDECYT 1200329. FONDECYT Postdoctorado 3220883. Beca de la Vicerrectoría de Investigación – UC (2023).

References

- [1] Cui, Y. et al. (2021), doi.org/10.1002/adma.202102420
- [2] Wang, S. et al. (2018), doi.org/10.1016/j.coelec.2018.10.006
- [3] Sobarzo, P.A. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2020.109658

Effect of post-synthesis treatments on the activity of metal catalysts based on metal-organic compounds in CO₂ hydrogenation reaction

Martín Asenjo

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, FCFM, Universidad de Chile, Santiago, Chile.

Mónica Soler

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, FCFM, Universidad de Chile, Santiago, Chile.

Adriana Blanco

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, FCFM, Universidad de Chile, Santiago, Chile.

Stefano Enzo

Departamento de Química y Farmacia, Universidad de Sassari, Sassari, Italia.

Francisco Gracia

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, FCFM, Universidad de Chile, Santiago, Chile.

La creciente demanda energética asociada a la urbanización y el crecimiento de la población en el mundo ha decantado en un alto consumo de combustibles fósiles tales como petróleo y gas natural [1]. Las emisiones derivadas de este consumo corresponden principalmente a dióxido de carbono (CO₂) y son responsable del aumento en la tasa de calentamiento planetaria, la cual ha aumentado en 0,1 [°C/década] en los últimos 40 años [2]. Considerando la captura del CO₂ como un proceso principal [3] en este reto medioambiental, se han estudiado dos formas de procesamiento, siendo la primera el almacenamiento y la segunda la conversión [2].

El objetivo de este trabajo corresponde al estudio de tratamientos térmicos post-síntesis en catalizadores soportados del tipo níquel sobre redes metal-orgánicas (MOF) cristalinas y porosas, evaluando el efecto del tratamiento sobre la actividad catalítica en la reacción de hidrogenación de dióxido de carbono (CO₂).

La metodología de trabajo está dividida en 6 pasos: (1) Síntesis y caracterización de los MOF UiO66 y UiO67 que serán utilizados como soporte. (2) Formación de compósitos catalíticos xNi@UiO66 y xNi@UiO67 mediante la impregnación de iones Ni⁺² vía doble solvente (hexano y etanol). (3) Estudio de la actividad catalítica entre 200 y 450 °C para la reacción de hidrogenación de CO₂, evaluando conversión y selectividad a metano (CH₄) de los catalizadores formados. (4) Realizar tratamiento térmico consistente en la calcinación de los compósitos formados, en un rango de temperaturas de 300°C hasta la descomposición del MOF. (5) Estudio de la actividad catalítica entre 200 y 450°C para la reacción de hidrogenación de CO₂, evaluando conversión y selectividad a metano (CH₄) de los catalizadores previamente tratados.

Para la síntesis de los MOF UiO66/67 se utiliza el método solvotermal, utilizando como modulante ácido clorhídrico. Mediante este método se obtienen cristales con un parámetro de celda de 20.7 [Å] y 26.9 [Å] respectivamente, ambos con un grupo espacial Fm-3m característico de celda cúbicas. También, los materiales presentes obtienen áreas de 1495 [m²/g] y 2335 [m²/g].

Para continuar el trabajo, se debe confirmar la presencia de níquel en la superficie del material (variando la carga en masa desde un 5% hasta un 20% de níquel), con hincapié en la ubicación interna o externa del soporte. Posterior a esto, se realiza la reducción in situ del compósito para formar el catalizador esperado. Para validar el efecto del tratamiento térmico

Synthesis and physicochemical characterization of aqueous nanofluids (ZnO/H₂O and ZnO-Ag/H₂O) for microscale heat transfer application

María Paz Ramírez
Navarro
*Universidad de Santiago
de Chile*

Diego Vasco Calle
*Universidad de Santiago
de Chile*

Paula Zapata Ramírez
*Universidad de Santiago
de Chile*

Ana Moita
*CINAMIL-Academia
Militar/Instituto Superior
Técnico*

Ana Paula Ribeiro
Instituto Superior Técnico

Nanofluids have been influential in the last decade due to their involvement in the miniaturization of micro-scale electronic devices as heat transfer fluids for their optimization [1-2]. A diverse range of nanofluids has been applied and synthesized based on different materials and base fluids, enabling their development in this field. However, nanofluids made of metal oxides have favourable characteristics; for example, zinc oxide (ZnO) has stood out as a compound with interesting catalytic, electrical, electronic, optical, antimicrobial and thermal properties. This last characteristic stands out since the composite ZnO can reach high thermal conductivity values of 1.02 -1.16 (W/cm K) [3-4]. In this study, aqueous nanofluids based on zinc oxide (ZnO) doped in silver (Ag) have been prepared, where a hybrid nanofluid was obtained by the two-step method at different ZnO concentrations; 0.1; 0.5 and 1% wt, keeping a fixed Ag concentration of 0.63% wt. In addition, ZnO nanofluids were synthesized in the aqueous base at different concentrations, 0.1, 0.5 and 1 % wt, where a physicochemical characterization study was carried out through UV-VIS analysis where the stability of the nanofluids could be evidenced and a TEM analysis to demonstrate the doping of the hybrid nanofluid. Subsequently, a thermal conductivity study was carried out, which showed an increase of 9.31% for the ZnO/H₂O nanofluid and 10.51% for the ZnO-Ag/H₂O nanofluid concerning the thermal conductivity of water. This gives promising characteristics in the application of microchannels for heat dissipation.

Acknowledgments

This research was funded by Departamento de Investigaciones Científicas y Tecnológicas, Universidad de Santiago de Chile (052216VC_DAS).

References

- [1] Tuckerman D. B. and Pease R. F. W. (1981), doi.org/10.1109/EDL.1981.25367
- [2] Moore G. E. (2009), doi.org/10.1109/n-ssc.2006.4785860
- [3] Florescu D. I. et al. (2002), doi.org/10.1063/1.1426234
- [4] Raykar V. S. and Singh A. K. (2010), doi.org/10.1016/j.tca.2010.02.007

Electrodos de carbón vitreo, modificados con pastas de nanotubos de carbono, líquido iónico y nanopartículas de óxido de cobalto, como potenciales electrocatalizadores hacia la oxidación de amoníaco

Isidora Novoa, José Ibarra

Facultad de Química y de Farmacia, Departamento de Química Inorgánica, Pontificia Universidad Católica de Chile, Macul, Santiago, Chile

Roxana Arce

Facultad de Ciencias Exactas, Departamento de Ciencias Químicas, Universidad Andrés Bello, Santiago, Chile

Samuel Hevia

Instituto de Física, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile / Centro de Investigación en Nanotecnología y Materiales Avanzados, Pontificia Universidad Católica de Chile, Santiago, Chile / Instituto milenio de amoníaco verde MIGA Pontificia Universidad Católica de Chile, Macul, Santiago, Chile

Galo Ramírez

Facultad de Química y de Farmacia, Departamento de Química Inorgánica, Pontificia Universidad Católica de Chile, Macul, Santiago, Chile / Instituto milenio de amoníaco verde MIGA Pontificia Universidad Católica de Chile, Macul, Santiago, Chile

Recientemente el hidrógeno verde ha sido considerado como un posible combustible. Debido a las dificultades para almacenar y transportar el hidrógeno (H_2) ha sido necesario buscar alternativas. Una opción que ofrece gran eficiencia es la utilización del amoníaco (NH_3) como un medio de almacenamiento para el H_2 , ya que este posee un 17 m% de hidrógeno lo que le otorga una alta densidad energética siendo, además, fácil de transportar [1].

Una de las maneras más verdes de romper la molécula de amoníaco, para formar hidrógeno molecular, es por medio de la electrólisis o electro-oxidación del NH_3 . De esta forma, la molécula de amoníaco se adsorbe sobre la superficie del ánodo, oxidándose, mientras que los electrones transferidos son utilizados en el cátodo para llevar a cabo la reacción de evolución del hidrógeno (HER) [2].

Es esencial utilizar materiales económicos con una alta actividad electrocatalítica en la construcción del ánodo. Los electrodos de carbón vitreo (GC) han llamado la atención debido a su alta conductividad y estabilidad, además, cuentan con una densidad de sitios activos mayor que otros materiales. La superficie de los GC es renovable y modificable, por lo que permite realizar una gran cantidad de pruebas con un mismo electrodo.

En este trabajo se estudia la actividad electrocatalítica hacia la oxidación de amoníaco, del GC modificado con nanotubos de carbono y líquido iónico Hexafluorurofosfato de N-octilpiridinio (OPyPF6). El electrodo además es modificado con nanopartículas de óxido de cobalto, y se compara su respuesta respecto al sistema sin modificar. Para esto se utiliza una celda electroquímica de 3 compartimentos con un electrodo de referencia Ag/AgCl (KCl sat.), el electrodo de trabajo y el contraelectrodo de platino son sumergidos en una disolución de Amoníaco 0,1 M en buffer fosfato 1 mM a pH 7 y en hidróxido de sodio 1 mM. Las medidas voltamétricas son realizadas entre 0 y 1.8 V, a 100 mV/s

Agradecimientos

Proyecto Fondecyt 1220107, Proyecto Regular-UNAB, DI-010-22/REG, Millenium Institute on Green Ammonia as Energy Vector MIGA, ANID/Millennium Science Initiative Program/ICN2021_023.

Referencias

- [1] Shabik, M.F. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.jelechem.2021.115592
- [2] Yang, Y. et al. (2021), doi.org/10.1039/d1ta00363a

Electrochemical synthesis and modifications of MoS₂-based nanometer surfaces as catalysts for electrochemical Nitrogen reduction

Elias Leiva Farías
*Millennium Institute on
Green Ammonia as
Energy Vector-MIGA,
Pontificia Universidad
Católica de Chile, Macul,
Santiago, Chile*

Jessica Honores
*Millennium Institute on
Green Ammonia as
Energy Vector-MIGA,
Pontificia Universidad
Católica de Chile, Macul,
Santiago, Chile*

Esteban Landaeta
*Departamento de
química inorgánica,
Facultad de Química y de
Farmacia, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Macul, Santiago,
Chile*

Domingo Ruiz
*Departamento de
Química de los
materiales, Universidad
de Santiago de Chile,
Santiago, Chile*

Mauricio Isaacs
*Millennium Institute on
Green Ammonia as
Energy Vector-MIGA,
Pontificia Universidad
Católica de Chile, Macul,
Santiago, Chile*

The industrial process for obtaining ammonia, known as the Haber-Bosch process, has been one of the most relevant industrial methods in the history. Developed at the beginning of the 20th century, it became a medium of synthesis of interest compounds based on nitrogen, since the reaction allows obtaining ammonia directly from the conversion of environmental N₂, thus obtaining a precursor for obtaining many other compounds with added value for society. Although it is undeniable that this method had a positive influence, it is undoubtedly a warning in terms of the amount of polluting material, since it is known that for each mole of NH₃ produced by this means, two moles of CO₂ are generated [1], so a more sustainable method of ammonia generation on an industrial scale is needed.

In line with the above, the electrochemical synthesis of materials based on transition metal dichalcogenides (TMD's) is presented as a possible solution for obtaining ammonia or other nitrogen-derived compounds by synthetic means that do not require a high expenditure of energy and/or production of pollutants [2]. Thus, it was proposed to obtain nanometric conductive polymer type films based on MoS₂ [3] on FTO glass electrodes by electrochemical means as catalytic material for the electrochemical reduction of nitrogen[4], successfully obtaining films with sizes ranging from 90-120 nm thick on the FTO surface. Following this approach and the theoretical studies presented to date [5], the modification of these nanometric surfaces by adding hydrophobic agents based on ionic liquids, as a means of modulating the selectivity of the surface to reduce N₂ towards NH₃, was proposed.

Electrochemical studies performed to date (polarization curves, Tafel slopes, impedance, electrolysis) indicate that the electrodeposited MoS₂ film presents favorable catalytic activity for the NRR reaction on its own, in addition to the ionic liquids used in this investigation on their own also present activity towards ammonia formation, but when both systems are implemented together the selectivity of the catalytic surface shows a deviation towards the preferential formation of hydrazine over ammonia formation. These modifications in the selectivity of the surfaces coated with ionic liquids seem to be affected by the concentration of the latter on the catalytic surface of the electrodes, which is why spin coating additions of coatings with concentrations ranging from 1-5% wt of ionic liquids of the anionic bis(trifluoromethylsulfonyl)imide (TFSI) family have been tested using CHCl₃ as solvent for the dispersion of the ionic liquids.

The synthesis of these MoS₂ films opens the door to the construction of new systems for

obtaining high-value energetic vectors as well as possible modulating means for the electrochemical synthetic routes associated with the reduction of nitrogen by means of non-noble metals, for which reason the investigation of these should be deepened in the future.

Acknowledgments

The authors would like to thank the research projects FONDECYT 1221179, FONDEQUIP 1500020, 150101 and 170087. Special thanks to the Millenium Institute on Green Ammonia as Energy Vector (ICN2021_023) for the funding granted to carry out this research.

References

- [1] A. Martin et al. (2019), doi.org/10.1016/j.chempr.2018.10.010
- [2] Cui, X. et al (2018), doi.org/10.1002/aenm.201800369
- [3] Chem. Sci. (2011), doi.org/10.1039/C1SC00117E
- [4] ACS Mater (2021), doi.org/10.1021/acsmaterialsau.1c00006
- [5] E. Skulason et al. (2012), doi.org/10.1039/C1CP22271F

Electrocatalytic reduction of nitrate to ammonia using copper nanocubes electrodes with preferential crystallographic orientation (1 0 0) in acid medium

Macarena Catalina Nadal
Cáceres

*Millennium Institute on
Green Ammonia as
Energy Vector, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile*

Pedro Pablo Jofré
Ulloa

*Millennium Institute on
Green Ammonia as
Energy Vector, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile*

Elias Leiva Farías

*Millennium Institute on
Green Ammonia as
Energy Vector, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile*

Jessica Honores
Sotelo

*Millennium Institute on
Green Ammonia as
Energy Vector, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile*

Mauricio Isaacs

Casanova

*Millennium Institute on
Green Ammonia as
Energy Vector, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile*

Nitrate (NO_3^-) contamination in soil and water is caused mainly by human activities, leading to negative consequences by altering the natural nitrogen and carbon cycle. This problem has a significant impact on human health and the environment, in addition to contributing to global warming [1]. On the other hand, ammonia (NH_3) is of great interest because it is a chemical compound used in different processes of the chemical industry, which is produced industrially through the Haber-Bosch process, requiring significant energy resources and emitting high amounts of carbon dioxide (CO_2) [2]. In contrast, an alternative to obtaining this source through a sustainable route could be the electrocatalytic reduction of NO_3^- for producing NH_3 . If a suitable electrocatalyst is employed, this reaction, carried out at ambient temperature and pressure, could offer multiple advantages, such as high energy efficiency, selectivity and low cost [1, 3]. Copper (Cu) has been extensively studied as an electrocatalyst due to its low cost and desirable electrocatalytic properties. However, it has limitations, such as its low stability in aqueous solutions and its susceptibility to oxidation in the presence of air. Besides, it has been shown that, among the transition metals, Cu is highly active in the electrochemical reduction of NO_3^- [1]. Moreover, it has been found that the crystallographically oriented (1 0 0) Cu surface has a high activity in the electroreduction of NO_3^- [3]. Furthermore, this reaction is pH-dependent, where, under acidic conditions, the electrochemical reduction of NO_3^- on Cu as catalyst produces mainly NH_3 , which makes it an attractive metal for its selectivity in this reaction [1, 3]. For these reasons, this work focused on using copper nanocubes (CuNcbs) with preferred crystallographic orientation (1 0 0) as electrocatalysts since nanocubes having a high surface area, improve the catalytic properties of the electrode because they can provide highly active reduction sites and enhance electron transfer at the electrode-solution interface, which could reduce the formation of unwanted by-products [4]. CuNcbs electrodes with preferred crystallographic orientation (1 0 0) of three nanocube sizes were prepared and structurally and morphologically characterized by FE-SEM, XRD, and XPS. Also, the catalytic activity of each of these electrodes was compared for the reduction of NO_3^- in acidic solutions, which was studied by electrochemical techniques. Also, the catalytic activity of each of these electrodes was compared for the reduction of NO_3^- in acidic solutions, which was studied by electrochemical techniques. The electrolysis was performed by applying three different overpotentials. Subsequently, the NH_3 produced was quantified by the colorimetric method of formation of the indophenol blue compound by UV-visible absorption spectroscopy, obtaining

the corresponding Faraday efficiencies and yields.

Acknowledgments

Beca ANID 21221294, FONDEQUIP EQM 150020 y 150101, FONDECYT 1221179, Millenium Institute on Green Ammonia as Energy Vector ICN2021_023.

References

- [1] V. Rosca et al. (2009), doi.org/10.1021/cr8003696
- [2] X. Fu et al. (2020), doi.org/10.1016/j.apmt.2020.100620
- [3] E. Pérez-Gallent (2017), doi.org/10.1016/j.electacta.2016.12.147
- [4] K. A. Abd-Elsalam (2022), doi.org/10.1016/C2020-0-00660-2

Quantum antidot with Aharonov-Bohm flux as a Quantum Otto Engine

Benjamín Andrés Mimica
Figari
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Francisco Peña
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

El ciclo Otto cuasiestático, que es la base del ciclo termodinámico utilizado habitualmente en los motores de automóviles, se compone de dos etapas isocóricas clásicas y dos etapas adiabáticas clásicas. El análogo cuántico del ciclo Otto consiste en sustituir los procesos clásicos por su respectiva versión cuántica lo cual conlleva cambios en sus cálculos teóricos y a nivel conceptual, obteniendo así nuevos e interesantes resultados. En este contexto, se ha demostrado que, bajo ciertas condiciones, los motores cuánticos pueden sobrepasar la eficiencia de su análogo clásico [1, 2]. Una de las características principales del ciclo de Otto, tanto cuasiestático como cuántico, es que su eficiencia depende de la sustancia de trabajo y por lo tanto encontrar una sustancia de trabajo que posea características únicas y con más de un parámetro de control experimental, puede facilitar la búsqueda de un sistema altamente eficiente y con una alta tasa de generación de trabajo útil al completar un ciclo. En este trabajo estudiamos un sistema de un electrón en un antidot que sufre los efectos de tres factores adicionales al potencial repulsivo que lo caracteriza: Una trampa parabólica (confinamiento geométrico), un campo magnético externo perpendicular al sistema y un flujo Aharonov-Bohm [3]. Comparamos la formulación cuasiestática con la formulación cuántica de los procesos adiabático e isocórico, y calculamos, en distintos rangos de temperatura y campo magnético externo, el trabajo producido y la eficiencia del motor. Encontramos que es posible extraer trabajo del sistema tanto si trabajamos en regímenes donde el campo magnético y la temperatura poseen una relación directa o inversa entre ellos. Además comprobamos que en ningún caso estudiado, la eficiencia del ciclo cuántico sobrepasa la del ciclo cuasiestático. Esto está relacionado a que no se explotan recursos cuánticos adicionales (como entrelazamiento, correlaciones, entre otros) en nuestra formulación.

Agradecimientos

Acknowledges support from ANID Fondecyt, Iniciación en Investigación 2020 grant No. 11200032, ANID Fondecyt grant No. 1210312 and USM-DGIIE. This work was partially funded by ANID - Millennium Science Initiative Program - NNBP # NCN2021_021.

Referencias

- [1] Francisco J. Peña et al. (2020), doi.org/10.1016/C2020-0-00660-2.10.3390/e22070755
- [2] H. T. Quan, et al. (2007), doi.org/10.1016/C2020-0-00660-2.10.1103/PhysRevE.76.031105
- [3] Oscar A. Negrete et al. (2018) ISSN 1099-4300

Arely Núñez Vásquez
Departamento de Física
Universidad de
Concepción

Estudio de la eficiencia de DSSC con tinte de maqui al incorporar AgNPs

Las energías renovables son aquellas derivadas de fuentes naturales. Una de ellas es la energía solar. Esta energía sirve para el funcionamiento de celdas y paneles solares, los cuales pueden transformar la energía solar en energía eléctrica. Las celdas solares más conocidas y comunes son las celdas fabricadas con silicio, las que llegan a una eficiencia de conversión máxima de un 24% aproximadamente [1]. La comunidad científica está interesada en encontrar celdas que tengan mayor eficiencia y así dejar de depender de los combustibles fósiles, como lo son el petróleo y el carbón. Un tipo de celda solar que genera interés son las celdas sensibilizadas con tintes no contaminantes DSSC [2] (por sus siglas en inglés), buscando una eficiencia más alta de conversión a la ya mencionada.

En comparación a las celdas de silicio, las DSSC tienen un costo de fabricación muy bajo, además de ser amigables con el medio ambiente por lo poco contaminante que resulta la fabricación de estas. Actualmente, las DSSC alcanzan una eficiencia del 15.2% [1] en el laboratorio, porcentaje menor que las de silicio. Pero cada día se encuentran maneras para mejorar la eficiencia.

Una forma de aumentar la eficiencia de las DSSC es la incorporación de nanopartículas metálicas. En este trabajo se realizaron DSSC con tinte de maqui, a las que se les incorporaron nanopartículas de plata (AgNPs) sintetizadas a partir de extracto del mismo fruto. Se observó un aumento de la eficiencia de las celdas al incorporar AgNPs, obteniendo un máximo para 15 mg/L de tinte, logrando un aumento de la eficiencia de un 40% con respecto a la celda sin nanopartículas.

Referencias

- [1] Green M. et al. (2020), doi.org/10.1002/pip.3371
- [2] Grätzel M. (2003), doi.org/10.1016/S1389-5567(03)00026-1

Alberto Navarrete Villegas
*Departamento de
ingeniería metalúrgica.
Universidad de Santiago
de Chile*

Basis controlled growth and electrochemical behavior of cobalt and 1,3,5 benzene-tricarboxylic acid-based MOFs for supercapacitor applications

Major challenges in designing porous materials for supercapacitor application consist of developing facile synthesis methods for effective control of porosity, size of pores, and availability of free surfaces to enhance derived effects of electric double-layer conformation [1]. Metal-Organic Frameworks MOFs are coordinated polymers consisting of center metal ions (or clusters) and organic ligands as linkers, which coordinate to form one-, two- and three-dimensional frameworks. In recent decades, MOFs have emerged as a hope of appropriate electrode materials comprising requisites of suitable electrodes for supercapacitors. The leading features that make it suitable for electrode material are: High specific surface area (SSA), tunable size porosities, settable electrochemical properties, and the possibility of tailoring different dimensional structural design [2]. Here we report a simple and cost-effective approach to control the structure and microstructure of cobalt and 1,3,5 tricarboxylic acid-based MOF crystals, by in-situ addition of different molar concentrations of NaOH during solvothermal synthesis. Differences in morphologies of grown single crystals, preferred orientations of anisotropic growth, and coordination modes were observed, analyzed, and confirmed by X-Ray diffraction analysis and scanning electron microscopy. The synthesized MOFs were utilized as an active electrode material and electrochemical performances were measured in three electrode configurations. The electrochemical test suggested that control of the structure and direction of anisotropic growth in MOFs crystals would be able to produce structural features that improve both pseudocapacitive and double layer effects in MOFs varieties, in which tricarboxylic acid planes were grown in different orientations to long faces of acicular single crystals, creating surface exposed pores and interplanar cavities. Various synthesized MOFs by varying in situ concentrations of NaOH are examined as electrode material for supercapacitor performances. Moreover, electrolyte concentration is also varied (KOH: 1M, 2M, 3M) to evaluate the performances of the electrode materials. The maximal achieved specific capacitance of 261.27[F/g] is for MOF synthesized at 6mM of NaOH in 2M KOH electrolyte at current density of 0.5[A/g]. Retention of specific capacitance reached 84% after 2000 cycles of charge-discharge. The main achievement of this work is to obtain competitive values of specific capacitance, energy, and power densities from simple, inexpensive, and highly reproducible MOF crystals synthesized by hydrothermal method and to have an intercorrelation between structural and microstructural dependent electrochemical performance.

Formation of self-assembled monolayer on LNMO Surface

Fabián Castro

*Laboratory of surfaces
and nanomaterials,
Physics department,
FCFM Universidad de
Chile*

Francisca Luco

*Laboratory of surfaces
and nanomaterials,
Physics department,
FCFM Universidad de
Chile*

Diego Rodríguez

*Laboratory of surfaces
and nanomaterials,
Physics department,
FCFM Universidad de
Chile*

Marcos Flores

*Laboratory of surfaces
and nanomaterials,
Physics department,
FCFM Universidad de
Chile*

The high-voltage spinel $\text{Li}_{0.5}\text{Ni}_{1.5}\text{O}_4$ (LNMO) is a promising cathode material for high-capacity and high-performance lithium-ion batteries (LIBs) due to its theoretically high energy density (650 Wh kg^{-1}), high operating voltage ($\sim 4.7 \text{ V vs Li}$), low manufacturing cost, and low environmental impact. However, the short cycle life of LNMO caused by rapid capacity decay during cycling limits its wide application and commercialization [1]. One of the reasons for the degradation of these batteries is that, due to the high operating voltage, it leads to electrolyte decomposition and accelerated deterioration of the electrode/electrolyte interface (CEI) [2]. Consequently, we have investigated the formation of self-assembled monolayers (SAMs) on the LNMO surface to delay the passivation process [3].

The molecule used for the formation of the self-assembled monolayer is 4-mercaptobenzoic acid (4-MBA). This molecule is interesting for this study because it has two functional groups that can react with the surface, the carboxyl and thiol groups.

Previous studies have shown that the thiol group of the molecule 4-aminophenol (4-ATP) reacts with the highly reactive alumina (Al_2O_3) surface, chemisorbing onto the material but breaking its bond with the rest of the molecule, thus preventing the formation of SAMs. However, the carboxyl group of the molecule 4-aminobenzoic acid chemisorbed onto the same surface without breaking its bond with the rest of the molecule, forming SAMs [4].

In this study, we present preliminary results of the SAMs formation on the LNMO surface. Atomic force microscopy (AFM) in contact mode was performed to study the topography of the self-assembled monolayer, and ultraviolet photoemission spectroscopy (UPS) and Fourier-transform infrared spectroscopy (FTIR) were conducted to study the structure.

Acknowledgments

This research was supported by Fondecyt regular project N°1191799. We thank the Laboratory of Nanomaterials and Polymers (DIQBM, FCFM, University of Chile).

References

- [1] Liang, G. et al. (2020), doi.org/10.1039/d0ta02812f
- [2] Zou, F. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.ensm.2021.09.033
- [3] Le Granvalet-Mancini, M. et al. (2000), doi.org/10.1016/s0013-4686(99)00364-3
- [4] Luco, F. et al. (2019), doi.org/10.13140/RG.2.2.27100.51848

Construcción de superficies nanoestructuradas de FePc para sistemas de conversión de energía: reacción de reducción de oxígeno

Ana Pizarro
Universidad de Santiago de Chile

Rubén Oñate
Universidad de Santiago de Chile

José Zagal
Universidad de Santiago de Chile

Ingrid Ponce
Universidad de Santiago de Chile

La reacción de reducción de oxígeno, RRO, es una reacción que juega un rol fundamental en sistemas electroquímicos de conversión de energía, tales como las celdas de combustible y baterías de aire. Debido a que entre los mejores materiales catalíticos para promover esta reacción se encuentran los materiales electródicos basados en platino, la búsqueda de materiales alternativos, eficientes y compactos es fundamental para el desarrollo y aplicación de estas tecnologías [1]. En este trabajo se construyeron superficies electródicas nanoestructuradas a partir de la funcionalización de monocapas orgánicas auto-ensambladas (SAMs) de sales de piridinio, funcionalizadas con complejos de ftalocianinas de Fe (FePc). Estos complejos son conocidos por presentar actividad electrocatalítica para la reacción de reducción de oxígeno, RRO. En estos sistemas auto-ensamblados, las moléculas del SAMs se encuentran participando como ligandos axiales del complejo FePc, los cuales permiten anclar el complejo a la superficie electródica. Los ligandos axiales (moléculas de piridinio) son compuestos heterocíclicos que constan de un anillo de 6 miembros, con un nitrógeno cargado positivo, denominado "core" del piridinio [2]. Por lo tanto, al actuar como ligandos axiales de FePc, ejercen un efecto inductivo atractor de densidad electrónica sobre el metal central, efecto "pull" aumentando la actividad de FePc para la reducción de O₂ [3]. De acuerdo con lo anterior, el sistema auto-ensamblado SAMs piridinio/FePc presentó mayor actividad electrocatalítica para RRO en comparación al sistema en el cual la FePc se encuentra anclada a la superficie electródica mediante el ligando axial mercaptopiridina, sin efecto "pull". La actividad electrocatalítica para RRO fue evaluada en NaOH 0,1 M a una temperatura de 25 °C y los sistemas autoensamblados de SAMs piridinio/FePc y SAMs mercaptopiridina/FePc presentaron un onset para la reacción de 965 mV y 930 mV vs RHE, respectivamente. Los sistemas fueron caracterizados mediante voltametría cíclica, voltametría de onda cuadrada y voltametría de barrido lineal.

Agradecimientos

Proyecto Anillo ACT-192175, FONDECYT 12113 51, FONDECYT 1221798, Beca Doctorado Nacional ANID 21191379.

Referencias

- [1] F. Bedioui, S. Gutiérrez, A. Alatorre, J.H. Zagal. Electroquímica, Voltametría sobre electrodo sólido. En Electrocatálisis, aspectos teóricos y experimentales, Editorial USACH, Santiago, Chile, 2009. p 287-332.
- [2] Fortage Jérôme (2010), doi.org/doi:10.1021/ja108668h
- [3] José H. Zagal (2010), doi.org/10.1016/j.ccr.2010.05.001

Flexible self-adaptive thermal radiators using infrared thermochromic antennas

Francisco V.
Ramirez-Cuevas, Kargal
L. Gurunatha, Lingxi Li,
Usama Zufilgar, Ioannis
Papakonstantinou

*Photonic Innovations
Lab, Department of
Electronic & Electrical
Engineering, University
College London; London
WC1E 7JE, United
Kingdom*

Francisco V.
Ramirez-Cuevas
*Center for Energy
Transición (CENTRA),
Facultad de Ingeniería y
Ciencias, Universidad
Adolfo Ibáñez; Santiago
7941169, Chile*

Kargal L. Gurunatha
*Centre for Nano and
Material Science (CNMS),
JAIN University;
Ramanagara Bangalore
562112, India*

Sanjayan Sathasivam,
Ivan P. Parkin
*Materials Chemistry
Centre, Department of
Chemistry, University
College London; London
WC1H 0AJ, UK*

Manish K. Tiwari
*Nanoengineered Systems
Laboratory, Department
of Mechanical
Engineering, University
College London; London
WC1E 7JE, UK*

Passive thermoregulation is the ability of living organisms to maintain their internal body temperature against the thermal fluctuations of the surroundings. Imitating this mechanism artificially in elements for buildings, cars, or clothing, could enable significant reductions of the energy demand for heating and cooling systems [1–7]. In this talk, I will introduce our work on infrared thermochromic antennas for self-regulated modulation of radiative heat losses. The antennas are featured by VO₂ microcrystals grown by hydrothermal synthesis, which are designed to dramatically switch its thermal emissivity across VO₂'s phase-transition temperature (70° C) [8], at specific regions of the infrared spectrum that can be tuned at will. By embedding the thermochromic antennas into an infrared-transparent polymer, we demonstrate a versatile and cost-effective manufacturing technique for self-adaptive thermal radiators, opening new pathways for large-scale fabrication of passive thermoregulation paints, fabrics, and films.

Acknowledgments

This work was carried out under the framework of the H2020 European Research Council (ERC) Starting Grant IntelGlazing, Grant No. 679891. UZ, MKT and IP would like to thank the Royal Academy of Engineering Frontiers Research Grant FF1920182 for funding. LL and IP would like to thank the UKRI proof of concept grant PolyCool for funding.

References

- [1] Lin C. et al. (2022), doi:10.1126/sciadv.abn7359
- [2] Fang Z. et al (2021), doi.org/10.1021/acsp Photonics.1c00967
- [3] Wang S. (2021), doi.org/10.1126/science.abg0291
- [4] Tang K. et al. (2021), doi.org/10.1126/science.abf7136
- [5] Wei H. et al. (2021), doi.org/10.1002/smll.202100446
- [6] Li X. et al. (2020), doi.org/10.1038/s41467-020-19790-x
- [7] An Y. et al. (2022), doi.org/10.1016/j.xcrp.2022.101098
- [8] Wan C. et al. (2019), doi.org/10.1002/andp.201900188

Rhenium and rhenium-copper nanoparticles: evaluation of the catalytic activity for the decomposition of ammonium perchlorate

Paulo Preuss¹

Giohanny Y. Méndez¹

Andrés M.R. Ramírez²

Felipe A. Angel¹

María B. Camarada^{1,3}

¹Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile.

²Departamento de Ciencias Químicas y Recursos Naturales, Facultad de Ingeniería y Ciencias, Universidad de La Frontera

³Cluster of Excellence livMatS @ FIT – Freiburg Center for Interactive Materials and Bioinspired Technologies, University of Freiburg.

The development of solid propellants for rockets is of great importance in the aerospace industry. They offer numerous advantages compared to other types of fuels. Their long-term stability, ease of storage and handling, and the possibility of instant ignition make them a highly reliable and safe option for space missions and rocket launches [1].

In this study, was investigated the catalytic efficacy of rhenium nanoparticles stabilized with PAMAM dendrimers (ReNP@PAMAM) and rhenium-copper nanoparticles (ReCuNP@PAMAM) [2] for the decomposition of ammonium perchlorate (AP) in composite solid propellants. AP is identified as a key component in energy generation in solid propellants; therefore, efficient decomposition is essential. The hypothesis is that incorporating of catalytic nanocomposites can improve the efficiency of this process.

Rhenium is primarily obtained from molybdenite (MoS_2), and Chile holds the world's largest rhenium reserves. However, there is a lack of studies on rhenium catalysts for AP decomposition, as well as the search for new and more effective systems to enhance energy release.

The nanocomposites were prepared by reducing ammonium perrhenate (NH_4ReO_4) in the presence of PAMAM dendrimers. Techniques such as transmission electron microscopy (TEM) and X-ray diffraction (XRD) [3] were used to characterize the morphology and structure of the nanocomposites. In addition, density functional theory (DFT) calculations were performed to study the stabilization of metal ions by dendrimers. Differential scanning calorimetry (DSC) and thermogravimetry (TGA) analyses were also conducted to evaluate the catalytic properties of the nanocomposites in the decomposition of ammonium perchlorate.

On one hand, the results revealed that ReNP@PAMAM exhibited predominantly spherical morphology, with an average size of approximately 1 nm. On the other hand, ReCuNP@PAMAM exhibited cuboctahedral shapes and an average size of around 5 nm.

Regarding catalytic activity, it was found that both rhenium and rhenium-copper nanoparticles showed higher efficiency in AP decomposition compared to pure AP [4]. Furthermore, ReCuNP@PAMAM exhibited higher catalytic activity compared to ReNP@PAMAM alone. In conclusion, the study demonstrated that rhenium and rhenium-copper nanoparticles hold promise as catalysts for AP decomposition in composite solid propellants. These findings suggest that these nanoparticles could improve efficiency and energy release in propulsion systems.

Acknowledgments

M.B.C. is grateful to Fondecyt for funding this research (Project 1180023). A.M.R.R. thanks Fondecyt (Project 1230426). This research was partially supported by the supercomputing infrastructure of the NLHPC (ECM-02) and by the high-performance computing system of PIDI-UTEM (SCC-PIDI-UTEM CONICYT-FONDEQUIP-EQM180180). The authors thank Projects Fondecyt EQM170087 and EQM150101, the Atomic Center of San Carlos de Bariloche, Argentina, especially Alfredo Tolley, and the reagent support of Molymet, Chile.

References

- [1] Qi-Long Y. et al. (2016), doi.org/10.1016/j.pecs.2016.08.002
- [2] Camarada M.B. et al. (2018), doi.org/10.1021/acs.langmuir.8b01809
- [3] Greiner M.T. et al. (2018), doi.org/10.1515/zpch-2014-0002
- [4] Hosseini S.G. (2018), doi.org/10.1002/aoc.3959

Nanodomes substrates as a tool for tuning the magnetoelectro properties of a Co-based pseudo spinvalve.

E. Burgos-Parra, J.
Hermosilla, J. L. Palma,
J. C. Denardin, S.
Oyarzún
*Departamento de Física,
Universidad de Santiago
de Chile, Santiago, Chile*

A pseudo spin valve (PSV) [1] is formed by a magnetic/ non-magnetic/ magnetic stack of thin films. In these PSV the relative magnetization between the magnetic layers gives rise to different magnetoresistance states which are crucial for the fabrication of magneto resistive sensors and neuromorphic computing based on spintronics. In this work, we fabricated a PSV multilayered system comprised of $[\text{Pd}(1.5)\text{Co}(0.3)]_x\text{N}/\text{Co}(0.3)\text{Cu}(10)/[\text{Pd}(1.5)\text{Co}(0.3)]_x\text{N}$, with $N = [10,15]$ the number of repetitions. The magneto-electrical properties depending on the material and thickness of intermediate layers have been characterized to determine the optimal parameters of magnetic anisotropy and optimize magnetoresistance and Hall Effect. After optimizing the PSVs in continuous substrates, on the bottom of Anodic Alumina Oxide membranes forming nanodomes [2]. We have shown that values of magnetoresistance can still be observed on the nanomodulated PSV, being the larger values observed in nanodomes with 50 nm in diameter. Magnetization, extraordinary Hall effect and Magnetic Force Microscopy have been used to characterize the samples and to study the magnetization reversal mechanism in each system.

Acknowledgments

EBP was funded by Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo - ANID through the program FONDECYT Postdoctoral grant no. 3220689 and USACH Postdoctoral grant USA2055_DICYT.

References

- [1] Yeyu Fang, et al. (2012), doi.org/10.1002/adfm.201202319
[2] S. Michea, et al. (2017), doi.org/10.1063/1.4975489

Use of VACNT as current collector in a V_2O_5 -based lithium ion battery

Matías Ignacio
Picuntureo Jara
*Instituto de Física,
Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Roberto Villarroel
*Instituto de Física,
Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Samuel Hevia
*Instituto de Física,
Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

The fabrication and testing of a novel lithium-ion battery cathode, comprising an array of vertically aligned carbon nanotubes (VACNT) coated with vanadium pentoxide ($V_2O_5@VACNT$), is presented in this study. The VACNT was directly grown on stainless steel (SS) substrates via Chemical Vapor Deposition (CVD), using a Fe/Al bilayer catalyst approach. The V_2O_5 coating was achieved by evaporating metallic vanadium using an electron beam, followed by thermal oxidation. The electrochemical performance of the $V_2O_5@VACNT$ cathode was evaluated through galvanostatic charge/discharge cycles and Cyclic Voltammetry analysis. To assess the influence of VACNT-induced effects on cathode electrochemical performance, two different substrate types were utilized: bare SS and VACNT-modified SS. The evaporated vanadium was collected on these substrates, and various vanadium mass loads and oxidation temperatures were examined to understand their impact on the performance of $V_2O_5@VACNT$ cathodes. When the bare SS substrate was used, a thin film of V_2O_5 was formed. Notably, the specific capacity of these thin films exhibited a significant dependence on the mass load of V_2O_5 . However, this dependency was mitigated when VACNT-modified SS substrates were employed, likely due to a more efficient distribution of the V_2O_5 mass load when VACNT structures are incorporated as current collector. This distribution reduces the diffusion path lengths that lithium ions need to travel within the V_2O_5 material to achieve intercalation. The results of this study suggest that utilizing VACNT structures as the cathodic current collector is a promising strategy for enhancing lithium ion diffusion by minimizing the diffusion path lengths within the intercalation material. This improvement in diffusion characteristics can lead to better performance and efficiency in lithium-ion batteries.

Acknowledgments

This research was funded by the Chilean Ministry of Economy through the Millennium Nucleus MULTIMAT – ICM/MINECOM. The authors also thank to CONICYT/ANID by FONDECYT grants 1201589 (S.H.), 3201030 (R.V.) and 3190552 (J.G.M.); National Doctoral Scholarship CONICYT-PFCHA 21171760 (M.P.) and FONDEQUIP grants EQM150101, and EQM170087.

References

- [1] Hevia, S. A. et al. (2022), doi.org/10.1016/j.apsusc.2021.151710

CsPbBr₃-based photoanode prepared by single-step Vapor Transport Deposition of perovskite films

José Raúl Sosa Acosta

*Facultad de Química,
Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile /
Millenium Institute on
Green Ammonia as
Energy Vector - MIGA
(ICN2021_023)*

Leunam Fernández
Izquierdo

*Department of Material
Science and Engineering,
The University of Texas at
Dallas, Richardson, USA*

Rodrigo del Río

*Facultad de Química,
Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Samuel Hevia Zamora

*Instituto de Física,
Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile /
Millenium Institute on
Green Ammonia as
Energy Vector - MIGA
(ICN2021_023) / Centro
de Investigación en
Nanotecnología y
Materiales Avanzados,
Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Cesium Lead Bromide (CsPbBr₃) perovskite films have attracted significant attention as a promising material in photovoltaics and photoelectrochemistry. Despite their numerous advantages, their implementation still requires scalable and high-quality processing [1,2]. This research describes the growth of CsPbBr₃ films by Chemical Vapor Deposition (CVD) in one step. Due to its potential scalability and ease of control, this technique is considered a new approach to high-quality perovskite film fabrication. The methodology consisted of growing perovskite films from pre-synthesized CsPbBr₃ crystals. The substrates employed were FTO covered with nanometric TiO₂ films, also previously fabricated and optimized using e-beam evaporation and subsequent thermal oxidation. Layer-by-layer film homogeneity, thickness, and uniform substrate coverage were controlled using growth time and precursor mass parameters. We obtained a batch of five perovskite samples with thicknesses from 300 nm up to 2.5 μm with dense vertical growth. Structural and morphological measurements showed a pure orthorhombic phase, except in the thinnest films that evidenced some extent of phase impurity. Optical and Raman analysis further confirmed the CsPbBr₃ structure in all samples. Photoelectrochemical analysis demonstrated the application potential of the as-prepared perovskite films. We achieved a stable photocurrent for 1h in aqueous electrolyte under constant simulated solar illumination, with a current density above 3 mA/cm² at 0.9 V vs. RHE. Such potential results contribute to developing stable halide perovskite-based electrodes for photoelectrochemical solar fuel generation.

Acknowledgments

J.R. Sosa-Acosta. received funding from Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID) Doctoral grant Folio No. 21190526. This research was also supported by Fondecyt project #1201589 and #3210399. This work was also funded by The Millenium Institute on Green Ammonia as Energy Vector - MIGA (ICN2021_023) and Fondecyt EQM150101 and EQM170087.

References

- [1] Tatarivov A.D. et. al (2023), doi.org/10.1002/adom.202202407
- [2] Wang S. et. al. (2022), doi.org/10.1016/j.mtphys.2022.100614

Angélica Gatica Caro
*Departamento de
Química de los
Materiales, Universidad
de Santiago de Chile*

Mohammad
ALSamman
*Departamento de
Química de los
Materiales, Universidad
de Santiago de Chile*

Juan Carrasco Hidalgo
*Departamento de
Química de los
Materiales, Universidad
de Santiago de Chile*

Federico Tasca
*Departamento de
Química de los
Materiales, Universidad
de Santiago de Chile*

Reexaminación de propiedades electrocatalíticas de Pt/C 20% para las reacciones de reducción y evolución de oxígeno en medio ácido, neutro y básico

El constante aumento de la población ha llevado a un incremento en el consumo de energía. Lo que ha provocado una dependencia en la utilización de combustibles a base de carbono, induciendo una acumulación de los gases del efecto invernadero en la atmósfera [1].

Para mitigar el impacto ambiental se volvió imperativo el reemplazo de los combustibles fósiles por tecnologías sustentables como las que se basan en el uso de H₂. Este éxito depende del desarrollo de dispositivos de conversión de energía, tales como: (i) el electrolizador de agua (WE), y (ii) la pila de combustible (FC) [2]. Este sistema busca utilizar energías renovables para desarrollar hidrógeno verde, el cual tiene la capacidad de reemplazar las energías convencionales en una mucho más limpia y sin dejar un alto impacto ambiental [3].

Sin embargo, las fuel cells presentan un inconveniente, el alto requerimiento energético para la ruptura y la formación del enlace O-O (es decir, 118 kcal/mol) [4], por lo que las reacciones de OER y ORR son reacciones difíciles de lograr, es por esta razón que se ha implementado la utilización de catalizadores, para poder disminuir el requerimiento energético.

Dentro de los catalizadores más populares y efectivos se encuentran los “metales nobles”, los cuales corresponden principalmente al grupo 8, 9 y 10, así también al periodo 5 y 6. En este grupo destaca principalmente el platino, el cual se considera como uno de los mejores catalizadores para celdas combustibles [5].

El foco de este trabajo fue la realización de una reexaminación de reducción de oxígeno (ORR) y evolución de oxígeno (OER), en medio ácido, neutro y básico, unificando estas reacciones en los diferentes pHs, observando el comportamiento del Pt/C 20%, que es uno de los catalizadores comerciales más utilizados, junto a un polímero comercial (nafion), que permitió visualizar diferencias respecto a la transferencia de electrones para el mecanismo de esfera externa e interna y así identificar los intermediarios presentes en los diferentes medios.

Agradecimientos

Los autores de este trabajo agradecen el soporte financiero obtenido por el proyecto FONDECYT N°1220988 (FT).

Referencias

- [1] Acar, C. et al. (2016), doi.org/10.1016/j.jpowsour.2016.09.026
- [2] Z. Abdin. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.rser.2019.109620
- [3] Xiao-Zi Yuan. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.rser.2019.109620
- [4] J.K. Nørskov. et al. (2004), doi.org/10.1021/jp047349j
- [5] Acar, C. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.ijhydene.2018.10.149

Fabricación y funcionalización de películas delgadas de LNMO como material catódico para baterías de ion-litio

Francisca Luco¹

Benjamín Silva¹

Fabián Castro¹

Judit Lisoni

*Instituto de Ciencias
Físicas y Matemáticas,
Facultad de Ciencias,
Universidad Austral de
Chile, Valdivia, Chile.*

Marcos Flores¹

*¹Laboratorio de
Superficies y
Nanomateriales,
Departamento de Física,
FCFM, Universidad de
Chile, Santiago, Chile.*

Dentro de los materiales catódicos para baterías de ion-litio que existen actualmente, el óxido de níquel manganeso litio (LNMO) tipo espinela se considera una de las mejores alternativas para la próxima generación de baterías en estado sólido de película delgada debido a su alto potencial de operación a altos voltajes ($\pm 4,7$ V vs. Li /Li⁺), su alta densidad de energía ($> 1,8$ g cm⁻³), vías tridimensionales de difusión rápida de iones de litio y buena seguridad, entre otras características [1, 2]. Este material libre de cobalto puede reemplazar al óxido de cobalto litio y sus derivados disponibles actualmente en el mercado, que son tóxicos y costosos. La obtención de este material como película delgada se ha limitado a métodos físicos como magnetron sputtering [2, 3] que tiene un elevado costo de operación. Asimismo, la funcionalización de superficies de LNMO con moléculas autoensambladas como agente modificador de la interfase cátodo/electrolito, se ha obtenido mediante técnicas como deposición de capa atómica (ALD) [4] y deposición en fase de vapor [5].

Presentamos el estudio de la síntesis de películas de LNMO por el método de descomposición metalorgánica (MOD) a distintas temperaturas sobre sustratos de acero inoxidable (SS). Esta ruta de síntesis es más sencilla, menos costosa y más respetuosa con el medio ambiente que los métodos convencionales actualmente utilizados para fabricar este material. Para la síntesis, se disolvió una mezcla de los precursores (CH₃COOLi, Ni(CH₃COO)₂·4H₂O y (CH₃COO)₂Mn·4H₂O) en etanol y agua por separado, en una relación estequiométrica de 2:1:3. Ambas disoluciones fueron agitadas a 60°C durante 20 minutos para formar geles, los cuales se depositaron uniformemente sobre SS por spin coating. Luego, las muestras fueron recocidas en un horno tubular tipo CVD a temperaturas entre 500 y 900°C durante 1 h con un flujo de O₂ a 25 SCCM. Las superficies resultantes se funcionalizaron mediante inmersión en disoluciones de ácido 4-mercaptobenzoico y ácido 4-(fenilazo)benzoico por separado durante 24 horas.

Los difractogramas XRD evidencian fases de alta pureza de LNMO a temperaturas menores a 700°C. La morfología, topografía y espesor de las películas delgadas han sido observadas por SEM, FIB-SEM y AFM, donde se distinguen nanoestructuras octaédricas características del LNMO tipo espinela con espesores menores a 2.6 μ m. Mediante el análisis elemental por SEM-EDS se pudo identificar la relación estequiométrica deseada (LiNi_xMn_{2-x}O₄, con x=0.5) en muestras a base de agua a T < 800°C, y en muestras a base de etanol a T < 700°C. Los análisis de XPS y FTIR demuestran la presencia y la posición de las moléculas ensambladas en la superficie de LNMO. La aplicabilidad como material catódico del LNMO funcionalizado se exploró mediante mediciones electroquímicas, como voltamperometría cíclica, ciclabilidad

y C-Rate, mostrando una capacidad de almacenamiento práctica similar a los materiales comerciales utilizados actualmente.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por el proyecto FONDECYT N° 1191799, Unidad de Microscopía Electrónica (UME-UACH), Núcleo Milenio Multimat y ANID-Subdirección de Capital Humano/Doctorado Nacional/2023-21232003.

Referencias

- [1] Liang, W. et al. (2021) doi.org/10.1016/j.jmat.2021.02.003
- [2] Madinabeitia, I. et al. (2022) doi.org/10.1021/acsaem.2c01581
- [3] Darjazi, H. et al. (2023) doi.org/10.1002/celc.202201004
- [4] Koshtyal, Y. et al. (2022) doi.org/10.3390/batteries8100184
- [5] Kim, D. et al. (2018) doi.org/10.1038/s41598-018-30135-z

Efecto de los aniones Br^- , ClO_4^- , NO_3^- en la electrocatálisis de la reacción de reducción de oxígeno en electrodos modificados con fetalocianina de hierro enlazadas a nanotubos de carbono

Federico Tasca
*Departamento Química
de los Materiales,
Universidad de Santiago
de Chile*

César Zúñiga Loyola
*Departamento Química
de los Materiales,
Universidad de Santiago
de Chile*

Angélica Gatica Caro
*Departamento Química
de los Materiales,
Universidad de Santiago
de Chile*

Nicolás Troncoso
*Departamento Química
de los Materiales,
Universidad de Santiago
de Chile*

La dependencia de los combustibles fósiles ha provocado un aumento en los gases de efecto invernadero en la atmósfera. Para mitigar este impacto se ha vuelto imperativo reemplazar estos combustibles por aquellos basados en hidrógeno. Esto es posible con el desarrollo de dispositivos de conversión de energía tales como; (i) electrolizador de agua (WE) y (ii) celda combustible (fuel cell)[1].

En WE, el H_2 se obtiene en el cátodo mediante la reacción de evolución de hidrogeno (HER) y el agua se oxida a O_2 en el ánodo en la reacción de evolución de oxígeno (OER). En las fuel cells el H_2 se oxida en el ánodo formando especies H^+ denominada; reacción de oxidación de hidrogeno (HOR), mientras que, el O_2 se reduce a agua en el cátodo durante la reacción de reducción de oxígeno (ORR). Sin embargo, el alto requerimiento energético para romper y formar el enlace O-O en la ORR Y OER requieren la utilización de catalizadores [2].

Los catalizadores basados en Pt, Pd, Ir y Rh han demostrado una alta actividad catalítica para estas reacciones, pero su alto valor y escasas, imposibilita su comercialización masiva [3]. Es por esta razón que nacen diferentes estudios sobre catalizadores basados en metales de transición no preciosos, como Fe, Co y Zn [4].

Recientemente, un estudio realizado por nuestro equipo analizó el rendimiento de FePc-CNT en diferentes electrolitos de soporte. Se descubrió que dependiendo el anión del electrolito de soporte, el potencial redox Fe(III)/Fe (II) al igual que el potencial onset disminuye en el siguiente orden: $\text{OH}^- > \text{CH}_3\text{CO}_2^- > \text{HSO}_4^- > \text{Cl}^-$ [5].

En este trabajo se utilizaron tres medios diferentes HNO_3 1M, HClO_4 1M y HBr 1M y NaOH 0.1M, NaOH 1M para comparación. Se estudiaron los datos termodinámicos y análisis cinético mediante voltametrías cíclicas y curvas de polarización respectivamente, junto con esto, las pendientes tafel mostraron la evidencia de adsorción aniónica en el centro metálico ejerciendo una influencia preponderante por parte de los aniones. Para esto realizaron pruebas de envenenamiento de dos pasos para evaluar la energía necesaria para desorber el anión del sitio activo de FePc-CNT, mediante ΔE_{onset} y consecutivamente ΔG . La energía libre de Gibbs pone en evidencia que NO_3^- , Br^- , ClO_4^- , pueden envenenar reversiblemente los sitios activos, que resulta consistente con la manifestación progresiva del mecanismo de transferencia de esfera externa y pruebas de adsorción/envenenamiento del centro de Fe en

FePc.

Agradecimientos

Los autores quieren agradecer el financiamiento de ANID/FONDECYT bajo el rubro Subsidios N°1220988 (FT), y ANID/FONDECYT-POSTDOC N° 3220215 (CZL).

Referencias

- [1] Z. Abdin (2020), doi.org/10.1016/j.rser.2019.109620
- [2] J.K. Nørskov (2004), doi.org/10.1021/jp047349j
- [3] W. Platinum, I. Council (2020)
- [4] J. Govan (2021), doi.org/10.1007/s10008-019-04489-x
- [5] W. Orellana (2022), doi.org/10.1021/acscatal.2c03298

Development of bio-photo anodes using Ulvophyceae macroalgae

Sergio Choque
*Universidad de Santiago
de Chile*

Cesar Zuñiga
*Universidad de Santiago
de Chile*

Alberto González
*Universidad de Santiago
de Chile*

Alejandra Moenne
*Universidad de Santiago
de Chile*

Federico Tasca
*Universidad de Santiago
de Chile*

Three different macroalgae i.e. *U. lactuca*, *U. linza*, and *U. compressa* have been studied for biological photovoltaic energy system (BPVE), using edge plane pyrolytic graphite as the supporting working electrode. The studied biophotoanodes were evaluated in terms of direct electron transfer (DET) and mediated electron transfer processes (MET). Ferrocyanide (FeCN), p-benzoquinone (BQ), and 1,4-naphthoquinone (NQ) were used as a mediator during biophotovoltaic experiments in the presence and in the absence of applied light. The electrochemical characterization was performed by cyclic voltammetry (CV) and chronoamperometry. The results show that using BQ during the MET process, the electron transfer to the graphite electrode drastically increases, during light conditions, where the most promising biophotoanode, was in the presence of BQ and *U. linza* with a current density of $72.1 \pm 9.1 \mu\text{A}/\text{cm}^2$, which represents an increase of almost 2000 times over DET results. Similar results were obtained with *U. lactuca* and *U. compressa*. The high performance in the presence of BQ for the three macroalgae has been attributed to favorable penetration of the quinone molecule to the cytoplasmic membrane allowing direct exchange of electrons with the photosystem II in the thylakoid structure.

Acknowledgments

The authors want to acknowledge the funding from Fondecyt Grants 1220988 (FT) and Fondecyt Postdoc 3220215 (CZ).

Spin-selection control to improve the electrocatalysis for the oxygen reduction reaction in chiro-self-assembled FePc systems

Ingrid Ponce
Universidad de Santiago de Chile

Nayareth Vilches
Universidad de Santiago de Chile

Ricardo Venegas
Universidad de Santiago de Chile

Ana María Méndez
Universidad de Santiago de Chile

Rubén Oñate
Universidad de Santiago de Chile

Alexis Aspee
Universidad de Santiago de Chile

The spin-selection control to improve the Electrocatalysis for the water-splitting reactions has been demonstrated by R. Naaman et al. in different experimental platforms [1]. On the other hand, as the O₂ molecule is paramagnetic, the spin state of the electrons involved in the reduction process should be considered to improve the electrocatalytic performance of a specific electrodic surface. In this direction, iron phthalocyanine, FePc, is a molecular catalyst for ORR. It is an excellent building block to obtain electrocatalytic self-assembled systems anchored to electrode surfaces by the action of the molecular wires [1,2]. In these systems, the reduction electrons flow through this nano-circuit from the electrode surface and oxygen molecule binding to the active site (Fe-O₂). Since most electrocatalytic studies focus on the thermodynamic factor to improve the reaction (binding energies, potential redox, etc.), in this study, we have focused on the kinetic behavior involved in electron transport effects. To achieve this, we report the bottom-up self-assembly circuit construction based on a FePc-molecular catalyst for the ORR, anchored on a gold electrode surface by chiral peptide wires. The latter, Due to the electron transport in chiral peptides, exhibits the chirality-induced spin selectivity phenomenon (CISS), promoting the transport of one electron spin over the other in a chiral wire [4,5]. Our findings determine that the CISS effect influences the electrocatalytic action of FePc for ORR.

Acknowledgments

Fondecyt Regular 1211351, 1190881, Anillo Project ACT 192175, ANID GRANT ID 21212199 and 21232198, Project Fondecyt Postdoctoral #3220728.

References

- [1] Naaman R. et al. (2019), doi.org/10.1016/j.coelec.2019.02.004
- [2] Gutiérrez-Ceron C. at al. (2019), doi.org/10.1016/j.electacta.2019.134996
- [3] Pizarro A. et al. (2018), doi.org/10.1021/acscatal.8b01479
- [4] Tangi M. et al. (2017), doi.org/10.1021/jacs.6b12971
- [5] Aragonès A. et al. (2016), doi.org/10.1002/smll.201602519

Graphene based electrodes for efficient supercapacitors

Dinesh Pratap Singh
*Department of Physics
and Millennium Institute
for Research in Optics
(MIRO), Universidad de
Santiago de Chile Av.
Victor Jara, Santiago
3493, Chile*

Leonardo Vivas
*Department of Physics
and Millennium Institute
for Research in Optics
(MIRO), Universidad de
Santiago de Chile Av.
Victor Jara, Santiago
3493, Chile*

Adrian Jara Cornejo
*Department of Physics
and Millennium Institute
for Research in Optics
(MIRO), Universidad de
Santiago de Chile Av.
Victor Jara, Santiago
3493, Chile*

Graphene [1]; the first ever thinnest material known and universally established as a wondrous material, keep on surprising by its noble and astounding properties, various recent and forthcoming applications based on its remarkable high surface area, excellent thermal conductivity, superior mechanical properties, ultra-high electron mobility etc. Owing to high surface area and high electronic and ionic conductivity, it is considered as an efficient material for the electrodes of energy conversion and storage devices. In the energy sector, renewable energy conversion is being achieved by the solar cell devices but simultaneously their storage in an efficient, durable, and low-cost technique is in utmost demand for uninterrupted continuous 24hrs power supply to fulfill energy requirement [2]. Recently developed electrochemical double layer capacitor (EDLC) or supercapacitors are benefitted over commercially available lithium ion batteries in various sense such as ecofriendly, fast charging, high power density, instant power delivery, high capacity retention and long cyclic stability etc. Graphene based composites with metals and transition metal oxides can be the suitable candidates for the electrode material and efficient energy storage with low cost of production. Here we will talk about in-situ and ex-situ synthesis approaches for graphene-based materials and its utilization as an electrode for supercapacitor. Synthesis of graphene-based composites such as rGO-Au [3] and graphene-chromium oxide [4] etc. and their application as an electrode material for high performance supercapacitors with high energy and power densities and long cyclic life will be discussed and described during the presentation.

Acknowledgments

The authors acknowledge with gratitude the financial supports from ANID-Millennium Science Initiative Program ICN17-012 through Millennium Institute for Research in Optics (MIRO), ANID- Fondecyt Postdoctorado 3210225 and ANID-Fondecyt Regular 1231714.

References

- [1] Geim A. K. et al. (2007), doi.org/10.1038/nmat1849
- [2] Kumar R. et al. (2018), doi.org/10.1016/j.pecs.2018.03.001
- [3] Vivas L. et al. (2022), doi.org/10.3389/fenrg.2021.794604
- [4] Vivas L. et al. (2022), doi.org/10.1021/acsomega.2c05670

Electrodos de $Ni_{1-x}Cu_x$ sobre acero inoxidable para la oxidación electroquímica de amoníaco

Herna Barrientos, Felipe Matamala-Troncoso, David Lozano, María J. Aguirre

Departamento de Química de los Materiales, Facultad de Química y Biología, Universidad de Santiago de Chile / MIGA Millennium Institute ICN2021_023

Judit Lisoni

Instituto Ciencias Físicas y Matemáticas, Facultad de Ciencias, Universidad Austral de Chile / MIGA Millennium Institute ICN2021_023.

Sergio Díaz Coello, Carmen Arévalo, Elena Pastor

Departamento de Química Física, Universidad de la Laguna, España

La oxidación electroquímica de amoníaco (AOR) permite obtener como producto nitrógeno e hidrógeno gaseoso. Así, con esta reacción, el amoníaco se transforma en un vector para la producción y transporte seguro de hidrógeno [1]. Debido a su alta actividad catalítica, AOR se ha llevado comúnmente a cabo utilizando catalizadores de metales nobles, tales como Pt, Pd, Ru y Rh entre otros [2]. Sin embargo, estos metales tienen una baja disponibilidad y un alto costo. En este trabajo se propone estudiar la reacción de AOR con aleaciones de $Ni_{1-x}Cu_x$ nanoestructurado como una alternativa económicamente viable para la generación de hidrógeno a través del uso de amoníaco.

El electrodeposición de $Ni_{1-x}Cu_x$ se realizó en una celda de tres compartimientos, usando como electrodo de trabajo un sustrato de acero inoxidable del tipo 304 (SS), un contraelectrodo de Pt y Ag/AgCl como electrodo de referencia. Las sales de cloruro de níquel (II) hexahidratado ($NiCl_2 \times 6H_2O$) y cloruro de cobre (I) ($CuCl_2$) fueron usadas como precursores disueltos en buffer NH_4Cl/NH_4OH (pH 10.4). Los principales parámetros de estudio fueron la razón Ni/Cu (1:1 y 3:1) y el tiempo de deposición (entre 5 y 30 s). Luego de la activación del electrodo para promover la formación de óxidos e oxihidroxidos tanto de Ni como de Cu, AOR fue evaluada utilizando voltamperometría cíclica y espectrometría de masas electroquímica diferencial (DEMS), con una solución de 10 mM NH_4OH en 1 M KOH. Los depósitos fueron caracterizados mediante FESEM, XRD y espectroscopia EDS acoplada a SEM.

EDS mostró que la composición de los depósitos mantuvo la relación Ni/Cu de la solución acuosa, esto es 1:1 y 3:1. Los compuestos formados son cristalinos con una estructura FCC [3] muy similares para ambas composiciones. Los electrodos presentan una morfología jerárquica tipo helechos, con granos de dimensiones de decenas de nm's. La muestra que presenta una mejor respuesta en densidad de corriente en presencia de hidróxido de amonio fue SSNi/Cu 3:1 obtenida con 30 s de deposición. SSNi/Cu 1:1 no es efectivo para AOR, lo cual se atribuye a su menor tasa de crecimiento generando una mayor exposición del sustrato de acero. DEMS mostró que la evolución de nitrógeno y compuestos gaseosos de nitrógeno como NO y N_2O son observables en la superficie del ánodo activado a $V > 1,35$ V (frente a RHE). La reacción de evolución de oxígeno fue la reacción principal y competitiva durante AOR, que fue detectable sobre 1,45 V (RHE). La pérdida en la efectividad de AOR parece estar relacionado con una potencial disolución del ánodo, la que se relaciona a una pérdida de Cu y subsecuente suavizamiento de los bordes de las estructuras tipo helecho que forman el depósito. El área electroactiva está siendo correlacionada a los cambios microestructurales y AOR. Los resultados descritos demuestran que la oxidación de amoníaco es posible en

electrodos SS/NiCu, siendo éste una superficie estable para usar en condiciones altamente alcalinas.

Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por ANID a través del Instituto Milenio en Amoniacos Verde Como Vector Energético (MIGA), Programa Iniciativa Científica Milenio, ICN2021_023 (HB, FM, DL, JL, MJA). JL agradece a Fondecyt 1230945 y Unidad de Microscopía Electrónica de la Universidad Austral de Chile. MJA agradece a FONDEQUIP EQM190016.

Referencias

- [1] N. Salmon et al. (2021), doi.org/10.1039/d1se00345c
- [2] B. Boggs et al. (2010), doi.org/10.1016/j.electacta.2010.04.040
- [3] The International Centre for Diffraction Data – ICDD, tarjeta JCPDS 00-047-1406

Tandem photochemical cell based on nanostructured metal oxides

Daniel Cerdaa and
Samuel A. Hevia
*Instituto de Física,
Pontificia Universidad
Católica de Chile
Centro de Investigación
en Nanotecnología y
Materiales Avanzados,
CIEN-PUC, Pontificia
Universidad Católica de
Chile / MIGA: Millenium
Institute on Green
Ammonia as Energy
Vector*

José R. Sosa
*Centro de Investigación
en Nanotecnología y
Materiales Avanzados,
CIEN-PUC, Pontificia
Universidad Católica de
Chile*

Efficiently capturing solar energy using semiconductors to produce hydrogen by splitting water molecules is one of the most important challenges in Energy Sciences nowadays. The quest for low-cost and environmentally friendly materials is crucial for the development of these emerging technologies. This research focuses on fabricating a tandem-type photochemical cell based on metal oxides (Cu_2O and Fe_2O_3) and optimizing its performance and stability through the incorporation of an array of carbon nanotubes (CNTs) and a TiO_2 coating.

The fabrication of the CNTs array utilizes a porous alumina membrane as a template in a chemical vapor deposition (CVD) process. The primary function of the CNTs is to act as an electric transport channel. By adjusting the CVD parameters, it is possible to fine-tune their conductance to optimize the device's performance.

Copper oxide I (Cu_2O) is obtained through electron beam evaporation (EBE) of metallic Cu, followed by oxidation treatment at low temperatures (150 °C). On the other hand, incorporating the Fe_2O_3 layer onto the CNTs arrays has presented some technical challenges. Due this layer is fabricated through CVD using Ferrocene as a precursor, followed by oxidation treatment at 550 °C. During this last step, the integrity of the CNTs is significantly affected. A morphological and electrochemical characterization of these catalytic layers will be presented and the following steps to assembly the tandem cell will be discussed.

Acknowledgments

This work was funded by, Millenium Institute on Green Ammonia as Energy Vector MIGA, ANID/Millennium Science Initiative Program/ICN2021_023. The authors also thank ANID by FONDECYT grants 1201589 and to FONDEQUIP EQM150101, EQM170087.

References

- [1] J. A. García-Merino et al. (2021) , doi.org/10.1016/j.jmat.2020.10.002
- [2] S. Choudhary et al. (2016), doi.org/10.1063/1.4945236
- [3] L. Fernandez-Izquierdo et al. (2023), doi.org/10.3390/molecules28041954

Tópico T5: Aplicaciones de nanotecnología para el medio ambiente y economía circular

Nanocomposites based on molybdenum oxide and graphitized carbon nitride for the partial oxidation of guaiacol and the obtaining of added value molecules

Caetano Flores Cavallo
*Facultad de Química y de
Farmacia, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Macul, Santiago,
Chile*

Lorena Barrientos
*Facultad de Química y de
Farmacia, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Macul, Santiago,
Chile / Millennium Nuclei
on Catalytic Processes
Towards Sustainable
Chemistry (CSC), Chile /
Research Center for
Nanotechnology and
Advanced Materials
CIEN-UC, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile*

Substitution of fossil fuel with renewable sources of energy is an important challenge for climate change deacceleration. Biomass is a natural, abundant, and low-cost source with a potential for added value molecules production. Numerous studies have focused on lignin, a phenolic biopolymer, that presents alcohol, methoxy and furan derived functional groups. However, the development of an efficient oxidative conversion process is still unreachable due to difficulties in reaction mechanisms. In this work, development, and photocatalytic performance evaluation of the $\text{MoO}_3/\text{g-C}_3\text{N}_4$ heterojunction and its later functionalization with β -cyclodextrin (β -CD) is postulated. For this, guaiacol was used as a model molecule of the lignin. The effect of MoO_3 concentration in the system was studied with 1, 3, 5 and 10%w/w. After 3 hours of irradiation, it was found that the 5%- $\text{MoO}_3/\text{g-C}_3\text{N}_4$ system had the best conversion yield (26,1%). To better understand this phenomenon, X-ray diffraction (XRD), diffuse reflectance spectroscopy (DRS), X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and Fourier-transform infrared spectroscopy (FT-IR) were made. In literature it has been reported a Z-scheme heterojunction where the CB electrons of MoO_3 recombines with the VB holes of $\text{g-C}_3\text{N}_4$ allowing the generation of oxidizing species (O^{2-}) in the CB of $\text{g-C}_3\text{N}_4$ and reducing species ($\text{OH}\bullet$) in the VB of MoO_3 [1, 2].

Acknowledgments

The authors are thankful for the financial support of Millennium Nuclei on Catalytic Processes Towards Sustainable Chemistry (CSC). The work and collaboration with Molymet are also acknowledge.

References

- [1] Zhijie Xie et al. (2018), doi.org/10.1016/J.APCATB.2018.02.011
- [2] Lishuo Liu et al. (2021), doi.org/10.1016/J.CHEMOSPHERE.2021.131049

T503: Aplicaciones de nanotecnología para el medio ambiente y economía circular

Felipe Gamboa-Savoy

*Facultad de ciencias
naturales, matemática y
medioambiente, UTEM*

Natalia Hassan

*Programa Institucional de
fomento a la
Investigación, Desarrollo
e Innovación, UTEM*

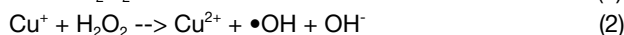
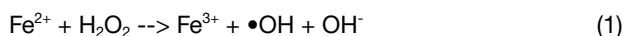
Abdoulaye Thiam

*Programa Institucional de
fomento a la
Investigación, Desarrollo
e Innovación, UTEM*

Síntesis y aplicación de compósitos ternarios con estructura core-shell para la remediación de antibióticos

Los procesos electroquímicos de oxidación avanzada foto-asistidos basados en la reacción de Fenton, son tecnologías prometedoras para la eliminación de contaminantes orgánicos en agua. Entre ellos encontramos el proceso Fotoelectro-Fenton, el cual consiste en la electrogeneración de H_2O_2 que reacciona con iones ferrosos para producir radicales hidroxilos ($\bullet OH$), mediante la reacción de Fenton. Los $\bullet OH$ son especies altamente reactivas que pueden reaccionar no selectivamente con una amplia variedad de contaminantes. Además, el uso de luz UV o visible permite mejorar el proceso, regenerando el catalizador, por la fotólisis de los complejos de hierro, y evitando en cierta medida la formación de lodos con contenido de hierro. Sin embargo, estos procesos tienen limitaciones como su estrecho rango de pH, dificultad para recuperar el catalizador y la generación de lodos con contenido de hierro que limitan su aplicación a nivel industrial [1].

Recientemente, se ha propuesto el uso de nanocatalizadores heterogéneos a base de hierro o cobre como alternativa a los procesos homogéneos convencionales. Estos catalizadores promueven la reacción de Fenton y tipo Fenton, según las ecuaciones (1) y (2), en la superficie del material, evitando en gran parte la lixiviación de especies de hierro [2]. Además, el desarrollo de nuevos compósitos con actividad foto-catalítica ha despertado gran interés debido a sus interesantes aplicaciones en procesos foto-asistidos. Por ejemplo, los compósitos con estructura core-shell a base de $Fe_3O_4@MIL-100$ (Fe) presentan características foto-catalíticas interesantes para procesos Foto-Fenton heterogéneos. La generación del par eCB^-/hVB^+ en materiales core-shell ha demostrado ser útil para la regeneración de los catalizadores de Fenton en este tipo de procesos [3]. De hecho, algunos investigadores han propuesto la adición de óxido de grafeno (GO) para mejorar la transferencia electrónica entre la carcasa y el núcleo del material, lo que podría mejorar la regeneración del catalizador y aumentar la eficiencia de producción del $\bullet OH$ [4].



En este trabajo, se propone la síntesis de un compósito magnético ternario ($CuFe_2O_4@GO@MIL-100$ (Fe)) a partir de nanopartículas de ferrita de cobre ($CuFe_2O_4$) recubiertas por óxido de grafeno (GO) y MIL-100 (Fe) para la degradación de antibióticos mediante procesos Fotoelectro-Fenton heterogéneos. El material fue caracterizado (SEM, EDS, FT-IR y DRS) y aplicado en la degradación de contaminantes. Se estudió el efecto de algunos

parámetros de operación (densidad de corriente, concentración de catalizador y concentración de contaminante) y la reciclabilidad del material después de ciclos consecutivos de degradación.

Agradecimientos

Los autores agradecen a ANID (Chile) por el apoyo financiero del proyecto FONDECYT N° 1210343.

Referencias

- [1] Deng F. & Brillas E. (2023), doi.org/10.1016/j.seppur.2023.123764
- [2] Ding R. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.apcatb.2021.120069
- [3] He W. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.cej.2020.128274
- [4] Gong Q. et al. (2019), doi.org/10.1016/j.jhazmat.2019.03.019

T504: Applications of Nanotechnology for the Environment and Circular Economy

Natural-based nanocomposite reinforced by Hydroxyapatite nanoparticles as a water reservoir for agriculture use

María Javiera
Guarda-Reyes
*Nano-Biotechnology
Laboratory, Universidad
de La Frontera, Temuco,
Chile; Doctorado en
Ciencias de Recursos
Naturales, Universidad de
La Frontera, Temuco,
Chile*

Marcela Calabi-Floody
*Nano-Biotechnology
Laboratory, Universidad
de La Frontera, Temuco,
Chile; Scientific and
Biotechnological
Bioresource Nucleus
(BIOREN-UFRO),
Universidad de La
Frontera, Temuco, Chile*

María de la Luz Mora
Gil
*Scientific and
Biotechnological
Bioresource Nucleus
(BIOREN-UFRO),
Universidad de La
Frontera, Temuco, Chile*

Humanity's growing population faces many challenges in a climate change scenario, such as drought. Water scarcity is a substantial impediment to the growth of crop species and represents a crisis for food security. Therefore, the development of agronomic strategies for the reduction of drought stress in crops is a crucial priority. Superabsorbent hydrogels (SAHs) have extensive applications in agriculture and have proven to be very beneficial for plant growth and soil health; however, most commercially available hydrogels are derived from petroleum and are difficult to degrade in soil, so migrating to strategies with eco-friendly, non-toxic materials is necessary. Carboxymethylcellulose (CMC) and hydroxyethylcellulose (HEC) are natural-based polymers that can be used to synthesize environmentally friendly superabsorbent hydrogels for numerous applications. However, these biopolymers result in hydrogels with poor mechanical properties. Different fillers can be used to improve this property, but occasionally they can decrease the swelling capacity. Hydroxyapatite nanoparticles (HANps) are an excellent option to improve hydrogel characteristics since it can generate more stable structures. CMC/HEC/HANps nanocomposites were synthesized, and Fourier Transformed Infrared Spectroscopy (FTIR) was used to confirm the crosslink reaction. The water swelling properties of the nanocomposite were optimized through design of experiments (DoE), with a 3 level factorial design of the nanoparticle loading and crosslinker. The water absorption analysis indicated that the SANs can be classified as superabsorbent since all of them show an absorption capacity above 100 g g^{-1} . Besides that, HANps played an essential role in the water absorption capacity, and the incorporation of 5% of HANps with 2 - 3% citric acid resulted in a material with a degree of swelling of approximately 800 g g^{-1} . The developed hydrogels showed unique characteristics, being adequate for agricultural systems aiming for water delivery to the soil. Further studies regarding the synthesis method and mechanical performance for the assessment of adequate application in soil.

Acknowledgments

ANID/FONDECYT NATIONAL DOCTORAL SCHOLARSHIP N° 21211542; ANID/FONDECYT Regular project N° 1230084; ANID/FONDECYT Regular project N° 1201375.

References

- [1] Demitri C. et al. (2018), doi.org/10.1002/app.28660
- [2] Saha A. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.still.2020.104736
- [3] Che Nan N. et al. (2022), doi.org/10.1002/ceat.202200270

Anionic Zn(II) MOFs as new candidates for the removal of heavy metal in aqueous solutions

Claudio A. Jiménez
Faculty of Chemical Sciences, Universidad de Concepción, Concepción, Chile

Bárbara Salgado
Faculty of Chemical Sciences, Universidad de Concepción, Concepción, Chile

Bruno Urbano
Faculty of Chemical Sciences, Universidad de Concepción, Concepción, Chile

Jorge Pasán
Faculty of Sciences, Universidad de La Laguna, Tenerife, Spain

This work presents the synthesis and characterization of two MOFs (Metal-Organic Frameworks) obtained by solvothermal synthesis, using two bis-amide-tetra-carboxylate ligands and a Zn(II) ion [1]. The organic connectors are obtained in excellent yields by coupling between terephthaloyl dichloride (L1) or its equivalent 2-nitro derivative (L2) and two 5-aminoisophthalic acid units.

The materials obtained have been characterized by single crystal X-ray diffraction, where they correspond to supramolecular anionic and doubly interpenetrated networks. The asymmetric units in both cases are composed of one molecule of the organic ligand, one atom of Zinc, two molecules of dimethylammonium, and one molecule of crystallization dimethylacetamide. The introduction of the nitro group into the connector structure generates subtle changes in the final crystalline packing [2]. Here the network formed by [L1Zn][(CH₃)₂NH₂]₂·DMA, crystallizes in the monoclinic space group P2₁/n and possesses a trapezoidal network (Figure). However, for [L2Zn][(CH₃)₂NH₂]₂·DMA, the one crystallizing in the triclinic space group P-1, a diamondoid network is formed.

Even the close structural relationship between both MOFs, only [L1Zn] possess an adequate thermal stability reaching 200 °C without losing the crystalline phase and is stable in solvents such as acetone or methanol. The preliminary results for removal heavy metals have showed impressive results with 549,30 mg/g⁻¹ of Pb(II) from water solution, until now the best performance of a MOF removing this metal [3]. Nowadays experiment to understand the adsorption mechanism and the selectivity in front of other important contaminant such as Cd(II) or Hg(II) are been development.

Acknowledgments

ANID FONDECYT 1221631/ANID ANILLO ACT210059/ANID FONDEQUIP EQM200138 and Project PID2020-115004RB-I00.

References

- [1] Zheng, B. et al. (2013), doi.org/10.1039/C3CE26177H
- [2] Song, C. et al. (2014), doi.org/10.1039/C4CC04272G
- [3]. Cui, H. et al. (2020), doi.org/10.1021/acs.inorgchem.0c02427
- [4] Yu, C-X. et al. (2020), doi.org/10.1021/acs.cgd.0c00437

Hernán Escobar Sánchez

*Universidad de
Concepción*

Gonzalo Recio
Sánchez

*Universidad San
Sebastián*

Noelia Benito

*Universidad de
Concepción*

Ivan Nancucheo

*Universidad San
Sebastián*

Plasmonic and photothermal effects of CuS nanoparticles biosynthesized from acid mine drainage with potential biomedical applications

Copper sulfide nanoparticles (CuS) are classified as p-type semiconductors and exhibit a low-toxic nature, making them safe for use in therapeutic applications. One of their key features is the local surface plasmon resonance (LSPR) effect, which occurs in the near-infrared (NIR) range. This property enables efficient absorption and conversion of light energy, leading to photothermal effects that can be utilized for various biomedical purposes [1,2].

Conventionally, CuS nanoparticles are synthesized using chemical techniques such as solvothermal and hydrothermal processes [3]. However, the presented study employed a novel approach to recover CuS nanoparticles from real acid mine drainage. This method involved the utilization of a sulfidogenic bioreactor, which harnesses the metabolic processes of microbes to convert metal ions into their sulfide form. This innovative biotechnology not only provides a sustainable and eco-friendly method for obtaining CuS nanoparticles but also contributes to the remediation and recycling of metal content in mine wastewaters, promoting a circular economy by transforming waste materials into valuable resources [4].

The physical-chemical properties of the recovered CuS nanoparticles were studied, revealing their plasmon resonance absorption and photothermal effects within the NIR range. These properties make them particularly suitable for designing and synthesizing nanostructures intended for drug delivery applications. To this purpose, a mesoporous silicon structure was utilized as a support for the CuS nanoparticles, which were functionalized to enhance their stability, biocompatibility, and serve as a support structure for the CuS nanoparticles. This combination of materials enables the development of advanced nanostructures that offer precise and controllable delivery of therapeutic treatments, presenting highly promising prospects for future biomedical applications.

Acknowledgments

FONDECYT REGULAR 1230412, USS, UDEC.

References

- [1] Qiwei Tian et al (2011), doi.org/10.1002/adma.201101295
- [2] Zheng, Shaohui et al. (2020), doi.org/10.1007/s10853-019-04062-x
- [3] Saranya, M. et al. (2014), doi.org/10.1080/17458080.2012.661471
- [4] Nancucheo, Ivan et al. (2022), doi.org/10.1016/j.jece.2022.107409

T509: Aplicaciones de nanotecnología para el medio ambiente y economía circular

Diseño, fabricación y prueba de cámara para medir resistividad en materiales sensores de gas

Ximena Villa B.
Departamento de Ingeniería Civil Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile

Rodrigo Espinoza G.
Departamento de Ingeniería Civil Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile

Francisco Gracia C.
Departamento de Ingeniería Civil Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile

Dario Zambrano
Departamento de Ingeniería Civil Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile

La creciente preocupación mundial por el deterioro del medio ambiente y los riesgos para la salud han estimulado el interés en medios de detección y control de sustancias químicas potencialmente tóxicas o nocivas para el medio ambiente. Para satisfacer estas demandas se requieren tecnologías cada vez más sofisticadas y portátiles, capaces de funcionar en condiciones adversas y capaces de detectar la creciente gama de especies químicas que se liberan al ambiente [1]. Dado que la mayoría de las industrias utilizan o liberan gases en sus procesos, es crucial desarrollar detectores de alta sensibilidad cuya función principal sea proteger a las personas y medio ambiente. Entre las especies gaseosas de interés se consideran gases tóxicos, de efecto invernadero, compuestos orgánicos volátiles y contaminantes atmosféricos [2].

Entre los materiales más usados en sensores de gas están los óxidos metálicos semiconductores, como el SnO₂, que basan su funcionamiento en un estímulo de entrada provocado por una adsorción gaseosa que produce un cambio en la resistencia del material [3], cuya medida se relaciona con la concentración del gas. Estos materiales han atraído amplia atención por su bajo costo, su compatibilidad con los sistemas electrónicos, la simplicidad de su uso y la capacidad de detectar un gran número de gases tóxicos y volátiles en diferentes condiciones ambientales.

El presente trabajo muestra el diseño y fabricación de una cámara que permita estudiar el comportamiento resistivo de nanopartículas de SnO₂, tomando como referencia este compuesto que tiene parámetros y comportamientos conocidos [4]. El diseño de la cámara se realizó mediante simulaciones en el software COMSOL Multiphysics® para determinar las dimensiones y distribución interior que asegure un flujo laminar de gas en todas las muestras para mantener igualdad de presión y velocidad. Además, se diseñó y confeccionó el elemento sensor, formado por estructuras de electrodos interdigitalizados, donde se deposita el material sensible, montado junto a un electrodo calefactor, ambos elementos depositados sobre alúmina mediante magnetron sputtering. Previo al depósito de Pt, se prepararon máscaras de resina sobre la alúmina mediante litografía láser en cámara limpia, las que son retiradas por inmersión para dejar expuestos los electrodos de trabajo.

Esta configuración permite el control de la temperatura sobre el material sensible y, las medidas de variación de resistencia eléctrica que se correlaciona con la detección de un gas de prueba, siendo todo controlado un programa diseñado mediante LabView®. Actualmente, se están realizando las pruebas de detección de gases oxidantes y reductores en el montaje descrito, utilizando como referencia nanopartículas de SnO₂ preparadas mediante síntesis

hidrotermal y de origen comercial.

Agradecimientos

Proyecto ACT210059; Proyecto FONDECYT 1231474.

Referencias

- [1] Rothschild, A. et al. (2006), doi.org/10.1007/s10832-006-6737-y
- [2] Aswal, D. K., & Gupta, S. K. (2007), doi.org/10.1016/j.jcis.2007.04.051
- [3] Paladiya, C., & Kiani, A. (2018), doi.org/10.1016/j.snb.2018.04.085
- [4] Lin, Z. et al. (2012), doi.org/10.1016/j.snb.2012.04.057

T510: Aplicaciones de nanotecnología para el medio ambiente y economía circular

Detección electroquímica simultánea de Bisfenol-A y Bisfenol-S en aguas utilizando un sensor híbrido de óxido de grafeno y nanopartículas de hierro

Ricardo
Salazar-González
Universidad Católica

Samuel Piña
USACH

Alejandra
García-García
CIEMAT

Alejandra
Moreno-Bárceñas
CIEMAT

Pamela Sepúlveda
UMAYOR

En este trabajo se desarrolló un nuevo sensor electroquímico para la determinación simultánea de Bisfenol-A (BPA) y Bisfenol-S (BPS) en un efluente secundario de una planta de tratamiento de aguas residuales y en agua superficial. El diseño del sensor implicó el uso de un electrodo de carbono vítreo modificado con nanopartículas de hierro híbridas y óxido de grafeno. En la determinación de las características y composición de los materiales, estos fueron caracterizados mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), y de transmisión (TEM), espectroscopía de energía dispersiva de rayos X (EDS), difracción de rayos X (DRX) y microscopía Raman. El material sintetizado mostró una heteroestructura estable, facilitando una transferencia electrónica eficiente y exhibiendo una destacable capacidad electrocatalítica. Los picos de oxidación de BPA y BPS presentaron una separación de 0.28 V, confirmando el excelente rendimiento del sensor. Para la optimización del método, se empleó una herramienta quimiométrica basada en un diseño de superficie de respuesta de tipo Circunscrito Centrado en las Caras (CCF). Las condiciones optimizadas proporcionaron una curva analítica con un rango lineal de 15,0 a 120,0 $\mu\text{mol L}^{-1}$ para BPA y de 20,0 a 70,0 $\mu\text{mol L}^{-1}$ para BPS. Los límites de detección y cuantificación para ambos compuestos fueron de 12,05 \pm 0,42 y 36,51 \pm 1,27 $\mu\text{mol L}^{-1}$, respectivamente. El método electroquímico desarrollado se validó comparándolo con HPLC-DAD. Es importante destacar que el método electroquímico demostró ser altamente efectivo en la detección y cuantificación simultánea de BPA y BPS en un efluente secundario y agua superficial.

Agradecimientos

Fondecyt 1220077 & FONDAP SERC-Chile 1522A0006.

Referencias

[1] Piña S. et al. (2021), doi.org/10.3390/chemosensors9050088

T511: Aplicaciones de nanotecnología para el medio ambiente y economía circular

Imogolita a partir de polvos de hornos de cemento para la remoción de arsenito

Aixa González

*Universidad Católica de
Temuco, Temuco, Chile*

Karen

Manquián-Cerda

*Universidad de Santiago
de Chile, Santiago, Chile*

Tamara Maldonado

*Universidad Católica de
Valparaíso, Chile*

Raúl Calderón

*Universidad Bernardo
O'Higgins, Chile*

Nicolás

Arancibia-Miranda

*Universidad de Santiago,
Santiago, Chile*

Imogolita [1] es un material nanotubular compuesto por aluminio, oxígeno y silicio principalmente, que es útil para la construcción de nuevos materiales en nanotecnología [2]. El presente estudio tuvo como dos objetivos, uno de ellos fue desarrollar un método simple de valorización de residuos para obtener imogolita a partir de polvos de los hornos de cemento (CKD) mediante la solubilización del residuo y la posterior precipitación de imogolita (Imo-CKD) en un proceso hidrotermal; mientras que el segundo fue probar la remoción de arsenito en medio acuoso en tests batch.

El material sintetizado (Imo-CKD) y una imogolita convencional (Imo [1]) mostraron resultados similares respecto a parámetros físicos como el diámetro (\varnothing) y longitud (L) de los nanotubos [$\varnothing \approx 1.9$ nm y $L \approx 200$ nm] y el grado de cristalinidad. Sin embargo, se observaron valores diferentes del punto isoeléctrico, alcanzando Imo-CKD e Imo, valores de 8,86 y 9,92, respectivamente. El valor inferior de Imo-CKD se le atribuyó a la presencia de alofán como subproducto obtenido durante su síntesis [3]. Los tests de remoción en medio acuoso se realizaron para ambas imogolitas, mostrando durante la cinética un proceso rápido ($t \leq 20$ min). Además los datos de remoción cinética de As(III) obedecieron al modelo de pseudo segundo orden, mientras que la difusión superficial también controló el proceso de adsorción de As(III). La energía de activación mayor a 40 kJ/mol sugirió una adsorción química de As(III) para ambos materiales [4]. Los estudios de remoción a diferentes temperaturas mostraron una espontaneidad del proceso, obteniendo una remoción más eficaz para Imo-CKD con un valor de 0,377 mmol/g, a pesar de la formación de subproductos alofánicos en el proceso de síntesis. Los resultados de este estudio pudieran promover la producción de imogolita a un menor costo en base a CKD, reemplazando un material costoso como el tetraetil ortosilicato [1,3] y su potencial uso en la remoción de contaminantes en el medio acuoso.

Agradecimientos

Los autores agradecen a los proyectos FONDECYT 1191018, 11150088, y PAI 77190014.

Referencias

- [1] Farmer et al. (1977), doi.org/10.1039/C39770000462
- [2] Amara et al. (2015), doi.org/10.1021/cm503428q
- [3] Arancibia-Miranda et al. (2011), doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2011.01.012
- [4] Weber and Morris (1963), doi.org/10.1061/JSEDAI.0000430

T512: Aplicaciones de nanotecnología para el medio ambiente y economía circular

Microesferas de nanocelulosa bacteriana multifuncionales funcionalizadas con nanopartículas magnéticas de ferrita y puntos de carbono para la adsorción de plomo en agua

Fabián Henríquez
*Universidad Católica de
la Santísima Concepción,
Chile*

Sivaraj Ramasamy
*Universidad Católica de
la Santísima Concepción,
Chile*

Elizabeth Elgueta
*Universidad Católica de
la Santísima Concepción,
Chile*

Patricio Oyarzún
*Universidad San
Sebastián, Chile*

Dariela Núñez
*Universidad Católica de
la Santísima Concepción,
Chile*

La contaminación por metales pesados en agua dulce es un problema ambiental grave, ya que estos elementos son tóxicos para la vida, no son biodegradables y se acumulan en los organismos, desplazándose a través de la cadena trófica hasta llegar a los seres humanos. La exposición a este tipo de compuestos se relaciona con problemas a la salud, tales como diferentes tipos de cáncer e incluso la muerte. Es por esto que existen normativas exigentes que restringen su concentración en las aguas que son utilizadas para regadío, aguas para consumo humano e incluso en las descargas de efluentes industriales, requiriendo de tratamiento en caso de sobrepasar estos límites. Los materiales adsorbentes ofrecen ventajas frente a otras tecnologías, ya que su aplicación es simple, económica y eficiente, en especial frente a contaminantes que se encuentran en bajas concentraciones. Los materiales multifuncionales son una alternativa versátil ya se pueden adaptar a las problemáticas de forma integral ofreciendo características adicionales que facilitan su uso. Utilizando esta perspectiva, en esta investigación se desarrolló un material adsorbente compuesto de nanocelulosa bacteriana, nanopartículas magnéticas de ferrita y puntos de carbono (CB-MNPs-CDs) que además de remover plomo desde fuentes acuosas, permite su fácil separación post-uso gracias a las propiedades magnéticas otorgadas por las nanopartículas magnéticas de ferrita, respondiendo también a la presencia de metales debido a la disminución de la luminiscencia de los puntos de carbono. La caracterización química, física y morfológica de las microesferas multifuncionales de CB-MNPs-CDs se realizó a través de espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR), espectroscopía UV-VIS, fluorimetría, magnetometría de muestra vibrante (VSM) y microscopía electrónica de barrido (SEM). Por otro lado, las propiedades adsorbentes de las microesferas se estudiaron utilizando plomo (II) como contaminante modelo y su eliminación se determinó en función del tiempo, pH y concentración inicial de Pb (II). Los resultados cinéticos mostraron que el fenómeno de adsorción ocurre en poco tiempo, sin observarse mayores diferencias en las capacidades de adsorción obtenidas entre tiempos de contacto de 10 min y 3 horas. Asimismo, en los estudios de pH no se observan grandes diferencias en las capacidades de adsorción entre los pHs 3, 4 y 5, lográndose una capacidad de adsorción levemente mayor a pH 5. Finalmente, se estudió la pérdida de luminiscencia del material en presencia de diferentes concentraciones de

Pb(II), notándose una disminución en la luminiscencia a medida que la concentración del ion metálico aumenta. Así, las microesferas de CB-MNPs-CDs propuestas en esta investigación presentan una multifuncionalidad que brinda una solución holista al problema de la contaminación por metales pesados.

Agradecimientos

Fondecyt 11190913.

Referencias

- [1] Andriani et al. (2020), doi.org/10.1007/s10570-020-03273-9
- (2) Li et al. (2020), doi.org/10.1016/j.cej.2019.123127
- (3) Núñez et al. (2020), doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2020.10.055
- (4) Sriplai et al. (2021), doi.org/10.1016/j.carbpol.2020.117228
- (5) Chen et al. (2022), doi.org/.1016/j.cej.2021.133154

T513: Applications of Nanotechnology for the Environment and Circular Economy

Natalia Juica
*Universidad de Santiago
de Chile*

Gonzalo Bustos
*Universidad de Santiago
de Chile*

Nicolas Oneto
*Universidad de Santiago
de Chile*

Raul Guajardo
Universidad SEK

Luis Constandil
*Universidad de Santiago
de Chile*

Lignin nanoparticles as a carrier for biopesticides: characterization and evaluation against a Chilean plague

Lignin nanoparticles have received significant interest in recent years because of their non-toxic biocompatible and biodegradable properties. Several studies report molecules encapsulation, drug delivery and UV protection which highlight the potential of these nanoparticles as an effective tool for the delivery of compounds in several fields including agriculture. In this regard the use of biopesticides for a sustainable pest control remains a challenge because of high volatility and degradation of these compounds under field conditions. Thus, the encapsulation of biopesticides in biopolymeric nanoparticles emerges as a promising system that provides protection to the encapsulated compound, a sustained release, and a reduction of the applied biopesticide, contributing to efficient pest control in organic agriculture. The aim of this work was to synthesize and characterize geraniol-loaded lignin nanoparticles and to evaluate the acaricidal effect of these against *Brevipalpus chilensis*, a Chilean pest that affects grapevine fields.

Nanoparticle size, polydispersion and surface charge were determined by dynamic light scattering, while nanoparticle morphology was observed by scanning transmission electron microscopy. Encapsulation efficiency was evaluated using the extraction method and subsequent quantification by UPLC. Also, UV-exposition assays were performed to compare encapsulated and free geraniol degradation. Finally, bioassays were performed in *Brevipalpus chilensis*. Specifically nanoparticles solutions were sprayed on mites situated on a leaf disk and mortality and repellence were evaluated at 24h, 48h and 72h.

The nanometric size and highly negative surface charge of geraniol loaded lignin nanoparticles (200.9 ± 27.2 nm and -29.4 mV respectively) reflects the effectivity of nanoprecipitation method and the stability of the synthesized nanoparticles in aqueous suspension. The above was associated with a spherical morphology. An encapsulation efficiency of 45% was obtained which is similar to that reported for this type of nanoparticles. UV- exposition assays showed less degradation of encapsulated geraniol compared to the free compound suggesting that the encapsulation of geraniol on lignin nanoparticles protects against UV degradation which could lead to a decrease the concentration of biopesticides to be applied in crops. Finally, bioassays performed in *Brevipalpus chilensis* showed a significant increase in mortality after 72h of exposure, and also a significant increase in repellence was observed when compared to free compound.

Our results suggest that lignin nanoparticles have the potential to be used as a platform for the delivery of biopesticides by protecting the encapsulated compound and increasing the pesticidal activity when applied to the pest of interest.

Acknowledgments

Los autores agradecen a Beca doctoral ANID 21202082, y a CEDENNA.

References

- [1] Agustin M. et al. (2019), doi.org/10.1021/acssuschemeng.9b05445
- [2] Lammari N. et al. (2020), doi.org/10.3390/pharmaceutics12050431

T514: Aplicaciones de nanotecnología para el medio ambiente y economía circular

Nanopartículas de BTN@ZnO:Tierras Raras como fotocatalizadores para la degradación del sulfametoxazol

Sebastián Campos-Milla

Grupo de Investigación de Análisis, Tratamiento, Electroquímica, Recuperación y Reúso de Agua (WATER2), Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile

Wendy Calzadilla

Grupo de Investigación de Análisis, Tratamiento, Electroquímica, Recuperación y Reúso de Agua (WATER2), Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile

Diego Venegas-Yazigi

Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y la Nanotecnología, CEDENNA, Santiago, Chile

Sandra Fuentes

Departamento de Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Ciencias, Universidad Católica del Norte, Antofagasta, Chile

Ricardo

Salazar-González

Grupo de Investigación de Análisis, Tratamiento, Electroquímica, Recuperación y Reúso de Agua (WATER2), Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile

El sulfametoxazol (SMX) es un antibiótico perteneciente a la familia de las sulfonamidas (SA), ampliamente utilizado para el tratamiento de enfermedades infecciosas causadas por bacterias aeróbicas grampositivas y gramnegativas. Además, el SMX se usa en aditivos para el crecimiento animal. La presencia de residuos provenientes de las SA provoca efectos negativos en el ecosistema, como resistencia genética y microbiana e intoxicación de algunas plantas y algas. Por lo tanto, es de gran importancia eliminar eficazmente el SMX en el ecosistema acuático para la protección del medio ambiente. Como técnica respetuosa con el medio ambiente se encuentra la fotocatálisis mediada por semiconductores para la desinfección y remediación del agua. Se ha estudiado ampliamente el uso de semiconductores en la degradación de contaminantes, especialmente heteroestructuras como BaTiO₃/ZnO. El uso de estos nanomateriales dopados con tierras raras ha presentado aplicaciones tecnológicas en dispositivos eléctricos, y en la eliminación de contaminantes en matrices acuosas, donde se centra el presente estudio [1, 2].

En el presente trabajo se sintetizó y caracterizó nanomateriales de BTN@ZnO dopados con tierras raras (Eu, Er e Yb) en tres proporciones diferentes 1, 3 y 5 % (mol). Se utilizó microscopía electrónica de barrido (SEM), y de transmisión (TEM), espectroscopía de energía dispersiva de rayos X (EDS), difracción de rayos X (DRX) y microscopía Raman para una completa caracterización de los nanomateriales. Se determinó antes de la degradación, la adsorción del SMX en los nanomateriales sin irradiar la disolución, donde se determinó que en todos los nanomateriales la adsorción del SMX no es mayor al 5%. Para evaluar la capacidad fotocatalítica de los nanomateriales en la degradación de SMX utilizando la radiación proveniente de una lámpara UV 365nm. La degradación del SMX se siguió mediante HPLC-DAD, obteniendo así la degradación completa del SMX en dos horas de tratamiento, dentro de esos resultados, los más destacados para la degradación de SMX fueron con los nanomateriales de BTN@ZnO: Yb (1,3,5%) en las 3 proporciones distintas se logró una degradación total cercana a los 60 min de tratamiento.

Agradecimientos

Fondecyt 1220077 & FONDAP SERC-Chile 1522A0006.

Referencias

- [1] Luisa Patrolecco et al. (2018), doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.06.025
- [2] Yeny Lauzurique et al. (2023), doi.org/10.1016/j.jwpe.2023.103922.

T515: Applications of Nanotechnology for the Environment and Circular Economy

2D organic-inorganic nanostructures of mixed oxides applied to the degradation of pollutants and production of solar fuels

Matías Alegría Gómez
*Universidad Tecnológica
Metropolitana, Programa
de Doctorado en
Ciencias de los
Materiales e Ingeniería de
Procesos*

Pablo Cortés Orellana
*Universidad Tecnológica
Metropolitana, Programa
de Doctorado en
Ciencias de los
Materiales e Ingeniería de
Procesos*

Juan Aliaga Ancavil
*Universidad Tecnológica
Metropolitana, Facultad
de Ciencias Naturales,
Matemáticas y del Medio
Ambiente, Departamento
de Química*

Guillermo González
Moraga
*Universidad de Chile,
Facultad de Ciencias,
Departamento de
Química*

Eglantina Benavente
Espinosa
*Universidad Tecnológica
Metropolitana, Facultad
de Ciencias Naturales,
Matemáticas y del Medio
Ambiente, Departamento
de Química*

With the rapid industrial development worldwide and human activities, large amounts of organic pollutants have been released, significantly threatening ecosystems and people's health. Along with this, burning fossil fuels continually generates vast volumes of toxic gases, contributing significantly to climate change. Due to the natural abundance of sunlight and the depletion of fossil fuels, photocatalysis is presented as an environmentally friendly green technology used to convert photon energy into chemical energy. This energy can be used to decontaminate wastewater and as a source of clean energy that gradually replaces fossil fuels [1]. This research presents two-dimensional (2D) organic-inorganic nanocomposites of mixed oxides of zinc and copper functionalized with self-assembled monolayers of stearic acid (SA), applied to the adsorption/degradation of organic pollutants (indigo carmine and 4-chlorophenol) and the production of hydrogen under sunlight.

The composition, structure, morphological and optical properties of the products obtained were characterized by X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM), Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR), photoluminescence (PL) and diffuse reflectance spectroscopy (DRS). The adsorption/degradation studies indicated that the organic-inorganic mixed oxide material with 5 % copper ($Zn_{0.95}Cu_{0.05}O$ -SA) presented the highest photocatalytic activity, degrading 100% indigo carmine and 65% 4-chlorophenol after two hours of irradiation with simulated sunlight. It is proposed that the photodegradation of the dye and pesticide in the presence of the prepared materials occurs by the adsorption of pollutant molecules on the surface of the solid. The number of active sites available limits this process. Then the degradation of the adsorbed pollutant occurs, produced by the action of the active species generated in the photocatalyst when irradiated with sunlight; with this, the active sites for adsorption become vacant again and finally, the adsorption of new molecules present in the solution on the vacant active sites of the material.

The multifunctional nanomaterials proposed in this research can act as adsorbents and photocatalysts for organic pollutants, in addition to being highly efficient products for the production of solar fuels. Specifically, the $Zn_{0.95}Cu_{0.05}O$ -SA material produced 502.4 μmol of hydrogen after two hours of solar irradiation, representing three times higher performance than the material without Cu^{+2} ions. Therefore, the preparation of mixed oxides of Zn-Cu with the incorporation of a surfactant to favour the obtaining of laminar semiconductor materials is presented as an excellent strategy to create highly efficient photocatalytic systems, optimized based on rapid separation of excitons, the low recombination rate of the electron-hole pair, high concentration of active sites and efficient absorption of visible light.

Acknowledgments

The authors recognize the financial support from FONDECYT N° 11200609 and the Scientific and Technological Equipment fund, year 2022, code LE21-03 (UTEM). Matías Alegría would like to acknowledge the financial support provided by Doctoral Scholarship N° 21232377.

References

[1] Benavente et al. (2020), doi.org/10.1007/s11244-020-01360-6

T516: Aplicaciones de nanotecnología para el medio ambiente y economía circular

Inhibición de biofilm mediante compósitos con nanotubos de carbono de pared múltiple

Barbara Arce Lopez
Laboratorio de nanobiomateriales, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso

Dra. Carolina Parra
Laboratorio de nanobiomateriales, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso

Dra. Juliet Aristizabal
Laboratorio de nanobiomateriales, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso

Elsie Zurob
Universidad de Santiago de Chile

Dra. María Jose Vargas
Laboratorio de nanobiomateriales, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso

La formación de biofilm es un efectivo mecanismo de supervivencia que microorganismos, tales como bacterias, utilizan al colonizar superficies en contacto con ambientes acuáticos [1]. Existe evidencia de propiedades bactericidas e inhibidoras de la adhesión en nanomateriales, y en particular de los nanotubos de carbono [2-4], por su capacidad de destruir la pared celular de algunas bacterias que forman biofilm. Estos nanomateriales al ser aplicados tempranamente en superficies podrían ayudar a reducir el biofouling que aparece consecuentemente de la formación de biofilm.

En base a esto se presenta el desarrollo de recubrimientos en base a resina y pintura comerciales modificadas con nanotubos de carbono, para estudiar la interacción de microorganismos generadores de biofilm con superficies recubiertas con compósitos nanoestructurados en ambiente de laboratorio y en tres ambientes reales con el fin de reducir o retrasar la formación de biofilm y biofouling.

Se optimizó la síntesis de nanotubos de carbono de pared múltiple preparados en síntesis CVD [5] y se preparan compósitos de nanotubos de carbono sobre resinas y pinturas comerciales que fueron expuestos a condiciones de formación de biofilm. La interacción con microorganismos se estudia para distintas concentraciones de nanomaterial: en laboratorio con el microorganismo *Enterobacter cloacae* sp., y en ambiente real se expone a tres ambientes acuáticos naturales: en el molo de Abrigo de Valparaíso expuesto a condiciones de la bahía, en río Grande, Tierra del Fuego en un sector contaminado por el microorganismo invasor *Dydimosphenia geminata*, microalga productora de biofilm, y se realizan pruebas preliminares en el mar en dos puntos de la Antártica Chilena cerca de Islote Shoa y la base Artigas.

Agradecimientos

Proyecto PMI InES FSM1402_B_27, FONDEF IDEA ID21110171, Proyecto Interno Innovación USM PI_IN_2020_48 (2020), Armada de Chile, Centro de investigación IDEAL, Instituto de Ciencias Ambientales y Evolutivas UACH.

Referencias

- [1] Verderosa A. D. et al. (2019), doi.org/10.3389/fchem.2019.00824
- [2] Upadhyayula V. K. K. et al. (2010), doi.org/10.1016/j.biotechadv.2010.06.006
- [3] Tsou C. et al. (2017), doi.org/10.3390/polym9030100
- [4] Jing H. et al. (2018), doi.org/10.1016/j.scitotenv.2018.03.065
- [5] da Cunha T. H. R et al. (2018), doi.org/10.1016/j.carbon.2018.03.014

Aplicación de nanopartículas de Fe₂O₃-Ni y MgO-Ni para la degradación de florfenicol mediante procesos Fenton y foto-Fenton heterogéneo

Pamela Sepúlveda
Centro de Nanotecnología Aplicada (CNAP), Facultad de Ciencias, Ingeniería y Tecnología, Universidad Mayor, Chile

Juliano Denardin
Departamento de física y Centro para el Desarrollo de la Nanociencia y la Nanotecnología (CEDENNA), Universidad de Santiago de Chile.

Sebastián Campos
Grupo de Investigación de Análisis, Tratamiento, Electroquímica, Recuperación y Reúso de Agua (WATER2), Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile

Wendy Calzadilla
Grupo de Investigación de Análisis, Tratamiento, Electroquímica, Recuperación y Reúso de Agua (WATER2), Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de Chile

Ricardo Salazar-González
Grupo de Investigación de Análisis, Tratamiento, Electroquímica, Recuperación y Reúso de Agua (WATER2), Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Química y de Farmacia, Pontificia Universidad Católica de

La aplicación de materiales a escala nanométrica ha surgido como una alternativa prometedora para su utilización en diversos campos de la ciencia. En este contexto, la síntesis y aplicación de nanomateriales con características catalíticas ha favorecido considerablemente la utilización de diversas tecnologías de remoción de contaminantes acuosos [1]. Particularmente, los procesos de oxidación avanzados, específicamente Fenton (-like) y foto-Fenton (-like) heterogéneos son una alternativa eficiente para degradar contaminantes orgánicos, como antibióticos presentes en matrices acuosas [2]. En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización de nanomateriales de Fe₂O₃-Ni y MgO-Ni y su aplicación en la degradación de florfenicol mediante procesos Fenton, Fenton-Like, foto-Fenton y foto-Fenton Heterogéneo. Para determinar las características de los materiales, estos fueron caracterizados mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), y de transmisión (TEM), espectroscopía de energía dispersiva de rayos X (EDS) y difracción de rayos X (DRX), observando estructuras laminares con nanopartículas pseudo esféricas sobre estas en ambas nanopartículas, identificando además mediante DRX la presencia de Fe₂O₃, MgO, Ni y NiO en las nanoestructuras sintetizadas. Finalmente, los nanomateriales fueron aplicados en la degradación de florfenicol, determinado que el pH, dosis del nanomaterial, concentración del agente oxidante, tiempo y radiación solar influyen considerablemente en la remoción de este contaminante, siendo los nanomateriales a base de Fe quienes exhibieron un 100% de degradación bajo las siguientes condiciones experimentales: pH 3, 15 mg/L de florfenicol, 500 mg/L de nanomaterial, [H₂O₂]= 0,065 mol/L, [Na₂SO₄]= 0,001 mol/L, tiempo de reacción 45 min y radiación solar total de 930 W/m² y UV=38.6 W/m².

Agradecimientos

ANID-FONDECYT/Post-Doctoral N° 3200063, ANID/FONDECYT N° 11230166 y 1200782, ANID-FONDEQUIP EQM 190016.

Referencias

- [1] Hiller, C. X. et al. (2019), doi.org/10.1016/j.scitotenv.2019.05.315
[2] Oruç, Z. et al. (2019), doi.org/10.1016/j.jece.2019.103231

Micro and nanoencapsulation of a polyphenol-rich extract from Carménère grape pomace (*Vitis vinifera* L.) by Spray Drying and Ultrasonic Nanoemulsification

Paula Cornejo-Retamales

*Centro de Excelencia en
Nanotecnología (CEN)
Chile, Providencia,
Santiago, Chile*

Nicolás Nolan

*Centro de Excelencia en
Nanotecnología (CEN)
Chile, Providencia,
Santiago, Chile*

Ivanna Araya

*Centro de Excelencia en
Nanotecnología (CEN)
Chile, Providencia,
Santiago, Chile*

Pablo

Reyes-Contreras, Mirko
Faccini

*Centro de Excelencia en
Nanotecnología (CEN)
Chile, Providencia,
Santiago, Chile*

Paula

Valenzuela-Bustamante
*Centro de Excelencia en
Nanotecnología (CEN)
Chile, Providencia,
Santiago, Chile*

Grape pomace is the main solid residue from the maceration and fermentation stages of wine production, reaching approximately 8.49 million tons per year worldwide [1]. Carménère is the emblematic grape of Chile and is characterized by having a high concentration of polyphenols in the skin and lower levels of tannins in the seeds of the grape berry [2]. Previous studies have identified various polyphenols from Carménère grape pomace with antioxidant potential, mainly anthocyanins and flavonols [2,3]; however, these compounds are unstable and have poor solubility. Some solutions to these problems include micro and nanoencapsulations, which are a good alternative to improve the solubility and chemical stability of polyphenols.

The main objective of this study was to compare two techniques to encapsulate a polyphenol-rich extract from Carménère grape pomace. The extract (EET-50) was obtained by dynamic maceration with 50% ethanol at 50°C for 90 min. The extract was lyophilized, and the extraction yield was 15.06 ± 1.59 % (dry mass). Total Phenolic Content (TPC) was determined using the Folin-Ciocalteu assay, and Flavonoid Content (FC) was determined using the AlCl₃ colorimetric assay, with 140.87 ± 0.42 mg Gallic Acid Equivalent (GAE)/g dry extract (DE) and 5.97 mg Quercetin Equivalent/g DE, respectively. In addition, the radical scavenging activity of the extract was determined by DPPH assay, and the EC₅₀ value was 17.5 ± 0.8 µg/mL.

EET-50 was encapsulated at 0.1% (w/w). The first technique was by spray drying (Mini Spray Dryer B290, Buchi), using different proportions of maltodextrin as coating polymer (1:0.1; 5:0.1 and 10:0.1). The encapsulation yields were 57%, 83%, and 84% respectively, thus the yield increased with increasing polymer concentration. The particle size distribution was determined by scanning electron microscopy (SEM) with a particle size in the range of 3.0-8.0 µm. The encapsulation efficiency was calculated according to the TPC, and the surface polyphenol content (SPC) varied from 28% to 33%, while the encapsulated polyphenol content (EPC) varied from 63% to 67%. The highest encapsulation efficiency (71.18 ± 4.04 %) was achieved with maltodextrin at a ratio of 5:0.1. On the other hand, the ultrasonic nanoemulsification technique was based on an o/w nanoemulsion with lecithin, Tween 80 and medium-chain fatty acids. The particle size distribution was 225 ± 0.6 nm (Dx50) and 491 ± 0.3 nm (Dx90) determined by Mastersizer 3000 (Malvern) with an encapsulation efficiency of 90.95 ± 1.51 %.

Based on these results, it can be concluded that dynamic extraction with 50% ethanol is effective in recovering polyphenols from Carménère grape pomace. In addition, it was possible to obtain food-grade encapsulations systems using two different techniques, and the

nanoemulsion showed the highest polyphenol encapsulation efficiency. This vehicle, therefore, could have potential use in the development of functional food ingredients from winery wastes.

Acknowledgments

Financial support was provided by the Innovation Found for Competitiveness of the Chilean Economic Development Agency (CORFO) under Grant no. 13CEI2-21839.

References

- [1] Castellanos-Gallo L. et al. (2022), doi.org/10.3390/pr10030469
- [2] Huamán-Castilla N.L. et al. (2017), doi.org/10.2174/1570193X14666170206151439
- [3] Huaman-Castilla, N.L. et al. (2019), doi.org/10.3390/molecules24173145

T519: Aplicaciones de nanotecnología para el medio ambiente y economía circular

Influencia del decorado con Pt de la cerámica $\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ (CCTO) para su aplicación como sensor de gas

Josefa Caamaño
*Universidad de Chile,
Facultad de Cs. Físicas y
Matemáticas,
Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales. FCFM,
Universidad de Chile*

Carmen Castro Castillo
*Universidad de Chile,
Facultad de Cs. Físicas y
Matemáticas,
Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales. FCFM,
Universidad de Chile*

Rodrigo Espinoza
González
*Universidad de Chile,
Facultad de Cs. Físicas y
Matemáticas,
Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales. FCFM,
Universidad de Chile*

Marcelo O. Orlandi
*Department of
Engineering, Physics and
Mathematics, Sao Paulo
State University (UNESP),
Brazil*

Anderson A. Felix
*Department of
Engineering, Physics and
Mathematics, Sao Paulo
State University (UNESP),
Brazil*

Los últimos informes ambientales presentan un panorama sombrío para el medio ambiente y la economía del planeta. Por ello, el cambio climático atribuido a la emisión de gases de efecto invernadero ha fomentado la investigación de nuevos materiales para la detección in situ. Algunas de las clases de contaminantes que se desea detectar son CO_2 , NH_4 , NO_x y compuestos orgánicos volátiles (COV) [1]. Para se requiere el desarrollo de tecnologías de sensores de gas con métodos de determinación simples, sin el uso de espectrómetros y equipos analíticos complejos.

Un material poco estudiado para esta aplicación es la cerámica $\text{CaCu}_3\text{Ti}_4\text{O}_{12}$ (CCTO), la cual posee propiedades promisorias a partir de su comportamiento electrónico no lineal, su estabilidad térmica y sus propiedades no óhmicas son casi independientes, en un amplio rango de temperatura. Los estudios sobre la respuesta sensora del CCTO han mostrado propiedades prometedoras en la detección de H_2 , O_2 , NO_2 , H_2S y humedad.

En este trabajo se estudia la técnica sol-gel de nanopartículas de CCTO decoradas con platino al 3 y 5 % [2], con el fin de probar sus capacidades como detector de NO_2 . Las nanopartículas de CCTO fueron depositadas mediante drop-casting sobre electrodos de Pt en un sustrato de alúmina. Se estudió la respuesta en la detección de NO_2 en concentraciones de 2 a 100 ppm, variando la temperatura entre 100 y 300°C. Se obtuvieron los resultados más relevantes como señal sensora en CCTO a una temperatura de 250 °C para ambos porcentajes de Pt. Hubo reproducibilidad de los datos y se observa una selectividad específica hacia NO_2 en comparación con otros gases como H_2 , CO , C_2H_4 y C_2H_2 . Además, este estudio muestra que al decorar la superficies cerámica con platino se genera una mejor señal sensora en contraste con el CCTO puro.

Agradecimientos

Proyecto Anillo Functionalized surfaces for environmental detection (FunSED) ACT210059.

Referencias

[1] Y. K. Gautam et al. (2021), doi.org/10.1098/rsos.201324

[2] Z. Chen et al. (2019), doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.152086

T522: Aplicaciones de nanotecnología para el medio ambiente y economía circular

Síntesis verde de nanopartículas metálicas: análisis sobre sus potenciales aplicaciones como fertilizantes y agentes antimicrobianos.

Erico R. Carmona
*Laboratorio de
Bionanomateriales,
Facultad de Recursos
Naturales Renovables,
Universidad Arturo Prat,
Iquique, Chile*

Lucas
Hernández-Saravia
*Laboratorio de
Bionanomateriales,
Facultad de Recursos
Naturales Renovables,
Universidad Arturo Prat,
Iquique, Chile*

Aliro Villacorta
*Laboratorio de
Bionanomateriales,
Facultad de Recursos
Naturales Renovables,
Universidad Arturo Prat,
Iquique, Chile*

Felipe Carevic
*Laboratorio de
Bionanomateriales,
Facultad de Recursos
Naturales Renovables,
Universidad Arturo Prat,
Iquique, Chile*

La nanotecnología y la creación de materiales a nano-escala ha llamado la atención de muchos investigadores de diferentes áreas del conocimiento a nivel nacional e internacional. Las propiedades físicas y químicas mejoradas y sus particulares interacciones con los sistemas biológicos han abierto la oportunidad de estudiar posibles aplicaciones beneficiosas en las áreas de la biomedicina, la agricultura y del medio ambiente [1,2,3]. En el presente trabajo se presentarán resultados sobre la síntesis de nanopartículas metálicas de cobre y de hierro (NPs Fe y NPs Cu) mediante síntesis verde a partir del uso de residuos industriales como materia prima de metales. Las NPs fueron caracterizadas por técnicas de AFM, TEM, SEM, DLS, LDV, FTIR, UV-vis y XRD. También, se analizan sus potenciales aplicaciones en el mejoramiento de parámetros fisiológicos en hortalizas, así como también sus efectos antimicrobianos. Los resultados indican que las NPs Fe y Cu obtenidas por síntesis verde y uso de residuos mineros y electrónicos tienen un tamaño de partícula en el rango de los 10 y 20 nm, muestran estabilidad moderada-alta (Potencial Z entre -27 y -15 mV) y propiedades cristalinas. Además, las NPs Fe sintetizadas corresponden a la fase magnetita y tienen propiedades paramagnéticas. La aplicación de NPs Fe como aditivo mostró un efecto positivo al mitigar los efectos tóxicos del boro en cultivos hidropónicos realizados con lechuga (*Lactuca sativa*), a su vez las NPs Fe pueden mejorar los parámetros fotosintéticos y fisiológicos de la misma planta. Estudios realizados con brócoli (*Brassica oleracea*) muestran que la aplicación de NPs Fe mediante priming de semillas estimula la tasa, la velocidad de germinación y el crecimiento de las plántulas. Por otro lado, las NPs Cu pueden inhibir el crecimiento de microorganismos bacterianos en diferentes condiciones experimentales mediante el método de antibiograma por difusión de disco. Finalmente, los resultados indican que las NPs metálicas sintetizadas por una vía verde pueden tener potenciales aplicaciones como nanofertilizantes, estimulantes de crecimiento en plantas, mitigadores de estrés por boro y como agentes antimicrobianos.

Agradecimientos

Los autores agradecen el financiamiento otorgado por proyecto IDeA I+D ID21110130.

Referencias

[1] Zain, M. et al. (2022) , doi.org/10.1016/B978-0-12-823971-1.00019-2

[2] Altabbaa, S. et al. (2023) , doi.org/10.1007/s41204-022-00289-3

[3] Guerra, F. D. et al. (2018) , doi.org/10.3390/molecules23071760

T523: Aplicaciones de nanotecnología para el medio ambiente y economía circular

Degradación de contaminantes orgánicos utilizando nanocompuestos híbridos de TiO_2 laminar sensibilizado con nanoflores de ReSe_2

Pablo Cortes

Programa de Doctorado en ciencias de los Materiales e Ingeniería de Procesos, Universidad Tecnológica Metropolitana, Santiago, Chile

Matías Alegría

Programa de Doctorado en ciencias de los Materiales e Ingeniería de Procesos, Universidad Tecnológica Metropolitana, Santiago, Chile

Juan Aliaga

Departamento de Química, Facultad de Ciencias Naturales, Matemática y Medio Ambiente, Universidad Tecnológica Metropolitana, Santiago, Chile

Guillermo González

Departamento de Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago, Chile

Eglantina Benavente

Departamento de Química, Facultad de Ciencias Naturales, Matemática y Medio Ambiente, Universidad Tecnológica Metropolitana, Santiago, Chile

A causa del desarrollo industrial, la crisis energética y los problemas ambientales que enfrenta el mundo en los últimos años, ha despertado una gran preocupación y la necesidad de encontrar nuevas alternativas de descontaminación que permitan la eliminación de sustancias altamente nocivas presentes en aguas residuales. Dentro de los contaminantes orgánicos, los colorantes sintéticos presentan alta estabilidad y resistencia química. Para hacer frente a este tipo de contaminación, se han desarrollado procesos de oxidación avanzada (POA), como la fotocatalisis heterogénea, puede mineralizar completamente los tintes orgánicos en presencia de materiales fotocatalizadores a escala nanométrica y luz solar [1].

Entre la gran variedad de semiconductores basados en óxidos metálicos aplicados a reacciones fotocatalíticas, se destaca el dióxido de titanio (TiO_2) por su baja toxicidad, alta estabilidad química y resistencia a la fotocorrosión. No obstante, su banda de energía prohibida ($E_g = \sim 3.2$ eV) limita la absorción de luz solo en el rango de luz ultravioleta y presenta una alta tasa de recombinación de los portadores de carga [2]. Una estrategia innovadora para aumentar la fotoactividad de los semiconductores de banda ancha es la combinación con otros semiconductores activos bajo luz visible, como por ejemplo el diselenuro de renio (ReSe_2). El renio proveniente principalmente de la molibdenita, siendo Chile el principal productor de este metal a nivel mundial. El ReSe_2 es un dicalcogenuro de metal de transición que cristaliza en una estructura triclinica distorsionada como resultado del desacoplamiento de la carga de un electrón de valencia adicional del átomo de renio[3]. Presenta un E_g de 1.2–1.3 eV activo bajo luz visible, una gran área superficial y abundantes sitios activos que facilitan la adsorción de sustratos.

Debido a estas excelentes propiedades, el diselenuro de renio se presenta como una alternativa prometedora para la producción de dispositivos fotocatalíticos aplicados a la mineralización de contaminantes orgánicos industriales[4]. Por lo tanto, en esta investigación se estudia un nuevo nanomaterial multifuncional a base de dióxido de titanio laminar intercalado con moléculas de ácido esteárico (AE) y decorado con nanoflores de ReSe_2 aplicado a la degradación de colorantes.

Los nanomateriales sintetizados se caracterizaron a través de difracción de rayos X, microscopía electrónica de barrido, espectroscopia infrarroja, espectroscopia de reflectancia difusa y análisis termogravimétrico. Los resultados indicaron que el material multifuncional TiO_2 -AE/ ReSe_2 logró la completa degradación de los colorantes rodamina B y azul de metileno

luego de 120 min de irradiación con luz solar. Este excelente rendimiento se atribuye a la composición química, estructura y a la sinergia entre ambos semiconductores que además de favorecer la rápida separación y migración de excitones extiende el rango de absorción de luz UV/Vis.

Agradecimientos

Agradecimientos a los proyectos de Fondo de Equipamiento Científico y Tecnológico, año 2020, código LE-21-03 de la Universidad Tecnológica Metropolitana y Fondecyt 11200609.

Referencias

- [1] V. Mahendran and P. R. Gogate (2021) , doi.org/ 10.1016/j.seppur.2021.119011
- [2] D. Cao et al. (2021) , doi.org/10.1016/j.seppur.2021.118463
- [3] J. Shi et al. (2020) , doi.org/10.1016/j.matlet.2020.128472
- [4] S. Rehman, et al. (2021) , doi.org/10.1016/j.jallcom.2020.157310
- [5] H. Patel, K. Patel, and K. D. Patel (2023), doi: 10.1016/j.optmat.2023.113559.

Superparamagnetic iron oxide nanoparticles (SPIONS) and their role in Chlorpyrifos degradation in water using TiO₂ and ZnO nanoparticles

Wence Herrera Rondon
*Programa de Doctorado
en Ciencias de Recursos
Naturales, Universidad de
La Frontera, Temuco,
Chile*

Joelis Vera Acero
*Programa de Doctorado
en Ciencias de la
Ingeniería mención
Bioprocesos, Universidad
de la Frontera, Temuco
Chile*

Edward Hermosilla,
Gonzalo Tortella, María
Cristina Diez, Olga
Rubilar
*Centro de Excelencia en
Investigación
Biotecnológica Aplicada
al Medio Ambiente
CIBAMA-BIOREN,
Universidad de La
Frontera Temuco, Chile*

María Cristina Diez,
Olga Rubilar
*Departamento de
Ingeniería Química,
Universidad de La
Frontera Temuco, Chile*

Amedea B. Seabra
*Center for Natural and
Human Sciences,
Universidade Federal do
ABC, Santo André SP,
Brazil.*

Pesticides has been used widely over the world. Sometimes its excessive use could cause environmental and health problems. That is why have been looked methods to mitigate, eliminate or stabilize pesticide pollutant; those methods generally are physical, chemical, or biological. In recent years, nanotechnology has attracted attention because nanoparticles have new properties compared to their bulk counterparts, such as extremely small size, high surface area to volume ratio, surface modifiability, and excellent magnetic properties. In this sense, superparamagnetic iron oxide nanoparticles (SPIONS) have been reported as poor photocatalytic nanoparticle (NP). Nevertheless, they have a great potential in this area due their capabilities of be doped with TiO₂ and ZnO NP. Considering this, the aim of this research was to evaluate the catalytic effect of superparamagnetic iron oxide nanoparticles (SPIONS) doped with metals on the degradation of chlorpyrifos in aqueous solution. The Functionalization of SPIONS were carried out using wetting impregnation method. Complete transformation of chlorpyrifos (50 mL, 40 ppm) were achieved using SPIONS@ZnO and SPIONS@TiO₂ at room temperature using UV-A light. The results have implications to the application of SPIONS doped with metals for drinking water purification, as pesticide contamination is prevalent in many parts of the world. It is necessary to carry out studies to evaluate the capacity of these NPs under sunlight for their possible application in the environment, as well as their recovery rate.

Acknowledgments

ANID/Doctorado/21211180, ANID/Doctorado/21211161, ANID/FONDAP/15130015 -
Universidad de La Frontera DI23-3002 - Universidad de La Frontera PP23-0046 - Universidad
de La Frontera DI23-10002, FONDECYT INICIACIÓN 11230939.

References

- [1] Bootharaju, M.S. et al. (2012) , doi.org/10.1021/la2050515
- [2] Affam, A.C et al. (2013) , doi.org/10.1016/j.jenvman.2013.08.058
- [3] Farner Budarz, J. et al. (2019), doi.org/10.1016/j.jhazmat.2017.12.028
- [4] Elshypany, R. et al. (2021) , doi.org/10.1016/j.eti.2021.101710i

T526: Aplicaciones de nanotecnología para el medio ambiente y economía circular

Síntesis verde de nanopartículas de cobre a partir de relaves y sus aplicaciones para la reducción eficiente de colorantes orgánicos

Lucas
Hernández-Saravia
*Universidad Arturo Prat,
Chile*

Erico R. Carmona
*Universidad Arturo Prat,
Chile*

Felipe S. Carevic
*Universidad Arturo Prat,
Chile*

Aliro Villacorta
*Universidad Arturo Prat,
Chile / Universitat
Autònoma de Barcelona,
España*

Ricard
Marcos
*Universidad Arturo Prat, Chile
Universitat Autònoma de
Barcelona, España*

La nanotecnología es una disciplina que estudia el comportamiento de los materiales a escala nanométrica. Se sabe que estos materiales tienen una amplia gama de aplicaciones debido a las excelentes propiedades optoelectrónicas, magnéticas y térmicas que proporciona su escala. Sin embargo, uno de los retos actuales asociados a la nanotecnología radica en cómo se generan los nanomateriales [1]. Dentro de las nuevas tendencias de síntesis, las rutas biológicas se han propuesto como una alternativa que requiere disolventes orgánicos menos contaminantes y un menor consumo energético [2].

Por lo mencionado anteriormente que la recuperación de cobre y adicionar un valor agregado es de un alto interés y fue estudiado. El cobre recuperado de los relaves a través de la lixiviación ácida y precipitación en hidróxido de cobre se utilizó para sintetizar nanopartículas de cobre (CuNPs) mediante una síntesis verde. Las CuNPs fueron sintetizadas con extracto de cáscaras de naranja mostraron una buena dispersabilidad en medio acuoso con alta estabilidad. Los espectros de polvo FT-IR (Fig. 1) confirmó la formación de CuNPs. Se encontró que las CuNPs son efectivos para la rápida eliminación por adsorción de colorantes catiónicos (azul de metileno) y aniónicos (rojo Congo) de sus soluciones acuosas. Además, el presente estudio aborda un uso alternativo factible de desechos de la minería, en este caso se utilizó el relave (de Taltal) para sintetizar un producto de valor agregado para su posible aplicación a gran escala en el tratamiento de aguas residuales.

Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por la Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID) FONDEF IDeA I+D ID21110130.

Referencias

- [1] L.-S. Wong-Pinto, et al. (2021), doi.org/10.1016/j.jclepro.2021.128107
[2] S.K. Giri et al. (2011), doi.org/10.1016/j.colsurfa.2011.08.052

Degradation of antibiotic florfenicol in contaminated water by Fe₃O₄@C@ZnO nanophotocatalyst

Fernanda Parraguez
Student of Civil Engineering in Biotechnology, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile

Joelis Vera
Doctoral Program in Engineering Sciences Mention Bioprocesses, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile

Wence Herrera
Doctoral Program in Sciences of Natural Resources, Faculty of Engineering and Science, Universidad de La Frontera, Temuco

Edward Hermosilla,
Olga Rubilar
Biotechnological Research Center Applied to the Environment (CIBAMA-BIOREN), Universidad de La Frontera, Temuco, Chile / Chemical Engineering Department, Faculty of Engineering and Science, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile

Marcela Diaz
Chemical Engineering Department, Faculty of Engineering and Science, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile

Florfenicol (FF) is an organic molecule derived from thiamphenicol, slightly soluble in water, obtained by chemical synthesis and used as a broad spectrum antimicrobial especially in the salmon industry for disease prevention. Due to its excessive use and the absence of laws regulating it in salmon farms (pools and open water) these antibiotics reach the sewage treatment plants, where if they are not completely eliminated, they can favor the proliferation of resistant bacteria [1,2]. In this scenery, heterogeneous photocatalytic processes for dye degradation emerge as a promising technology able to satisfy several principles of green chemistry considering its low energy consumption and secondary-pollution-free operation [3]. This process generates highly reactive species with a capacity of decompose a wide range of organic compounds at standard atmospheric conditions. Photocatalytic degradation of FF has been studied using different photocatalysts, among which aqueous suspension of ZnO stands out because of its ease synthesis, biocompatibility, low cost (compared to its counterparts, titanium dioxide) and high FF degradation rate [4]. It is known that the direct application of suspended photocatalyst provides an inherent disadvantage associate with the separation of catalyst particles from the reaction medium after treatment, hence, it requires tedious and complex centrifugation and filtration steps, which represent one of the major technical problems that limit its practical application [5]. Moreover, the use of chemical methods for this catalyst synthesis reduces the environmental sustainability of photocatalytic processes, due to the use of noxious environmental the reagents (e.g. solvents, surfactants, reducing agents, etc). To overcome these challenges, superparamagnetic Fe₃O₄@C@ZnO nanoparticles synthesized by using natural resources could be an efficient photocatalyst for FF degradation. The aim of this investigation was to evaluate the photocatalytic activity and reuse of biogenic Fe₃O₄@C@ZnO nanoparticles on the degradation of florfenicol in a photoreactor under UVA light. The nanostructure that exhibited the highest degradation rate was selected for a design of experiments, evaluating the NP concentration (25-100 mg/L) and FF concentration (1-30 mg/L). The characterization of Fe₃O₄ revealed that higher extract concentrations resulted in greater magnetic properties of the nanoparticles (NPs). Furthermore, the thickness of the carbon monolayer played an important role in the functionalization with ZnO, as a thicker monolayer retained a higher amount of NP-ZnO in its pores. As ZnO is a potent photocatalyst, this led to increased antibiotic degradation, achieving a degradation rate of 70% within 48 hours.

References

- [1] Lulijwa et al. (2019), doi.org/10.1111/raq.12344
- [2] Zong et al. (2010), doi.org/10.1007/s00128-009-9923-1
- [3] Byrne et al. (2015), doi.org/10.3390/molecules20045574
- [4] Kulkarn (2017), doi.org/10.1063/1.5047702
- [5] Iravani et al. (2014), [dor.org/9385-406.PMC4326978](https://doi.org/10.1371/journal.pone.0100000)

Remoción de zinc soluble usando nanopartículas de magnetita sintetizadas a partir de desechos siderúrgicos

José Ignacio Coloma
Padilla
*Departamento de
Ingeniería en Universidad
Católica De la Santísima
Concepción,
Concepción, Chile*

Pablo Salgado
*Docente Departamento
de Ingeniería en
Universidad Católica De
la Santísima Concepción,
Concepción, Chile*

La investigación realizada busca remover zinc soluble a través de métodos de adsorción eco-amigables, enfocándose en dar valor agregado a materiales considerados desechos. Para ello se pretende extraer la especie de Fe^{+3} de desechos siderúrgicos, formar nanopartículas de magnetita con el material recuperado sobre una matriz soportada y encontrar las condiciones óptimas de adsorción mediante un análisis de varianza (ANOVA).

El desecho rico en Fe es solubilizado mediante reducción directa y filtrado para eliminar impurezas. El Fe^{+3} es recuperado mediante precipitación controlando pH y conductividad. Con un espectrofotómetro se realizan pruebas colorimétricas a través del método de 1.10 fenantrolina para corroborar en mg/L la cantidad y especie de Fe recuperado.

Para el diseño del filtro, se utilizaron esponjas de celulosa, por su estructura estable y morfología vesicular. Estas permanecen por 48 hrs sumergidas en una solución de Fe^{+3} controlado y mediante una síntesis coprecipitación, con pequeñas modificaciones, se consigue formar nanopartículas de magnetita dentro del soporte. Para corroborar la presencia y composición de la nanopartícula se realizan ensayos de microscopía electrónica de barrido (SEM) y análisis de espectrometría de energía dispersiva (EDS).

Se evaluó la efectividad del filtro en la remoción de Zn realizando distintas pruebas de remoción por lotes, basando las pruebas en un modelo ANOVA, variando factores como el pH (5, 7 y 9), la concentración inicial de contaminante (1, 2 y 3 mg/L) y el tiempo de contacto (5, 12.5 y 20 min). Con los resultados obtenidos se determina mediante un análisis ANOVA el grado de influencia de los parámetros estudiados sobre el porcentaje de remoción y los valores óptimos para maximizar la adsorción. Se determinaron las concentraciones de Zn previas y posteriores a los ensayos mediante el método colorimétrico del Zincón evaluado por un espectrofotómetro.

Al llevar todo el hierro precipitado a una solución controlada, se pudo estimar mediante la prueba iron (II)/(III) de Hanna que más del 80% de la solución presente corresponde a la especie de Fe^{+3} .

Los soportes mostraron propiedades magnéticas y al comparar las imágenes SEM realizadas antes y después de la síntesis, se corroboró la presencia de nanopartículas esféricas de tamaño entre los 186 y 63 nanómetros. El EDS muestra un aumento de Fe y O en el soporte magnético lo que da indicios que la nanopartícula presente corresponde a magnetita.

Con respecto al análisis ANOVA, los resultados indican que de los parámetros con mayor influencia sobre el porcentaje de remoción del contaminante son el pH y el tiempo de concentración, concluyendo que el porcentaje máximo de adsorbancia asociados a las

condiciones del estudio es del 97%, logrado a un pH 7.04 y un tiempo de contacto de 19 minutos aproximadamente.

En conclusión, el filtro diseñado logro remover de muestras de agua ampliando y reutilizando la vida útil de esponjas y desechos siderúrgicos.

Agradecimientos

Agradezco al Docente Pablo Salgado por su guía y aportes y a la Universidad Católica de la Santísima Concepción por facilitar el espacio para el desarrollo de la investigación.

Referencias

[1] Li, Z. et al. (2019), doi.org/10.1166/jnn.2019.15809

[2] Pai, S. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.surfin.2021.100947

[3] Shahrashoub, M. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.colsurfa.2021.126675

Chitosan nanoparticles increase drought tolerance in *Solanum lycopersicum* L

Ricardo Tighe-Neira

*Departamento de
Ciencias Agropecuarias,
Universidad Católica de
Temuco / Núcleo de
Investigación en
Producción Alimentaria*

Mathias

*Departamento de
Ciencias Agropecuarias,
Universidad Católica de
Temuco*

Claudio

*Inostroza-Blancheteau
Departamento de
Ciencias Agropecuarias,
Universidad Católica de
Temuco / Núcleo de
Investigación en
Producción Alimentaria*

Gustavo

*Curaqueo-Fuentes
Departamento de
Ciencias Agropecuarias,
Universidad Católica de
Temuco / Núcleo de
Investigación en
Producción Alimentaria*

Jorge

*Gonzalez-Villagra
Departamento de
Ciencias Agropecuarias,
Universidad Católica de
Temuco / Núcleo de
Investigación en
Producción Alimentaria*

Chitosan nanoparticles (ChNPs) regularly show positive effects on plant growth and physiology, but their influence on photosynthesis and their impact on water stress need to be better understood. This work aimed to evaluate the effects of ChNPs on the photosynthetic yield and root system in *Solanum lycopersicum* L. cv Cal Ace under moderate water stress to cope with the water shortage of recent years. Seeds were sown in a completely randomized design inside a growth chamber; treatments consisted of ChNPs applied via foliar at doses of 0, 30, 60 and 90 mg/L, using deionized water as control, on the other hand, regular irrigation and drought stress factors were used. The results indicated that drought stress significantly decreased the values of the variables studied compared to regular irrigation. At the same time, the ChNPs provoked an increase in the net photosynthetic rate, stomatal conductance and transpiration compared to the control, as well as an increase in the size of the root system, mainly with doses of 30 mg/L. In this first approach, the ChNPs caused a drought tolerance increase in *S. lycopersicum* under laboratory conditions. However, biochemical and molecular parameters must be evaluated to establish some underlying mechanisms.

Acknowledgments

Project: Nanopartículas de quitosano: una estrategia para mejorar la tolerancia al estrés por sequía en *Solanum lycopersicum* L., a través de la respuesta integrada de la capacidad fotosintética y sistema antioxidante. Funded by Dirección de Investigación Universidad Católica de Temuco.

References

- [1] Behboudi et al. (2018), doi.org/10.22090/jwent.2018.01.003
- [2] Behboudi et al. (2019), doi.org/0.1080/01904167.2019.1617308
- [3] Genty et al. (1989), doi.org//10.1016/S0304-4165(89)80016-9

Cotton textile with antimicrobial activity and enhanced durability produced by L-cysteine-capped silver and copper nanoparticles

Carla Cisternas Novoa¹

Gonzalo Tortella¹

Cledir Santos²

Maria Cristina Diez¹

Olga Rubilar¹

¹Centro de Excelencia en Investigación Biotecnológica Aplicada Al Medioambiente (CIBAMA_BIOREN), Universidad de La Frontera

²Scientific and Technological Bioresource Nucleus, Instituto Química, Universidad de La Frontera

In this study, L-cysteine-capped silver nanoparticles (Cys-AgNPs) were successfully linked in a cotton textile, being attached in a covalent way to the cotton fibers via esterification with the hydroxyl groups from the cellulose. The AgNPs were strongly adhered to the fiber surface through coordination bonds with the thiol groups from the L-cys. In addition, they were compared with biogenic silver nanoparticles produced from fungi (bio-AgNPs). Materials and methods: The characterization of the Cys-AgNP and the bio-AgNP solutions were accomplished by UV-visible (UV-Vis), Z-potential, and X-ray diffraction (XRD). After the attachment of the Cys-AgNPs and the bio-AgNPs to the raw cotton, the textile surface was characterized by variable pressure scanning electron microscopy (VP-SEM), energy dispersive X-ray (EDX), and Fourier transform infrared spectroscopy (FT-IR). The antibacterial activity was performed by disk diffusion analysis. Results: The results of the UV-Vis analysis showed the presence of AgNPs in the Cys-AgNPs and the bio-AgNPs solutions, showing the Surface Plasmon resonance (SPR) for the AgNPs among 380–420 nm. In addition, they exhibited a Z-potential of -27 and -24 mV, respectively, with the presence of elemental silver shown by the XRD analysis. The VP-SEM images from the cotton fabrics covered in Cys-AgNPs and bio-AgNPs showed the presence of spherical AgNPs on their surface, and EDX analysis revealed the presence of peaks associated with the presence of Ag, C, and O. Furthermore, FT-IR analysis exhibited peaks associated with the presence of L-cysteine (SH-) and carboxylic acid arising from the esterification reaction among the cellulose from cotton and the carboxylic acid in the L-Cys molecules. Finally, the cotton textile exhibited antibacterial activity against *Escherichia coli* and *Staphylococcus aureus*. Furthermore, for the first time CuNPs were synthesized and tested against the same microorganisms. Conclusions: This study demonstrates the ability of Cys-AgNPs to bind to the cellulose from cotton fabric so as to produce antibacterial fabrics with enhanced durability, opening a wide range of options to be further used in healthcare and other industries and give the firsts glances of the bonding of CuNPs to cotton textile.

Acknowledgments

This research was funded by FONDECYT POSTDOCTORAL 3230414, FONDECYT 1191089, ANID/FONDAP/15130015, CONYCI/FAPESP (2018/08194-2), DI20-1003 project, CONICYT-REDES 180003, CNPq (404815/2018-9).

References

- [1] Cisternas C. et al. (2021), doi.org/10.1002/jctb.6724
- [2] Paredes D. et al. (2014), doi.org/10.2147/IJN.S57156
- [3] Xu Q. et al. (2018), doi.org/10.1007/s12221-018-8621-1
- [4] Mohamed A. et al. (2014), doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2016.10.082
- [5] Saravanan M. et al. (2018), doi.org/10.1016/j.micpath.2018.02.008

Tópico T6: Nanotecnología aplicada a la industria, transferencia y regulación de seguridad

Smartphone-based nano-genosensor for on-site detection of bovine tuberculosis using saliva as a diagnostic fluid

Víctor Díaz-García
*Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián*

Braulio
Contreras-Trigo, Astrid
Haensgen, Libnny
Belmar, Ignacio
Sanhueza, Pablo
Coelho

*Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián*

Patricio Oyarzún
*Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián*

Gold nanoparticles (AuNPs) are widely used for technology applications in biomedical, sensing and industry fields, thanks to their excellent physicochemical and optoelectronic properties. Synthesis methods of AuNPs can be carried out based on physical, chemical, biological or combined processes, which often depend on complex and laborious protocols [1]. The standard approach described by Turkevich et al. (1951) [2] produces spherical gold nanoparticles (colloidal gold) via the reduction of tetrachloroauric acid (HAuCl₄) with trisodium citrate dihydrate in water.

In this study, we propose a modification of the Turkevich method for rapid screening applications, which simplifies the synthesis of AuNPs using microvolumes of HAuCl₄ and citrate solutions (from 200 µL). This new method produces AuNPs of 15-20 nm in the optimal pH range (5.0-5.5), showing a high yield of synthesis (resulting AuNPs concentration), excellent stability and monodispersity. The colloidal solutions generated were analyzed by zeta potential, energy dispersive spectroscopy (EDS), electronic microscopy (TEM) and colorimetric analysis, and were compared with AuNPs generated by standard Turkevich method and commercial AuNPs (Sigma). As a proof of concept, aptasensors for antibiotic detection were developed and compared between microsynthesized and control AuNPs in detection assays, proving the former to outperform Turkevich-based AuNPs in terms of their analytical behavior.

In summary, the method described herein showed a strong synthesis performance of AuNPs, as well as superior dispersion and shape uniformity. Other advantages include simplicity, short synthesis time, lesser reagents and materials requirements, and consequently lower costs, which are highly desirable features for screening applications.

Acknowledgments

11MK_iSbC6MBXD2r84Db0M5u7pY8KQy03.

References

- [1] Liu, X.Y. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.drudis.2021.01.030
- [2] Turkevich, J. et al. (1951), doi.org/10.1039/df951110005

Víctor Díaz-García,
Braulio Contreras-Trigo,
Astrid Haensgen, Libnny
Belmar, Ignacio
Sanhueza, Pablo Coelho,
Patricio Oyarzún
*Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián*

Smartphone-based nano-genosensor for on-site detection of bovine tuberculosis using saliva as a diagnostic fluid

Bovine tuberculosis is a zoonotic infectious disease caused by *Mycobacterium bovis*, which produces serious impacts in productivity and competitiveness of the dairy cattle sector. The intradermal tuberculin test is the standard method for rapid screening of *M. bovis*, which is based on a delayed hypersensitivity reaction. Despite its low cost and easiness of application, this test has a low response time (48-72 h) and suffers from diagnostic limitations that prevents from a better control and eradication of the disease [1,2].

The prototype developed herein consists of three subsystems: (i) the “turn on” nano-genosensor (NGS) based on fluorescent cadmium telluride nanocrystals (quantum dots) functionalized with a nucleotide probe that was bioinformatically designed to recognize DNA from a particular region of the *Mycobacterium tuberculosis* complex; (ii) a device (housing) with UV illumination and design features to optimize excitation/light emission from the NGS-containing microplates and (iii) a mobile phone application that digitally processes the optical signal emitted by the NGS (QDsReader software). The preanalytical stage involving the collection and preparation of cows' saliva for DNA purification was optimized for the processing of 96 bovine samples within 4.5 h, including sampling (using gauze), sterilization, clarification (3500 rpm x 5 min) and DNA extraction (Maxi Kit E.Z.N.A.). The NGS reached a specificity of 100% toward *M. bovis* DNA in detection assays carried out with artificially contaminated saliva, comparing against DNA from control microorganisms including environmental mycobacteria (*M. avium*, *M. kansasii*, *M. goodii*, *M. scrofulaceum*), *Escherichia coli* and a microbial consortium grown from cows' saliva. The detection limit in these experiments was of 0.1 femtomoles (125 ng DNA from *M. bovis*), proving a sensitivity close to PCR assays.

The NGS showed a strong analytical performance and has thus the potential to be validated through field assays by comparing its diagnostic accuracy against tuberculin test and qPCR. In addition, the prototype combines portability, rapid response and other advantages associated with a digital device, such as automation, objectivity derived from the quantitative detection principle and the employment of a software allowing straightforward result reading (mobile app). These results support the development of a novel technology platform for on-site diagnostic of bovine tuberculosis and for other diseases in the future.

Acknowledgments

We thank Fundación Copec-UC (Grant 2020.R.79) and the Servicio Agrícola y Ganadero (SAG) for valuable contributions and orientations.

References

- [1] Gormley E., Corner, L.A. (2018), doi.org/10.3389/fvets.2017.00247
- [2] Algammal A.M. et al. (2019), doi.org/10.1016/j.micpath.2019.103574

Desarrollo, estudio y rendimiento de sensores de gas basados en compuestos CuO-rGO

Felipe Vega Solari
*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Donovan Díaz
Droguett
*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

Martín Roble Albeal
*Pontificia Universidad
Católica de Chile,
Santiago, Chile*

The high reactivity of the oxygen functional groups and the high specific surface area of GO render it a good candidate for gas sensing applications, to be used, for example, in the detection of toxic or hazardous gases such as CO and H₂. This research studied especially the performance of CO gas sensors based on CuO/reduced graphene oxide (rGO) composite materials prepared via the hydrothermal method. The microstructure, morphology, and chemical characteristics and oxidation states of the CuO/rGO nanocomposite were obtained by using X-ray diffraction (XRD), scanning electron microscopy (SEM), Raman spectroscopy, Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR), energy dispersive X-ray spectroscopy (EDS) and X-ray photoelectron spectroscopy (XPS). The performance was studied by exposing the sensor to different concentrations of CO gas ranging from 30 ppm to 180 ppm and using the sensor chip temperatures from room temperature up to 150 °C. The gas sensing properties of the CuO/rGO sensor were investigated using different solution concentration ratios (p/p) of CuO and rGO such as 1:1, 2:1, and 4:1. Furthermore, different thermal reductions of CuO/rGO composites were studied. The thermal reduction was performed by undergoing the samples at temperatures of 150 °C and 250 °C on air for 2 hours to study the effect of the degree of reduction in the sensor response. The experimental data indicated that the CO gas sensor has a good sensor response ($S = 6\% - 15\%$) but a low recovery time. Nevertheless, excellent selectivity and reproducibility toward CO gas exposure. The good sensing mechanism for this type of sensor was ascribed to the porous character of the nanocomposite and the formed heterojunction at the interfaces between CuO and rGO nanosheets. As an additional step for improving the gas sensing properties of these CuO/rGO sensors, doping the CuO phase with suitable aliovalent ions of Fe (III) will be explored. The presence of these impurity atoms can modulate the gas-sensing behavior of the original material by increasing the depletion of charge carriers on CuO or by inducing morphological changes.

Acknowledgments

Felipe Vega extends his heartfelt appreciation to Prof. Dr. Donovan Díaz-Droguett for his invaluable guidance and unwavering support, particularly in relation to the project grants Fondecyt Regular N° 1231918 from ANID-Chile and the ANID-Chile Doctoral Grant. Furthermore, special thanks are extended to Martin Roble Albeal (c), whose contributions have also been instrumental in the realization of this work.

References

- [1] F. Schedin et al. (2007), doi.org/0.1038/nmat1967
- [2] Dongzhi Zhang et al. (2016), doi.org/10.1007/s10854-016-5856-8
- [3] Nguyen Dien Kha Tu et al (2015), doi.org/10.1021/acs.chemmater.5b02999
- [4] Dongzhi Zhang et al. (2017), dx.doi.org/10.1016/j.snb.2017.03.108

T604: Nanotecnología aplicada a la industria, transferencia y regulación de seguridad

Aplicación industrial de productos de base nanotecnológica para el control microbiano en la industria alimentaria

Natalia Salas Huenuleo
Advanced Integrated Technologies

Catalina Rosales Soto
Advanced Integrated Technologies

Leonardo Salas Huenuleo
Facultad de Ciencias de la Salud, Universidad Católica de Temuco

Edison Salas Huenuleo
Advanced Integrated Technologies

La inocuidad y la seguridad alimentaria son dos conceptos que se aplican en la industria para reducir las Enfermedades Transmitidas por Alimentos (ETA's). Se estima que cada año enferman en el mundo unos 600 millones de personas (aproximadamente 1 de cada 10 habitantes) por ingerir alimentos contaminados, y que 420.000 mueren por esta misma causa [1]. Para combatir las ETA's, la industria utiliza en sus procedimientos de limpieza y sanitización, productos desinfectantes que suelen ser químicos tradicionales como cloro, ácidos y amonios cuaternarios, que tienen como desventaja la baja permanencia en las superficies una vez aplicados, solo contemplan desinfección inmediata versus las continuas horas de trabajo de las líneas productivas. A pesar de esto, hay poca motivación a probar nuevas tecnologías biocidas, principalmente porque el costo de los productos clásicos, aunque no sean eficaces, son bajos. La nanotecnología trae una apuesta disruptiva que, combinada con agentes activos desinfectantes, potencia su acción biocida, gracias al efecto remanente que deja en las superficies. Además, debido al pequeño tamaño de sus partículas, permite el uso de concentraciones más bajas del agente activo, obteniendo mayor efectividad. En este trabajo desarrollamos productos desinfectantes de amplio espectro con nanopartículas de cobre, que eliminan patógenos de forma inmediata y con efecto residual, es decir, que continúan desinfectando las superficies luego de su aplicación. Para esto, se realizaron múltiples estudios de enfrentamiento con microorganismos patógenos, en laboratorios reconocidos y acreditados con normativas aprobadas internacionalmente como EN, ISO y ASTM. Además, estos productos se han evaluado en ambientes reales donde factores como carga microbiana, materia orgánica, humedad y temperatura, no son controlados a diferencia de lo que ocurre en el laboratorio.

Los resultados obtenidos muestran que los productos desarrollados poseen capacidad bactericida, viricida y fungicida con reducción de más de 7 logaritmos, en algunos casos. Se comprobó la eficacia frente a patógenos resistentes a antibióticos y la eliminación de biofilms. En contraste con los desinfectantes clásicos de la industria, hemos obtenido resultados de desinfección superiores. Estos productos pueden enfrentarse a barreras normativas o reglamentarias puesto que las agencias regulatorias nacionales e internacionales están recién actualizándose respecto a esta tecnología. Adicionalmente, se han evidenciado otros beneficios importantes para la industria, tales como, reducción en los tiempos de limpieza y desinfección, de la cantidad de agua utilizada en esos procesos, de horas de mano de obra, entre los más relevantes. Debido a estos resultados, obtenidos en contexto real, los productos evaluados se presentan como una alternativa con gran potencial para la industria alimentaria

no solo porque logra eliminar patógenos, sino que también se posiciona como una alternativa de sustentabilidad.

Agradecimientos

Advanced Integrated Technologies

Referencias

[1] Organización mundial de la salud (30 de abril de 2020),
www.who.int/es/news-room/fact-sheets/detail/food-safety

Nanostructured membrane based on *Didymosphenia geminata* for efficient adsorption of divalent metals present in lithium brine

Elias Reinoso-Guerra
*Centro Científico
Tecnológico de
Valparaíso, Universidad
Técnica Federico Santa
María, Valparaíso, Chile /
Departamento de
Química, Universidad
Técnica Federico Santa
María, Valparaíso, Chile /
Laboratorio de
Nanobiomateriales,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Juliet Aristizabal
*Laboratorio de
Nanobiomateriales,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Barbara Arce
*Laboratorio de
Nanobiomateriales,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Dana Gentil
*Laboratorio de
Nanobiomateriales,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Carolina Parra
*Centro Científico
Tecnológico de
Valparaíso, Universidad
Técnica Federico Santa
María, Valparaíso, Chile /
Laboratorio de
Nanobiomateriales,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

The need for new, more efficient, sustainable, and less expensive technologies for the removal of metals in aqueous environments has led to the development of novel membranes based on the principle of biosorption [1], where the adsorbent agent has a biological origin. In this work, we propose the use of the biopolymer from a highly invasive microalgae, *Didymosphenia geminata* or *Didymo*, as principal adsorbent in a nanostructured membrane designed to facilitate industrial applications. We used nanofibrillated cellulose (NFC) as a membrane component due to its non-toxic nature and good reinforcing capacity. In addition, we introduced multiwalled carbon nanotubes (CNTs) into the membrane to improve structural performance, porosity, and antifouling capability, critical aspects for membrane applications. Previously we have confirmed a high lead adsorption capacity [2], compared to other biopolymers, either from microalgae or macroalgae. According to our results, this adsorption is related to the presence of sulfur-based functional groups in the biopolymer produced by *Didymo*. When CNTs are added to the membrane, their adsorption capacity increases, probably due to an increase in membrane porosity and enhanced molecular diffusion. Given the observed adsorption potential, in this work, we present a study on the adsorption capacity of calcium and magnesium, two of the main interferents in the lithium brine purification process. Obtained results indicate adsorptions close to 10 mg/g for these metal ions. Optimization in membrane composition and manufacturing process might help to improve the absorption capacity of the membrane. EDS analysis confirms the spatial correlation between sulfur, the main component of the functional group responsible for ion metal adsorption, and adsorbed calcium ions.

Acknowledgments

We would like to thank ANID FONDEF IDEA ID23110139 and ANID PIA/APOYO AFB180002 for their support in this project.

T607: Nanotecnología aplicada a la industria, transferencia y regulación de seguridad

Daniela Castro
*Advanced Integrated
Technologies (AINTECH)*

Patentamiento de la nanotecnología: panorama en Chile y el mundo

Uno de los parámetros para medir el desarrollo de una sociedad es el patentamiento de la investigación y desarrollo local y esta, a la vez, permite cuantificar la incorporación de nuevas tecnologías en los procesos productivos. En el caso de la nanotecnología, como tecnología de relativa corta existencia, el patentamiento también permite vislumbrar ámbitos de potenciales nuevos usos o susceptibles de mejoras en tecnologías ya existentes [1]. El panorama mundial del patentamiento es muy diverso en cuanto a cifras y a madurez de los procesos formales. Si hace 10 años la principal jurisdicción productora y receptora de patentes nanotecnológicas era EEUU, en la actualidad es China el Top 1 indiscutido, dejando muy atrás a EEUU y Europa [2]. En Chile el despegue de la nanotecnología, y el reflejo de esto en el número de patentes presentadas, está recién visualizándose y presenta desafíos que involucran tanto a los solicitantes como a la autoridad encargada del proceso (INAPI) [3]. Gracias a bases de datos disponibles, es posible identificar con claridad la especialización tecnológica de los mercados analizando las tendencias en patentamiento. Estos indicadores son muy útiles al momento de tomar decisiones para el diseño de la estrategia de protección de invenciones así como en la redacción de la patente misma cuando no se tiene un conocimiento o relación profunda con el mercado objetivo y con la legislación local. Este trabajo busca mostrar los parámetros principales a evaluar al momento de decidir dónde proteger nuestra invención, considerando lo lejanos que nos encontramos a los centros tecnológicos y de los principales mercados objetivos.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido íntegramente financiado por AINTECH

Referencias

[1] <https://www.wipo.int/patents/en/topics/nanotechnology.html>

[2] <https://www.patsnap.com>

[3] <https://www.inapi.cl/estadisticas/patentes/experto>

T610: Nanotecnología aplicada a la industria, transferencia y regulación de seguridad

Daniela Castro
*Advanced Integrated
Technologies*

Edison Salas
*Advanced Integrated
Technologies*

Natalia Salas
*Advanced Integrated
Technologies*

Uso de nanopartículas de cobre como biocida en espacios hospitalarios

De acuerdo a la OMS, 7 de cada 100 pacientes hospitalizados en países desarrollados resultan infectados con al menos un tipo de IIH (Infección Intra Hospitalaria), mientras que en países en desarrollo hasta 15 pacientes de cada 100 desarrollarán algún tipo de IIH durante su hospitalización. En promedio, 1 de cada 10 pacientes afectados fallecerá por una infección nosocomial.

En países menos desarrollados, y en hospitales con menos recursos, la incidencia de IIAs en UCIs puede llegar hasta un 89%. Dentro de los actores a los cuales afecta esta problemática en el sector hospitalario, se encuentran en primer lugar los usuarios de sistema, los pacientes hospitalarios, quienes son los afectados directos de la permanencia de microorganismos en las superficies, particularmente pacientes inmunodeprimidos, neonatos y hospitalizados de postoperatorio, con los efectos económicos que esto conlleva. Finalmente, en el caso de los hospitales y centros públicos de salud, el estado es el afectado económicamente ya que un paciente con IIA normalmente significa mayor tiempo de hospitalización y gastos hospitalarios en general.

Ante esta problemática se presenta el desafío de encontrar una solución para alcanzar altos estándares de desinfección de superficies, apto para ambientes en contacto con pacientes y que presente características que lo diferencien de los productos disponibles en la actualidad y que no logran la eliminación efectiva de los microorganismos desde las superficies.

Empleando la propiedad biocida del cobre, hemos desarrollado una línea de productos con nanopartículas de cobre con efecto biocida inmediato y efecto residual de entre 24 horas y 7 días (efecto Long-lasting).

En particular, se ha evaluado el desinfectante compuesto por cetrimida y CuNP (Decutec) frente a microorganismos de interés en la industria de desinfección hospitalaria. Estos ensayos, realizados en laboratorios certificados, han determinado que esta composición es altamente eficiente en la eliminación de biofilms de *Pseudomonas aeruginosa* y *Staphylococcus aureus*, consiguiendo 4,59 y 6,34 log de reducción respectivamente. La efectividad de Decutec también fue evaluada frente a otros microorganismos de interés bajo la norma EN 14561:2007 (5 min de contacto + sustancia interferente). Los resultados obtenidos indican que el producto es efectivo (más de 4 log de reducción UFC) contra *S. aureus* MRSA, *Klebsiella pneumoniae*, *K. pneumoniae* KPC, *Enterococcus faecium* VRE y *Acinetobacter baumannii*.

Para validar estos resultados, también hemos evaluado el desempeño de nuestra tecnología en condiciones reales a través de pilotos en instituciones de salud. En estas condiciones hemos comprobado la eficiencia en la desinfección de nuestros productos, en comparación con los productos de uso común en dichos centros de atención.

En definitiva, hemos demostrado que la nanotecnología es capaz de proporcionar una

solución innovadora para industrias donde el control microbiológico es crítico.

Agradecimientos

CORFO 22CyE201855.

Desarrollos recientes de Nanofármacos, Biocontrolled-Grupo LETI SAV. Vanguardia en Venezuela

Xenon Serrano, Anyoli
Taly, Adriana Caminos,
Cirana Rodríguez
*Area de Nanotecnología.
División I&D.
Biocontrolled-Gupo LETI
S.A.V.*

Nicolás Chacón
*División I&D.
Biocontrolled-Gupo LETI
S.A.V*

Alfredo Inatti
*Dirección General.
Biocontrolled-Grupo LETI
S.A.V*

Industrias Biocontrolled fundado en el año 1996 como brazo científico-tecnológico de Grupo Leti S.A.V, ha impulsado estratégicamente un espacio productivo para el desarrollo de nanofármacos con vista a mejorar su eficiencia y eficacia, en referencia a comparadores convencionales. En este sentido, nuestro Laboratorio de Nanotecnología ha procurado el dominio del “knowhow” necesario para establecer metodologías de vanguardia mundial, en el desarrollo de diversos nanofármacos de uso humano. Actualmente, contamos con la posibilidad de desarrollar nanotecnologías como: nanoliposomas, nanopartículas lipídicas sólidas y nanocristales, dependiendo de la naturaleza fisicoquímica del principio activo, la dosis de interés establecida en el estudio y la potencial vía de administración en el organismo. Lo anterior, se ha logrado cumpliendo todos los estándares de BPM esenciales en la fabricación de productos farmacéuticos para humanos. Así, nuestro equipo ha establecido varios nanoconstructos con principios activos de relevancia para nuestro mercado farmacéutico regional. En la línea estratégica de productos tópicos, logramos elaborar con éxito formulaciones de antifúngicos nanoliposomados, antivirales en nanopartículas lipídicas sólidas, antiinflamatorios esteroideos nanoliposomados, entre otros. Estos productos nano, de formulación tópica, exhibieron valores notablemente mayores de difusión y penetración en estudios tanto “in vitro” como “ex vivo” con porcentajes de activo encapsulado mayores al 80%, tamaños de partícula menores a 100nm y han sido aprobados por la autoridad sanitaria nacional para su pronta comercialización. De este modo, nuestro Grupo Leti SAV, se instaura como líder en el mercado farmacéutico venezolano, siendo el único laboratorio en el país que participa en el desarrollo y elaboración de productos nanotecnológicos para la mejora de la salud humana.

Tópico T7: Modelamiento y simulación de materiales, estructuras y dispositivos nanométricos

Walter Orellana
*Departamento de
Ciencias Físicas,
Universidad Andrés Bello*

Roberto H. Miwa
*Instituto de Física,
Universidade Federal de
Uberlândia, Brasil*

Fe and Co adatoms on bilayer borophene as single-atom catalysts for oxygen reduction reaction: A DFT study

Energy conversion technologies like water electrolyzers, rechargeable metal-air batteries, and proton-exchange membrane fuel cells require high-performance catalysts to minimize reaction kinetic barriers of critical processes like the oxygen reduction reaction (ORR). Developments of efficient non-precious metal ORR electrocatalysts are keys to advancing these technologies. Single-atom catalysts (SAC) represent promising types of catalysts, consisting of isolated metal atoms dispersed on suitable support materials. SACs offer several advantages over conventional catalysts, including atomic precision at specific coordination environments, resistance to deactivation due to their unique atomic-scale structure, and aggregation prevention, which can significantly enhance activity and selectivity. However, suitable substrates for SACs require strong anchoring of metal atoms to prevent demetallation while preserving the metal's electronic characteristics. In this respect, two-dimensional materials like graphene and borophene have emerged as promising substrates for SACs due to the lack of 3d orbitals, avoiding interfering with the active site, the metal center. Indeed, bilayer borophene has been recently synthesized on Ag(111), and Cu(111) [1-2], where the hexagonal structure found is consistent with two covalently bonded AA-stacking alpha-borophene layers containing hollow hexagons.

This work employs DFT calculations to investigate Fe and Co adatoms on free-standing bilayer borophene (BB) as single-atom catalysts for ORR. Our results indicate that BB is a semiconducting material with a bandgap of 0.7 eV. The metal adatoms strongly bind to the BB surface at the hollow sites, exhibiting binding energies higher than 2 eV, inducing metallicity and facilitating charge transport during electrocatalysis. Concerning the pristine BB, we observe that the metal incorporation reduces the work function by more than 1 eV. Increasing the adatom coverages further reduces the work function, thereby enhancing its charge transfer characteristics. Next, we examine the adsorption and dissociation of O₂ and OOH molecules on the metal adatoms for different metal coverages. Upon adsorption of O₂ and OOH, we find dissociation energy barriers of around 1.0 and 0.6 eV, respectively, where lower activation energies would be associated with a high-spin configuration for the metal-molecule adduct. The O₂ and OOH activation energies are lower than those previously reported on Fe/N/C catalysts [3], approaching those found on the Pt(111) surface, the most efficient ORR electrocatalyst.

Acknowledgments

We acknowledge support from the FONDECYT Project No. 1230138 and the Anillo Project ANID/ACT210059.

References

- [1] Liu X. et al. (2022), doi.org/10.1038/s41563-021-01084-2
- [2] Chen C. et al. (2022), doi.org/10.1038/s41557-021-00813-z
- [3] Lefevre M. et al. (2009), doi.org/10.1126/science.1170051

Exploring linkers and surfaces for enhanced environmental control with SURMOFs

Benjamín Sanhueza
*Department of Chemical
and Environmental
Engineering, Universidad
Técnica Federico Santa
María, San Joaquín,
Santiago, Chile*

Tania Sandoval
*Department of Chemical
and Environmental
Engineering, Universidad
Técnica Federico Santa
María, San Joaquín,
Santiago, Chile*

Industries in Chile have generated various pollutants, such as toluene, nitrobenzene, and PBDE, without achieving effective control due to the difficulty of measuring concentrations in-situ and accurately. Research development in detection of these contaminants has focused on seeking new technologies to improve the sensitivity, selectivity, and stability of the materials for detection. One candidate that has gained attention for the past few years are surface mounted molecular organic frameworks (SURMOFs), which are porous structures formed by metal ions and organic ligands that have active sites for the adsorption of analytes (contaminants), allowing detection through optical or conductive changes derived from modifications in their electronic structure.

This work focused on exploring different organic molecules that could be used either for surface linkers for MOFs or as organic ligands for the MOF structure. Density Functional Theory (DFT) calculations were used to explore the reactivity and luminescence of four curcuminoid ligands with carboxyl and amine groups, as well as silane ligands such as APTES, APDEMS, APDMES, and APDIPES. The HOMO and LUMO orbitals were calculated to examine their conductivity (insulators or semiconductors) using Orca software, the B3LYP functional, the 6-311+G** basis set, and the B3BJ dispersion correction. For adsorption studies, aluminum oxide was selected due to its stability and industrial applicability. For the Al₂O₃ cell, the corundum (0001) model was built using the VASP software, the GGA-PBE functional, and the D3BJ dispersion correction. Additionally, a convergence test was performed to determine the appropriate level of theory. Moreover, to strengthen the results, a stochastic method is being implemented to study the coverage and the distribution of these molecules in saturation conditions.

Preliminary results revealed that curcuminoids exhibit a BandGap close to 3 eV while silane molecules show a BandGap close to 7 eV, where linkers with BandGap \leq 3 eV contribute to conductive detections, and linkers with BandGap $>$ 4 eV contribute to optical detections. [1, 2]. Adsorption energies for curcuminoids with carboxylic anchoring were -0.7 eV, indicating chemisorption with hydroxylated aluminum. APTES and APDIPES had adsorption energies of -2.1 eV and -1.73 eV, respectively, demonstrating covalent bonding and hydrogen bridge formation. For more than one covalent anchoring, APTES exhibited positive adsorption energy values due to non-spontaneous thermodynamics.

In summary, the study of the properties of organic molecules for SURMOF applications has proven to be key in determining (i) the type of sensors/SURMOFs that can be built by these molecules and (ii) the best candidates to functionalize the surfaces. Our theoretical analysis strengthens experiments by enabling a robust and precise design of these nanomaterials, contributing to the development of innovative solutions in the environmental field.

Acknowledgments

I would like to express my gratitude to the collaborators of the project Anillo N°210059, titled "Functionalized Surfaces for Environmental Detection" (FUNSED), for granting me the opportunity to work on this project. to the Department of Chemical and Environmental Engineering at Universidad Técnica Federico Santa María for providing me with the necessary resources to conduct my Master's thesis. Finally, to the Centro Científico Tecnológico de Valparaíso (CCTVal) and the National Laboratory for High-Performance Computing Chile (NLHPC) for granting me access to their facilities, which played an important role in the calculations to my study.

References

- [1] Santos et al. (2016), doi.org/10.1016/j.optmat.2016.03.041
- [2] Whitesides et al. (2015), doi.org/10.1021/jacs.5b00448

Victor Hoyos
*Departamento de
Ciencias Físicas,
Universidad Andrés Bello,
Santiago, Chile.*

Walter Orellana
*Departamento de
Ciencias Físicas,
Universidad Andrés Bello,
Santiago, Chile*

Structural and electronic properties of M-MOF74 (M = Mn, Fe, Co) and their interaction with small molecules

Metal-organic frameworks (MOF) are highly ordered crystalline solids formed through the coordination bonding between organic ligands and metal-oxide clusters. These materials exhibit exceptional porosity, with pore volume accounting for up to 90% of their total volume and an impressive surface area of up to 6000 m²/g [1]. Within the realm of material chemistry, MOFs have attracted significant attention for their diverse range of applications, including energy storage, electrocatalysis, and gas separation. However, electrical properties and their control are still rare in literature. Among various MOFs, the MOF-74 family stands out as a particularly promising candidate due to its hexagonal channels along the c-axis, which possess a high concentration of accessible metal sites. This structural feature facilitates the interaction with incoming molecules and renders MOF74 frameworks potentially well-suited for applications such as sensing and heterogeneous catalysis. Recent experimental studies have successfully synthesized both monometallic and bimetallic versions of MOF74, showcasing excellent redox properties [2]. However, only a few theoretical calculations have been employed to investigate these properties further [3, 4].

In this study, we investigate the structural and electronic properties of M-MOF74 with M = Mn, Fe, and Co, through spin-polarized DFT calculations, utilizing the SCAN-rv10 exchange-correlation functional. To treat the strong on-site 3d electron-electron interactions of transition-metal atoms, appropriated Hubbard parameters U were added. The electronic properties reveal that the M-MOF74 are magnetic wide-band-gap semiconductors with energy gaps of around 2.4 eV and magnetic moments per metal of $m = 5, 4,$ and 3 Bohr mag. for M = Mn, Fe, and Co, respectively. Furthermore, we have also investigated the interaction of small molecules, namely O₂, NO, and CO, inside MOF74. Our results show that molecules attach to the metal centers of MOF74 with binding energy in the range between 0.4 and 0.8 eV, introducing energy levels in the MOFs' band gap, and giving a particular signature that can be used to identify these molecules. For instance, the O₂ molecule attaches to Fe-MOF74 with a binding energy of -0.80 eV, coupling with the Fe atom in a high-spin configuration ($m = 6$ Bohr mag.), while introducing two empty levels in the band gap at 0.4 and 0.6 eV above the valence band maximum. Hence, our investigation reveals that the interaction between molecules and MOF74 varies in intensity depending on the specific MOF metal. Consequently, our results suggest that MOF74 can fine-tune its electronic properties by employing different metals to suit specific applications in areas such as heterogeneous catalysis and the detection of small molecules.

Acknowledgments

We acknowledge support from the FONDECYT Project No. 1230138 and the Anillo Project ANID/ACT210059.

References

- [1] H. Furokawa et al. (2013), doi.org/10.1126/science.1230444
- [2] S. Xi et al. (2020), doi.org/10.1021/acsami.0c11035
- [3] Q. Zhang et al. (2013), doi.org/10.1021/ic400927m
- [4] K. Lee et al. (2015), doi.org/10.1021/cm502760q

Matias Zuñiga-Bustos
PiDi, UTEM

Jeffrey Comer
Kansas State University

Horacio Poblete
*CBSM, ND3, Universidad
de Talca*

Thermodynamics of the physisorption of capping agents on silver nanoparticles

Nanoscale silver particles have growing applications in biomedical and other technologies due to their unique antibacterial, optical, and electrical properties. The preparation of metal nanoparticles requires the action of a capping agent, such as thiol-containing compounds, to provide colloidal stability, prevent agglomeration, stop uncontrolled growth, and attenuate oxidative damage. However, despite the extensive use of these thiol-based capping agents, the structure of the capping agent layers on the metal surface and the thermodynamics of the formation of these layers remains poorly understood. Here, we leverage molecular dynamics simulations and free energy calculation techniques, to study the behavior of citrate and four thiol-containing capping agents commonly used to protect silver nanoparticles from oxidation. We have studied the single-molecule adsorption of these capping agents to the metal–water interface, their coalescence into clusters, and the formation of complete monolayers covering the metal nanoparticle. At sufficiently high concentrations, we find that allylmercaptan, lipoic acid, and mercaptohexanol spontaneously self-assemble into ordered layers with the thiol group in contact with the metal surface. The high density and ordered structure is presumably responsible for their improved protective characteristics relative to the other compounds studied

Acknowledgments

Fondecyt 1211143.

References

[1] Zuñiga-Bustos M., et al. (2023), [doi.org/doi.org/10.1039/D2CP06002G](https://doi.org/10.1039/D2CP06002G)

Majorana edge states in Josephson junctions

Alejandro Garrido H.
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Pedro Orellana
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Alex Matos-Abiague
Wayne State University

We theoretically investigate the localization properties of Majorana bound states (MBSs) in proximitized, planar Josephson Junctions (JJs) oriented along different crystallographic orientations and in the presence of an in-plane magnetic field and spin-orbit coupling. We predict two types of MBSs may emerge when the junction transits into the topological superconducting state. In one case, referred to as end MBSs, the Majorana quasiparticles are mainly localized inside the normal region, at the opposite ends of the junction, while edge MBSs localize at the two opposite edges of the system, perpendicular to the junction. We show how the localization length characterizing the MBSs depends on the magnetic field, the junction crystallographic orientation, and the phase difference between the superconductors. The control and manipulation of the localization length by rotating the in-plane magnetic field and/or tuning the superconducting phase difference with an external magnetic flux provides a new tool for modulating the coupling strength between neighboring MBSs, which is vital for performing quantum operations relevant to topological quantum computing applications.

Acknowledgments

A.P. Garrido is grateful for the funding of scholarship ANID-Chile No. 21210410.

References

[1] J.D. Pakizer et al. (2021), doi.org/10.1103/PhysRevResearch.3.013198

Towards biocompatible nanoparticle coatings: utilizing amino acid-like agents for enhanced metal properties

Francisca Salas

Sepúlveda

Center for Bioinformatics, Simulation, and Modelling (CBSM), Faculty of Engineering, Universidad de Talca, Talca, Chile

Matias Zuñiga-Bustos

Programa Institucional de Fomento a la Investigación, Desarrollo e Innovación (PIDi), Universidad Tecnológica Metropolitana, Santiago, Chile

Horacio Poblete

Center for Bioinformatics, Simulation, and Modelling (CBSM), Faculty of Engineering, Universidad de Talca, Talca, Chile

Silver nanoparticles (AgNPs) are widely used in cosmetics to biomedicine, used due to their antibacterial, optical, electrical, and physicochemical properties. Beyond their intended use, it is crucial to acknowledge that the properties of nanoparticles are influenced by several factors, including the nature, size, and shape of the protective agents on their surface, as well as the specific environment in which they are employed, be it biological or non-biological. When considering peptides as stabilizing agents, their utility is hindered by susceptibility to protease degradation. In this context, the introduction of non-proteinogenic (nAA) as an alternative for NPs functionalization offers advantages such as facile synthesis, optimal pharmacokinetic profiles, and protease resistance, making them an attractive option for biostabilizing NPs.

Classical molecular dynamics simulations and enhancing sampling methods have successfully estimated the molecule adsorption's thermodynamic and structural components to metal nanoparticles. Recently, Zuñiga-Bustos [1] explained the thermodynamics of the adsorption of five classic silver protective agents in three consecutive stages.

In this ongoing study, a similar protocol will be employed; utilizing non-proteinogenic amino acid (nAA) as protective agents with characteristics similar to the thiol-containing agents to propose biocompatible agents capable of maintaining or enhancing the metal properties of the nanoparticle. We studied the single-molecule adsorption of a selected group of nAA with thiol group: Norvaline, thio-citrulline, penicillamine, homocysteine; and without thiol: Naphthyl-alanine, 4-methoxy-Phenylalanine and 7-hydroxy-L-tryptophan to a nano-silver surface. Additionally, we test different concentrations of NaCl to evaluate the protection ratio under physiological conditions, using a combination of molecular dynamics and advanced free energy calculation techniques.

We moved from neutralizing to oversaturating the systems to test how these nAA could stabilize in biological settings. In scenarios with neutral concentrations, thiol-containing nAA showed stronger binding to the silver surface compared to non-thiol versions. Thiol groups made closer contact with silver using sulfur atoms, while the rest of the structure was exposed to the solvent. As salt concentration increased, nAA could displace ions and water molecules, making contact with silver, though it was more challenging than in neutral conditions. The results highlighted issues with the force fields used, especially in describing interactions between NaCl ions and silver. Therefore, the next step is to explore how a polarizable force field like ReaxFF affects nAA adsorption onto a silver surface with varying ionic concentrations.

Acknowledgments

FONDECYT 1211143 AND FONDECYT INICIACION 11230976.

References

[1] Zuñiga-Bustos et al. (2023), doi.org/10.1039/D2CP06002G

Arquitectura a nanoescala: diseño y modelado de nanopartículas bimetálicas para aplicaciones avanzadas

Samuel Baltazar

*Departamento de Física y
CEDENNA, Universidad
de Santiago de Chile,
Santiago, Chile*

Javier Rojas

*Departamento de Física y
CEDENNA, Universidad
de Santiago de Chile,
Santiago, Chile*

Rafael Melo

*Instituto de
Investigaciones
Agropecuarias, Santiago,
Chile*

Pamela Sepúlveda

*Universidad Mayor,
Santiago, Chile*

Las nanopartículas bimetálicas han despertado un creciente interés en el ámbito científico debido a la interacción sinérgica entre los dos componentes, la cual puede dar lugar a características y propiedades distintas a las de los materiales prístinos, dependiendo del grado de composición. Estas nanopartículas son relevantes en diversos campos como la electrónica, la medicina y la catalización, gracias a sus propiedades electrónicas, magnéticas y ópticas. En este trabajo, nos enfocamos en examinar la correlación entre la morfología, concentración, tamaño y composición de nanopartículas bimetálicas, cuyas dimensiones son comparables a las obtenidas por síntesis experimental. En particular, se investigan casos como nanopartículas de AgCu, FeCu y AgCo, entre otros, utilizando modelos teóricos y simulaciones de dinámica molecular para analizar la estructura, comparando y complementando estos resultados con evidencia experimental obtenida por síntesis de reducción química. Se ha observado que las nanopartículas exhiben morfologías preferenciales, como núcleo-corteza, tipo Janus o aleaciones, dependiendo del tamaño y la concentración de las mismas [1]. Nuestro modelado se basa en métodos de optimización energética, empleando potenciales de interacción atómica del tipo embedded-atom (EAM) [2], y un proceso de annealing con dinámica molecular. Posteriormente, identificamos estructuras estables y metaestables en función de la concentración. Aunque hemos encontrado distintos grados de correspondencia entre nuestros modelos teóricos y los resultados experimentales, estas discrepancias pueden explicarse a partir del método de síntesis empleado. Esto nos ha permitido proponer morfologías de nanopartículas bimetálicas que pueden ser controladas mediante la selección de parámetros de síntesis y métodos de minimización energética. En particular, para los casos de FeCu y AgCu, se ha identificado una preferencia por estructuras tipo núcleo-corteza y tipo Janus para concentraciones bajas y altas de Cu, respectivamente [3]. Finalmente, este estudio ha permitido no solo generar un procedimiento sistemático para obtener nanopartículas estables, sino que también ayudar a optimizar procesos como la remediación de aguas contaminadas. Esto demuestra la utilidad de estos estudios para el diseño estratégico de nanopartículas bimetálicas que pueden ser aplicadas en diversas problemáticas.

Agradecimientos

Agradecemos el financiamiento de proyecto DICYT-USACH Regular 042331BR y de Fondo basal para centros científicos y tecnológicos proyecto AFB220001.

Referencias

- [1] Rojas-Nunez J. et al. (2018), doi.org/10.1021/acs.jpcc.7b11556
- [2] Mishin Y. et al. (1999), doi.org/10.1103/PhysRevB.59.3393
- [3] Freire R. et al. (2020), doi.org/10.1039/d0qi00940g

Modificando las propiedades termoeléctricas en nanocintas de siliceno dopadas

Kevin González

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

César Núñez

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

Luis Rosales

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

Pedro Orellana

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

Investigamos el transporte electrónico a través de redes hexagonales [1] de siliceno [2], dopadas y en presencia de un potencial efectivo generado por los "adatoms" a partir de un campo eléctrico externo, para esto consideramos una nanocinta en forma "armchair" [3] dividida en tres regiones: dos guías semi-infinitas y un conductor central completamente dopado donde las impurezas están ligadas a los sitios en el cristal.

Reducimos el problema a una cadena unidimensional diatómica usando el modelo de enlace fuerte [4] para describir el Hamiltoniano del sistema, escribimos las ecuaciones de movimiento y obtuvimos de forma analítica la probabilidad de transmisión en función de la energía $T(\epsilon)$. Con este resultado obtenemos las propiedades termoeléctricas del sistema [5] en función del confinamiento geométrico y del campo externo.

Nuestros resultados muestran un aumento del coeficiente Seebeck cuando un campo eléctrico transversal es aplicado a la región del conductor para diferentes temperaturas. Además, se observa una violación de la ley de Wiedemann-Franz alrededor de la energía de los "adatom". Nuestros resultados sugieren que las propiedades termoeléctricas de nanocintas dopadas de silicenos pueden ser modificadas de forma eficiente con perturbaciones externas.

Agradecimientos

Soporte financiero por FONDECYT, proyectos 1220700 y 1201876.

Referencias

- [1] Castro Neto A. H. et al. (2009), doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109
- [2] Boukai A. I. et al. (2008), doi.org/10.1038/nature06458
- [3] Pan L. et al. (2003), doi.org/10.1039/C2CP42645E
- [4] Reich S. et al. (2002), doi.org/10.1103/PhysRevB.66.035412
- [5] Gómez-Silva G. et al. (2012), doi.org/10.1063/1.3689817

Exploring electron-electron interaction in transition metals: a case study of CrI₃

Diego Lauer
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Eric Suarez
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Jhon W. Gonzalez
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Andrés Ayuela
*Donostia International
Physics Center (DIPC)*

El estudio de materiales bidimensionales (2D) ha traído sorprendentes resultados en el área de la física. La lista de posibles materiales 2D no deja de crecer y no está limitada por una sola capa atómica (grafeno, siliceno, fosforeno...), también incluye materiales con dos o más componentes formando planos atómicos fuertemente ligados (dicalcogenuros de metales de transición, haluros de metales de transición) [1, 2].

Recientemente se midieron las propiedades magnéticas en monocapas de la familia de los trihaluros de metales de transición, en específico, CrI₃ [3, 4]. Debido a efectos de repulsión y localización electrónica, la descripción apropiada de los orbitales 3d del Cr es compleja. En el marco de la teoría de la densidad funcional (DFT), el problema de localización se intenta solucionar principalmente de dos maneras; con funcionales híbridos (por ejemplo HSE06) que incorporan una parte del intercambio exacto de la teoría Hartree-Fock, o incluyendo un parámetro de repulsión electrónica U-Hubbard. Por una parte, usar funcionales híbridos es computacionalmente costoso, y, por la otra parte, el término U-Hubbard no es transferible y no puede ser determinado directamente.

La literatura nos cuenta que el valor del U-Hubbard del cromo no está establecida, por lo que se usan valores que fluctúan entre 1, 3 e incluso 6.61 eV [5-8]. Dada la importancia de este término para corregir la localización de los orbitales 3d, establecer un valor fijo es de suma importancia.

Con el objetivo de replicar las propiedades electrónicas del CrI₃ calculadas con funcionales híbridos (HSE06), usando un modelo simplificado DFT usando correcciones U-Hubbard en los orbitales d-Cr y p-I, incluimos los efectos de localización en orbitales p (inducidos por la hibridización de los orbitales p del átomo halógeno). Los resultados indican que un valor de 3.5 eV para el átomo de cromo da resultados aceptables, pero al incluir una corrección de 2 eV para los niveles 2p en el átomo de yodo se logra seguir más fielmente la tendencia del funcional HSE06 en la densidad de estados. Posteriormente usaremos este modelo simplificado para calcular las propiedades ópticas del CrI₃ y contrastarlas con reportes experimentales.

Acknowledgments

Authors acknowledges financial support from ANID-FONDECYT 1221301, Spanish Ministry of Science and Innovation through grant PID2019-105488GB-I00 and the Donostia International Physics Center (DIPC).

References

- [1] Chengxi Huang, et al. (2018), doi.org/10.1103/PhysRevLett.120.147601
- [2] F. Gonca Aras, et al. (2022), doi.org/10.1016/j.mssp.2022.106829
- [3] Bevin Huang, et al. (2017), doi.org/10.1038/nature22391
- [4] Andrea Leon, et al. (2020), doi.org/10.1088/2053-1583/ab8268
- [5] Vijay Kumar, et al. (2019), doi.org/10.1088/1367-2630/ab1ae9
- [6] Qiang Yang, et al. (2021), doi.org/10.1021/acsami.1c01701
- [7] Ilya Kashin, et al. (2020), doi.org/10.1088/2053-1583/ab72d8
- [8] Fatemeh Haddadi, et al. (2023), doi.org/10.48550/arXiv.2306.06286

T712: Modelamiento y simulación de materiales, estructuras y dispositivos nanométricos

Estudio teórico-computacional de MOF con nuevos ligandos de tipo curcuminoide para la detección de contaminantes emergentes

Nicole Guerra Carrasco

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile

Tania Sandoval

Departamento de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Técnica Federico Santa María, Santiago, Chile

Nicole Parra

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile

Mónica Soler

Departamento de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales, Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Universidad de Chile, Santiago, Chile

Las redes metal-orgánicas (MOFs) son redes cristalinas porosas formadas por la coordinación de iones o clústeres metálicos con ligandos orgánicos. Estas presentan propiedades innovadoras, como una gran área superficial específica, estabilidad térmica y mecánica, volumen de poro y sitios coordinantes que regulan la capacidad de adsorción de analitos. Debido a la variedad de estructuras que se pueden crear, los MOFs muestran gran potencial en áreas como separación de gases, catálisis, óptica y sensores. Los MOFs tienen diversas aplicaciones como sensores de moléculas e iones gracias a su capacidad de ser diseñados con sitios activos, como centros metálicos coordinativamente insaturados y ligandos con sitios ácidos/básicos expuestos. Estos sitios permiten la interacción con variados analitos, incluyendo contaminantes emergentes como moléculas nitroaromáticas. La curcumina, reconocida por sus propiedades ópticas de detección, se utiliza como quimiosensor para identificar diferentes compuestos contaminantes. Los derivados de la curcumina, conocidos como curcuminoides, poseen una estructura diarilheptanoide y pueden presentar diversos grupos químicos terminales. Estos ligandos se consideran excelentes candidatos para los MOFs debido a la presencia del grupo β -dicetona, que puede coordinarse con metales, y un sistema π conjugado que les confiere propiedades ópticas distintivas. Debido a que los MOFs poseen una estructura y un comportamiento dinámico complejo, existe la necesidad de modelar a través de cálculos teóricos su estructura, superficie expuesta y reactividad. Actualmente, las simulaciones son aceptadas como una herramienta que robustece y complementa los métodos experimentales tradicionales, ya que puede ayudar a predecir sistemas fuera del alcance experimental, y ayuda a comprender las propiedades y la reactividad de nuevos materiales. En este trabajo se realiza, a través de cálculos de DFT, un estudio teórico de las propiedades físicas y electrónicas de nuevos MOFs con ligandos tipo curcuminoide (con variados grupos ácidos y ésteres terminales) y clústeres metálicos tipo paddlewheel y triángulo (con metales como Cu, Fe, Zn). Los métodos computacionales utilizados dependen de la naturaleza del sistema a analizar: para sistemas tipo clúster de moléculas, se utiliza ORCA con el funcional B3LYP, basisset 6-311+G(d,p) y corrección de dispersión D3BJ; para sistemas periódicos se utiliza VASP con GGA-PBE y corrección de dispersión D3BJ, el benchmark del nivel de teoría fue determinado a partir de un test de convergencia, en donde los valores óptimos para el estudio de cada sistema se obtuvieron siguiendo los estándares establecidos en la literatura. Además, como parte del estudio, se realizó un análisis teórico del rendimiento cuántico de los ligandos curcuminoides por sí solos. Este determinó su eficiencia en la absorción y emisión de luz, así como su capacidad para

actuar como sensores ópticos. Los resultados de este estudio serán útiles para evaluar la integración con los MOFs analizados.

Agradecimientos

Se agradece el financiamiento proveniente de los proyectos ANID Fondecyt Regular 1201962, el proyecto ANILLO ANID/ACT210059 y a la Beca Doctorado Nacional N°21231961.

Referencias

- [1] MOHAMMADI, A. A., et al. (2017), doi.org/10.1007/s13762-017-1289-z
- [2] WANG, J. X, et al. (2022), doi.org/10.1021/acsami.1c24759
- [3] CAR R., AND PARRINELLO M. (1985), doi.org/10.1103/PhysRevLett.55.2471

Nicolás Plaza
*Universidad de Santiago
y CEDENNA*

Javier Rojas
*Universidad de Santiago
y CEDENNA*

Samuel Baltazar
*Universidad de Santiago
y CEDENNA*

Eduardo Bríngara
*Universidad de Mendoza
y CONICET*

Comportamiento mecánico de una lámina de óxido de grafeno bajo estrés: un estudio de los grados de oxidación y segregación

El grafeno es uno de los materiales más estudiados de la actualidad, debido a sus propiedades mecánicas, eléctricas, entre otras. Este consiste en una capa monoatómica de una red hexagonal de carbono. Podemos cambiar sus propiedades si oxidamos estas láminas de grafeno, así obtenemos un material conocido como óxido de grafeno (GO). Esta oxidación puede presentarse de distintas formas, los grupos funcionales que se forman en la estructura pueden ser de tipo epóxido e hidroxilo (y grupos carbonilos en los bordes de la lámina). A su vez, estos grupos pueden presentarse en distintas razones, dependiendo del método de síntesis con que se prepara el GO. Otra manera en que se presenta la oxidación es la agregación. Esto significa que usualmente los grupos funcionales se encuentran muy cercanos entre sí, dejando zonas de grafeno prístino en la lámina de GO. Estas “islas” de óxido pueden tener distintos tamaños, por lo que resulta interesante estudiar las propiedades de la lámina en función del grado de segregación: mientras más segregadas se encuentren las islas, más homogénea será la distribución. En este trabajo estudiamos el comportamiento de distintas láminas de GO bajo un estiramiento constante en función de su grado de oxidación y su grado de segregación.

Para llevar esto a cabo utilizamos el software de dinámica molecular LAMMPS [1]. Las simulaciones se realizaron con un potencial REAXFF [2]. Se generaron láminas de 20x20 nm con distintos grados de oxidación y con dos tipos de segregación: homogéneas y segregadas [3]. La proporción entre grupos epóxidos e hidroxilos se mantuvo fijo en 2:1 respectivamente. Antes de comenzar la deformación las láminas fueron relajadas a 300 K.

A continuación se sometieron las láminas a una deformación uniaxial en la dirección zig-zag con una razón de estiramiento constante. Pudimos observar que las láminas homogéneas resisten mucho más estrés que sus contrapartes segregadas, lo cual se debe a la falta de puntos débiles ubicados en la interfase de GO/grafeno. Observamos también que las zonas donde la fractura es más probable son aquellas donde la cantidad de GO perpendicular al eje de deformación es mayor. Para esto probamos deformando láminas con islas de óxido rectangulares de distintas longitudes, y encontramos una proporcionalidad entre la cantidad de GO transversal y el mayor estrés soportado por la lámina. Finalmente estudiamos la relación entre la resistencia de la lámina y la razón entre los grupos epóxidos e hidroxilos, encontrando que los primeros son más propensos a generar puntos de nucleación y por lo tanto disminuyendo la resistencia del GO frente al estiramiento.

Agradecimientos

Agradecemos el financiamiento de proyecto DICYT 042331BR_Postdoc VRIDEI y de Fondo basal para centros científicos y tecnológicos proyecto AFB220001 y Facultad de Ciencia, USACH.

Referencias

- [1] Plimpton S. (1995), doi.org/10.1006/jcph.1995.1039
- [2] Chenoweth K. et al. (2008), doi.org/10.1021/jp709896w
- [3] Sinclair R. et al. (2019), doi.org/10.1021/acs.jcim.9b00114

Unraveling the delayed fluorescence mechanism of Copper(I) dyes from DFT calculations

Raul Guajardo-Maturana

Universidad SEK,
Facultad de Ciencias de
la Salud, Instituto de
Investigación
Interdisciplinar en
Ciencias Biomédicas
SEK (I3CBSEK) Chile,
Providencia, Santiago,
Chile.

Francisca

Clavería-Cadiz
Programa de Doctorado
Conjunto en Ciencias
Mención Química,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile /
Universidad de
Valparaíso, Valparaíso,
Chile.

Alvaro Muñoz-Castro

Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián, Santiago,
Chile

Departamento de
Química, Universidad
Técnica Federico
Santa María, Av. Santa
María 6400, 7660251,
Santiago, Chile.

Programa de Doctorado
Conjunto en Ciencias
Mención Química,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile; and
Universidad de
Valparaíso, Valparaíso,
Chile.

Several copper complexes exhibiting luminescent properties have been studied. In this context, the possibility of incorporating them into the architecture of organic light emitting diode (OLED) devices has been investigated to improve their efficiency as a descriptor of photophysical stability for predicting the suitability and character of the emissive material. Specifically, we unraveled the excitation mechanism of the Cu(I)X(dppt)(PPh₃) complex [X = Br, I, dppt = 3,4-bis(diphenylphosphino)thiophene]. Since the intersystem crossing (ISC) depicts an important process, where the knowledge of the rate constant value enables the assessment of the suitability of the material, we calculated the reverse and intersystem crossing rates for the Cu(I) complexes contrasting with pure organic thermally activated delayed fluorescence (TADF) emitters, with the goal to emphasize that the structural design of the mononuclear copper(I) complexes results in similar singlet-triplet gaps, ST, values (0.1 eV). Moreover, a remarkable enhancement of spin-orbit coupling has been shown which allows achieving ISC rates in the ns scale. The calculations were made in the framework of Time-dependent density functional theory (TD-DFT) level with the accurate response of large molecules studied here.

Acknowledgments

This work was supported by FONDECYT ANID Regular 1221676. Powered@NLHPC: This research was partially supported by the super- computing infrastructure of the NLHPC (ECM-02).

Topological bands in the PdSe₂ pentagonal monolayer

Sergio Bravo

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

M. Pacheco

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María*

J.D. correa

*Facultad de Ciencias
Básicas, Universidad de
Medellín*

Leonor Chico

*Departamento de Física
de Materiales, Facultad
de Ciencias Físicas,
Universidad Complutense
de Madrid*

In this presentation a theoretical study of the topological features of pentagonal Palladium diselenide (PdSe₂) in its monolayer form will be developed. As a recently synthesized transition metal dichalcogenide, pentagonal PdSe₂ is an appealing platform to explore the interplay of reduced dimensionality, low crystalline symmetry, electronic correlations, and topological effects.

By means of first-principles calculations, using density functional theory along with topological quantum chemistry theory, we present a panorama of the symmetry-indicated electronic band topology of the material. A group of bands with strong topology is identified in the set of the low-lying conduction bands and an associated possible physical response is discussed, as presented in [1]. Also, the valence band manifold of the system is analyzed and an obstructed atomic phase is spotted. This novel phase is linked to a higher-order type of nontrivial topology and the presence of corner states and charges realizing a bulk-boundary correspondence is addressed.

Acknowledgments

This work has been partially supported by the Postdoctoral Grant from the Universidad Técnica Federico Santa María, the Chilean FONDECYT Grant 1211913, Spanish MCIU and AEI and the European Union under Grant No. PGC2018- 097018-B-I00 (MCIU/AEI/FEDER, UE), and by Grant USM-DGIIIP PI-LI 1925.

References

[1] Bravo S. et al. (2022), doi.org/10.1039/D2CP01822E

Simulations in graphene oxide: Benefits of molecular dynamics in nanotechnology

Javier Rojas-Nunez
*Physics Department and
CEDENNA, Universidad
de Santiago de Chile*

Eduardo Bringa
*CONICET & Facultad de
Ingeniería, Universidad de
Mendoza*

Alejandra García
*Laboratorio de síntesis y
modificación de
nanoestructuras y ma-
teriales bidimensionales,
Centro de Investigación
en Materiales Avanzados*

Samuel Baltazar
*Physics Department and
CEDENNA, Universidad
de Santiago de Chile*

The better understanding of nanomaterial properties will be a key factor to tailor and enhance properties of new materials. Graphene oxide in particular can be synthesized with different oxidation levels in order to gain similar properties to its deoxidized counterpart, graphene. Through the molecular dynamic simulations, the atomistic behavior of a tri-layer graphene membrane under mechanical indentation, highlighting the importance of molecular dynamics in the analysis.

This work will study a highly oxidized graphene oxide tri-layer that will be indented with a repulsive spherical indenter. The modeling of the membrane will generate single layer graphene oxide candidates to pick the lowest energy configuration and later stack this layer over itself. The simulations were performed using the software LAMMPS [1] along with the REAXFF [2] interatomic potential. Thanks to this approach, atomic positions of graphene oxide can be analyzed along the whole process.

These thin membranes have a known behavior when the indentation force is strong enough. In that regime the reaction force grows along the cube of the penetration magnitude [3]. For these simulations the behavior followed the membrane behavior with some differences which can be attributed to geometrical or intrinsic non-itineraries [4]. A deeper analysis in atomic configuration allow to recognize suggest an important role of epoxide groups in the mechanical deformation of the membrane. All these results, show the relevance of computational simulations to connect theoretical approaches and material characteristics.

Acknowledgments

SB and JRN acknowledge the support from the Basal Program for Centers of Excellence, Grant AFB220001 CEDENNA, CONICYT, and the support of VRIDEI POSTDOC_DICYT under project 042231BR_Postdoc.

References

- [1] Plimpton S. et al. (1995), doi.org/10.1006/jcph.1995.1039
- [2] Chenoweth K. et al. (2008), doi.org/10.1021/jp709896w
- [3] Komaragiri U. et al. (2005), doi.org/10.1115/1.1827246
- [4] Chandler T. et al. (2020), doi.org/10.1016/j.jmps.2020.104109

Magnetocaloric effect in q-clock system

Sergio Pino

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María / 2
Millennium Nucleus in
NanoBioPhysics (NNBP)*

Francisco J. Peña

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María /
Millennium Nucleus in
NanoBioPhysics (NNBP)*

Patricio Vargas

*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María /
Departamento de Física,
CEDENNA, Universidad
de Santiago de Chile
(USACH)*

The Magnetocaloric effect, which is the thermic response of a material to the influence of an external magnetic field, is a phenomenon of interest in current research because of its applications in refrigeration techniques and use in sustainable energy [1]. The object of study is the statistical mechanics and thermodynamics of 2D semiclassical ferromagnetic spin systems with interactions with the nearest neighbors and an external magnetic field, which can exhibit a variety of phase transitions [2], with possibilities to extend this work with the inclusion of more interactions and use 3D systems.

In this work, we study the MCE at different temperatures of a q -clock system with an external magnetic field and q with even values from 2 to 8, which discretizes the XY model. We use a Monte Carlo program on a $L \times L$ square lattice with free borders with different L values to obtain our statistical and thermodynamical quantities. For $q > 4$, our system exhibits two phase transitions, and the greater MCE is found at $q=4$, increasing with more external field applied. Also, our normalized results don't show a significant difference in behavior concerning to different size of the lattice explored in our study ($3 \times 3, 16 \times 16, 32 \times 32$ and 64×64).

Acknowledgments

P.V. acknowledges support from ANID Fondecyt grant No. 1210312 and to ANID PIA/Basal grant No. AFB180001. F.J.P. acknowledges support from ANID Fondecyt, Iniciación en Investigación 2020 grant No. 11200032, ANID Fondecyt grant No. 1210312 and USM-DGIIE. This work was partially funded by ANID - Millennium Science Initiative Program - NNBP # NCN2021_021.

References

- [1] Gómez, J. R., et al. (2013), doi.org/10.1016/j.rser.2012.09.027
- [2] Negrete, O. A., et al. (2018), doi.org/10.3390/e20120933

Effects of random vacancies on the spin-dependent thermoelectric properties of silicene nanoribbon

Cesar Núñez

*Universidad Técnica
Federico Santa María*

David Zambrano

*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Luis Rosales

*Universidad Técnica
Federico Santa María*

In this work we investigate the spin-dependent thermoelectrical properties of silicene nanoribbon heterostructures, composed by a central conductor which contains a random distribution of vacancies, connected to two pristine leads of the same material. By using a tight binding Hamiltonian and within the Green's function formalism, we have calculated the spin-thermoelectric properties of the proposed system as a function of the geometrical confinement and the concentration of vacancies. Our results exhibit an enhancement of the charge and spin dependent thermopower and the consequent improvement of the thermoelectrical efficiency at room temperature, suggesting that defected silicene nanoribbons can be efficient thermoelectric devices.

Acknowledgments

L.R. thank the financial support by FONDECYT Grant No.1220700 and DGIIP-USM grant. D.Z. acknowledges support from USM-Chile under Grant PI-LIR-2022-13.

References

- [1] Goldsmid, H.J. (2010), doi.org/10.1007/978-3-642-00716-3
- [2] Villagonzalo, C. et al. (1999), doi.org/10.1007/s100510050994
- [3] Gayner, C. et al. (2016), doi.org/10.1016/j.pmatsci.2016.07.002
- [4] Hicks, L.D. et al. (1993), doi.org/10.1103/PhysRevB.47.16631
- [5] Khitun, A. et al. (2000), doi.org/10.1063/1.373723

Surface favorable composition of [FA,Cs]PbI₃ perovskite alloys for efficient and stable solar cells

María José Silva Portales

*Departamento de Física,
Facultad de Ciencias
Naturales, Matemática y
del Medio Ambiente
(FCNMM), Universidad
Tecnológica
Metropolitana, Santiago,
Chile*

Lucas Lodeiro

*Departamento de
Química, Facultad de
Ciencias, Universidad de
Chile, Santiago, Chile*

Eduardo Menéndez
Proupin

*Departamento de Física
Aplicada I, Escuela
Politécnica Superior,
Universidad de Sevilla,
Seville, Spain*

Ana L. Montero Alejo

*Departamento de Física,
Facultad de Ciencias
Naturales, Matemática y
del Medio Ambiente
(FCNMM), Universidad
Tecnológica
Metropolitana, Santiago,
Chile*

Solar cells based on Halide Perovskites (HPs) have become the new paradigm for energy photoconversion with efficiencies comparable to silicon cells. Perovskite solar cells (PSCs) already achieve a power conversion efficiency (PCE) of 26% in single-junction devices and 33.7% in silicon/perovskite tandem architecture [1]. HPs have good absorption and charge transport properties but are unstable under ambient and operating conditions of the solar cell. Current research is looking for alloys of this material as an alternative of stable compositions, preserving their electronic properties that allow maintaining and/or increasing the efficiency of solar cells [2].

In this work, the surfaces of the mixed-cation of formamidinium (FA) and cesium (Cs) lead iodide perovskite [FA,Cs]PbI₃ were computationally designed to predict the favorable compositions to form stable interfaces in PSCs. The methodology consisted of generating surface models cutting in the [001] direction of the cubic phase of special quasi-random structures of the [FA_{1-x}Cs_x]PbI₃ (x=0.25 and 0.5) alloys [3], and of the pure components FAPbI₃ and CsPbI₃ as reference systems. The stability as a function of the surface composition was assessed calculating the surface energy by means of Density Functional Theory (DFT) treatment using PBE functional and including Van der Waals corrections. In addition, the energy of the electronic surface states was calculated, explicitly considering the spin-orbit coupling effects, to estimate the variation of the electronic properties with the surface composition [4].

The results show that the surfaces terminated in AI (A= FA, Cs), either in the pure compounds or in the mixtures terminated with formamidinium iodide (FAI) and cesium iodide (CsI), have lower surface energy than those terminated in lead iodide, PbI₂, due to their incomplete coordination of surface Pb atoms. Alloys of FAPbI₃ with 50% and 25% of Cs generate more stable surfaces than pure compound only if the surface ends in PbI₂. When the surfaces end with the mixed composition of FAI and CsI, the stability with respect to the pure FAPbI₃ is reached with 25% of Cs. The energy of the band edge states of alloy surfaces can be shifted up to 0.16 eV with respect to the corresponding energies of pure compounds. These changes in the electronic levels can be used to favor the device charge transport, and thus achieve greater efficiency in solar cells, which use stable perovskite alloys [5].

Acknowledgments

This work was supported by the ANID/CONICYT/ FONDECYT Iniciación 11180984 grants.
Powered@NLHPC: This research was partially supported by the supercomputing infrastructure of the NLHPC (ECM-02).

References

- [1] NREL. Chart on record cell efficiencies (rev. 05-26-2023)
<https://www.nrel.gov/pv/cell-efficiency.html>.
- [2] Zhang, D. et al. (2022), doi.org/10.1038/s43246-022-00281-z
- [3] Dalpian, G. M. et al. (2019), doi.org/10.1021/acs.chemmater.8b05329
- [4] Lodeiro, L. et al. (2020), doi.org/10.1021/acsomega.0c04420
- [5] Montero-Alejo, A. L. et al. (2023), doi.org/10.1021/acs.jpcc.2c06499

Modelling of the higher-order inclusion nanocomplexes of lurasidone HCl with β -cyclodextrin and hydroxypropyl- β -cyclodextrin

Gabriela Pulgares
Contreras

*Departamento de
Ciencias del Ambiente,
Facultad de Química y
Biología, Universidad de
Santiago de Chile*

Belén González

*Departamento de
Ciencias del Ambiente,
Facultad de Química y
Biología, Universidad de
Santiago de Chile*

María Elena Gamboa -
Arancibia

*Departamento de
Ciencias del Ambiente,
Facultad de Química y
Biología, Universidad de
Santiago de Chile*

Alexander Gamboa

*Departamento de
Ciencias del Ambiente,
Facultad de Química y
Biología, Universidad de
Santiago de Chile*

Sebastián Miranda -
Rojas

*Departamento de
Ciencias Químicas,
Facultad de Ciencias
Exactas, Universidad
Andrés Bello*

Lurasidone hydrochloride (LRD) is an atypical antipsychotic drug approved by the FDA for treating schizophrenia and bipolar disorder (manic depression) in adults and adolescents. It belongs to the second generation of the antipsychotic family. The drug presents polymorphism and has been described in several crystalline forms and as an amorphous solid. This phenomenon has huge impact on the bioavailability, processability, and stability of solid pharmaceutical forms. LRD's absorption is between 9 and 19%, and its T_{max} ranges between 1.5 and 3 h after a single and double dose, respectively. It is eliminated through the feces and urine, accounting for 80 and 9%, respectively. While its BCS class has not been reported, it has been suggested that LRD could be a class II drug due to its low aqueous solubility and its high partition coefficient. The formation of inclusion nanocomplexes of LRD with β -cyclodextrin and hydroxypropyl- β -cyclodextrin is a successful strategy to increase the solubility [1]. To obtain a clearer picture of the possible binding modes and stabilities of LRD nanocomplexes, we proceeded by obtaining complexes using both BCD and HPBCD for comparative purposes, aiming to shed light on the advantages of the use of HPBCD with respect to BCD. The starting models for BCD and HPBCD were obtained from a previous study with catechin, in which, the best-suited HPBCD model was selected according to its ability to reproduce NMR experimental observations. For both host and guest, a conformational search for the lowest energy conformation was carried out using the metadynamics approach as implemented in the x-TB v6.5.1 software, through the crest module. The selected conformations of LRD, BCD and HPBCD were posteriorly refined through the use of density functional theory (DFT) calculations. All DFT calculations included the dispersion correction developed by Grimme with the damping function to correct for close interactions. The refined geometries were used as the starting coordinates for the docking studies. The docking calculations were performed using the AutoDock4 software by means of the Lamarckian genetic algorithm as a search method, as implemented in the program. The results associated with the interaction energies (ΔE_{int}), the interaction energies corrected by solvent (ΔE_{int-S}), and the dipolar moments (μ) indicated that for the first inclusion process, we found a clear dependence of the protonation state of LRD and the type of host. The computational models obtained confirm the stability of the complex formed between LRD and HPBCD, and also support the possibility of an energetically favored 1:2 ratio. The gain in complex formation exceeds the thermodynamic penalty, indicating greater stability. A higher dipole moment

Franco Hernández
*Universidad Técnica
Federico Santa María
(UTFSM) - Universidad
de Valparaíso (UV)*

Eduardo Berríos
*Universidad de
Valparaíso*

Dinámica molecular ab-initio de metanol nanoconfinado entre láminas de grafeno

El nanoconfinamiento posibilita la aparición de nuevos fenómenos. Natural y artificialmente, existen contenedores moleculares que modifican las propiedades de diversos sistemas químicos [1]. Los efectos producidos son determinantes en los procesos biológicos que ocurren a través de la compartimentación. Igualmente, entender lo que ocurre bajo nanoconfinamiento, abre la posibilidad de diseñar nanofiltradores para separar componentes de mezclas. Dado que muchos fenómenos ocurren en sistemas acuosos, ha sido de amplio interés entender el comportamiento del agua nanoconfinada dentro de contenedores rígidos [2]. Aunque se han realizado estudios experimentales, la escala y geometría de estos sistemas nanoconfinados, son difíciles de explorar. Es por ello que, ha sido común recurrir a la dinámica molecular clásica (MD) para extraer información de dichos sistemas. De esta forma, se ha podido verificar la alteración de las propiedades estructurales y dinámicas. Además del agua, se ha estudiado el comportamiento de alcoholes pequeños como metanol, etanol y sus mezclas [3]. Sin embargo, no existe una amplia literatura en este tipo de sistemas nanoconfinados, si se compara con agua.

Aún más escasos, son los reportes basados en dinámica molecular ab initio (AIMD) [4]. Esta aproximación, consiste en obtener trayectorias de partículas, a partir de fuerzas derivadas desde un método de estructura electrónica —generalmente DFT. Aunque en principio, es un método de dinámica más exacto que MD, el cuál no considera a los electrones, su costo computacional aumenta significativamente. Por lo tanto, se reduce la escala espacio-temporal accesible. El cálculo de la estructura electrónica con DFT, resolviendo un Hamiltoniano electrónico de Kohn-Sham, permite obtener una superficie de energía potencial en la cual se propagan los núcleos. Esto lo diferencia de MD, en que los potenciales consisten en campos de fuerzas parametrizados respecto a datos relacionados a cierto tipo de sistemas. Además, en AIMD es posible introducir las interacciones de dispersión, al puro nivel de DFT, mediante funcionales no locales de van der Waals (nl-vdW) [5].

Como el metanol es uno de los modelos más básicos de comportamiento anfílico, capaz de interactuar por puentes de hidrógeno (grupo hidroxilo) y fuerzas de van der Waals (grupo metilo), es importante dar cuenta de este tipo de interacciones, a través del uso de funcionales adecuados. Bajo nuestro conocimiento, la aplicación del método AIMD, incluyendo un funcional de tipo nl-vdW, no ha sido aplicado al estudio de disolventes nanoconfinados, como es el caso de metanol en grafeno. Con estas aproximaciones, se espera obtener a nivel teórico, una caracterización de las propiedades estructurales y dinámicas de metanol bajo nanoconfinamiento hidrofóbico, y contrastar dichas propiedades, respecto a la condición bulk.

Esto se enmarca en un trabajo de tesis doctoral, relacionado a segregación de mezclas nanoconfinadas de agua-metanol.

Acknowledgments

Agradecimientos a la Agencia Nacional de Investigación y Desarrollo (ANID), Beca de Doctorado Nacional 2022-21221554 y al Nucleus in NanoBiophysics (NNBP) financiado por ANID-Iniciativa Científica Milenio, Proyecto NCN2021_021.

References

- [1] Liu, W.; Stoddart, J. F. (2021), doi.org/10.1016/j.chempr.2021.02.016
- [2] Bampoulis, et al. (2018), doi.org/10.1016/j.surfrep.2018.09.001
- [3] Guevara-Carrion, et al. (2011), doi.org/10.1063/1.3515262
- [4] Marx, D.; Hutter, J. (2012) ISBN: 978-0-521-89863-8
- [5] Chakraborty, D., et al. (2020), doi.org/10.1021/acs.jctc.0c00471

Fabián Orellana
*Universidad de
Valparaíso*

Mateo Barría
*Universidad de
Valparaíso*

José Antonio Gárate
*Fundación Ciencia y Vida
/ Universidad San
Sebastián*

Implementation a method of refining collective variables via dimensionality reduction techniques for use in molecular dynamics simulations

A no more important aspect in the development of nanotechnologies and modeling of structures and nanostructures, is the time dedicated to developing it and the energy used in the machines that develop it. That is why having techniques that help us speed up the process would allow us to have a reliable result faster and reduce the carbon footprint generated by the machines that do the computational modeling.

The job focusses on the study of the Free Energy Surface (FES) generated by trajectories of a defined sampling of particles by means of Molecular Dynamics simulations and on the analysis of the convergence of the simulation to know when the sampling has been sufficient.

To study these FES, the Well-Tempered Metadynamics methodology is used, which introduces a damped bias potential to the surface to find the necessary value that generates these trajectories, wich in practice means an acceleration of the sampling necessary for the construction of the FES.

Due to working with big amounts of data, it is essential to carry out a dimensional eduction of the Collective Variables (CV) (they are a set of atomic coordinate functions that describe the degree of freedom that sampling needs to be accelerated) that define the system. For this the method of time Independent Component Analysis is used, where the best possible combination of a suitable set of Collective Variables is sought, thus seeking a more efficient algorithm that improves simulation and processing times.

This method focussed on the analysis of energy surfaces from molecular dynamics simulations, can be applied to the study of protein folder, transfer of ionic species through protein channels and carbon nanotubes, conformational changes in solution, first order phase transitions and chemical reactions [1], and any structure or nanostructure that can be described through functions or system descriptors that depend on position. Specifically, the method will be used to study conformational changes of a Di-Alanine and the folding of a Deca-Alanine.

Acknowledgments

Grateful to Nucleo Milenio en Nanobiofísica, to the Universidad de Valparaíso, to the Centro Interdisciplinario de Neurociencia de Valparaiso, and to ANID for receiving me and providing me with what is necessary to carry out the investigation.

References

- [1] A. Laio et al. (2002), doi.org/10.1073/pnas.202427399

A simple electrostatic model to predict the adsorption orientation of proteins on surfaces under external electric fields

Sergio A. Urzúa

*Department of
Mechanical Engineering,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Chile*

Carlos D. García

*Department of Chemistry,
Clemson University,
Clemson, South Carolina,
United States*

Christopher D. Cooper

*Department of
Mechanical Engineering,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile / Centro
Científico Tecnológico de
Valparaíso, Valparaíso,
Chile*

Protein adsorption on solid surfaces plays a crucial role in various nanotechnological applications, such as biosensors and biocatalysts. These devices are widely used to detect target molecules through a bioreceptor immobilized on a surface. In this case, the orientation of adsorbed proteins becomes a relevant factor for optimizing detection capability as it determines the availability of binding sites to the targets. Additionally, under typical experimental conditions, protein adsorption on surfaces leads to a randomly oriented protein layer. The use of electric fields presents a promising alternative for controlling the adsorption orientation. Thus, this work is motivated by experimental observations showing substantial differences in catalytic activity on a surface covered with trypsin depending on the applied potential during adsorption. To understand the reasons behind these variations in catalytic activity, we performed numerical calculations of electrostatics potential using the linearized Poisson-Boltzmann equation. In the numerical model proposed in this work, we considered the effects of external electric fields within the protein-surface interaction. These considerations were implemented as an extension to the biomolecular electrostatic solver PyGBe, which allow us to compute the electrostatic component of solvation free energy. With our model, we were able to estimate the protein's average affinity to the surface and the most likely adsorption orientations depending on the applied external potential. The numerical results indicated that the active sites of trypsin are, on average, more exposed to the solvent when a negative potential is applied, which is in agreement with experimental observations of catalytic activity. This motivates us to continue conducting computational studies using implicit solvent models for applications of adsorption mediated by external electric fields as means of controlling the homogeneity of biomolecules. Finally, it is worth mentioning that in certain cases, a protein may undergo conformational changes after the adsorption process. In these cases, considering the effect of structural rearrangements becomes imperative. Since the intrinsic approximations of the Poisson-Boltzmann model do not account for such effects, in this work, we propose a hybrid coupling with Molecular Dynamics to overcome the limitations of considering rigid structures.

Electrostatic interactions of RNA and protein-like substrates with the non linear Poisson-Boltzmann equation

Willy Menacho

Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, Chile

Horacio V. Guzman

Department of Theoretical Physics, Jozef Stefan Institute, Ljubljana, Slovenia / Departamento de Física Teórica de la Materia Condensada, Universidad Autónoma de Madrid, Madrid, Spain

Christopher D. Cooper

Departamento de Ingeniería Mecánica, Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, Chile

The interaction between RNA and proteins plays a crucial role in many biological processes, such as gene expression and viral nucleocapsid disassembly. Having accurate models is key to understand the underlying physics, and potentially control and use this interplay to our advantage in biotechnological applications. Here, we focus on the electrostatic component of this interaction, and study it with the nonlinear Poisson-Boltzmann equation (PBE). Even though this continuum model lacks atomic detail in the solvent, it allows us to calculate mean-field potentials and free energies with remarkable accuracy with modest computational resources.

In this presentation, we propose a thermodynamic analysis where we compute the interaction free energy, force, and potential of RNA near a protein-like substrate. This way, we can determine the most likely orientation of an RNA strand as it binds to the protein. With this approach, we will study the role of variables like pH, salinity, and structure in the configuration of the RNA-protein pair. Our main application of interest is the study of the viral nucleocapsid, where a proteic shell (the capsid) encloses the virus' genetic material, and the structure of the internal RNA is still open for debate. Our method can be coupled with other models for RNA structure determination that rely only on base-pair information. These models usually do not consider the influence of the proteic membrane, providing a more realistic physics-based representation of the problem.

Size matters: free-energy calculations of amino acid adsorption over pristine graphene

Mateo Barria-Urenda

*Doctorado en Ciencias
Mención Biofísica y
Biología Computacional*

Alvaro Ruiz-Fernandez

*Centro Científico y
Tecnológico de
Excelencia Ciencia & Vida*

Caslos Gonzalez

*Millennium Nucleus in
NanoBioPhysics (NNBP)*

Chris Oostenbrink

*nstitute for Molecular
Modeling and Simulation,
University of Natural
Resources and Life
Sciences, Vienna, Austria*

Jose Antonio Garate

*Facultad de Ingeniería,
Arquitectura y Diseño,
Universidad San
Sebastián, Bellavista,
Santiago, Chile.*

There is a still growing interest in graphene interactions with proteins; both for its possible biological applications and due to concerns over detrimental effects at the cellular level. As with any process involving proteins, an understanding from amino acid composition is desirable. In this work we systematically studied the adsorption process of amino acids onto pristine graphene via rigorous free energy calculations. We characterized the free energy, potential energy, and entropy of adsorption of all proteinogenic amino acids. The energetic components were further separated into pair interaction contributions. A linear correlation was found between the free-energy and the Solvent Accessible Surface Area change during adsorption ($\Delta SASA_{ads}$). Free energies over pristine graphene were compared with adsorption onto graphene oxide (GO), finding an almost complete loss of the favorability of amino acid adsorption onto graphene. Finally, the correlation with the $\Delta SASA_{ads}$ was used to successfully predict the free-energy of adsorption of several penta-L-peptides in different structural states and sequences. Due to the relative ease of calculating the $\Delta SASA_{ads}$ compared to free-energy calculations, it could prove a cost effective predictor of the free-energy of adsorption for proteins onto non-polar surfaces.

Acknowledgments

This work was partially supported by a doctoral scholarship from CONICYT-PFCHA/DOCTORADO BECAS NACIONAL/2020-21201020 (M.B.U) and Fondecyt grant N° 1221260 (J.A.G). The Millennium Nucleus in NanoBioPhysics (NNBP) is funded by the Millennium Science Initiative Program (ICM-ANID), project NCN2021_021. Centro Ciencia y Vida, Financiamiento Basal para Centros Científicos y Tecnológicos de Excelencia de ANID FB210008 (J.A.G). Access to the supercomputing infrastructure of the National Laboratory for High-Performance Computing was supported through grant no. ECM-02 (Powered@NLHPC).

Fabián Orellana Verdugo

*Facultad de Ciencias,
Universidad de
Valparaíso, Valparaíso,
Chile*

Mateo Barría-Urenda

*Facultad de Ciencias,
Universidad de
Valparaíso, Valparaíso,
Chile*

José Antonio Gárate

*Núcleo Milenio en
NanoBioPhysics; Centro
Científico y Tecnológico
de Excelencia Ciencia y
Vida / Facultad de
Ingeniería y Tecnología,
Universidad San
Sebastián, Santiago,
Chile*

Implementación de un método de refinado de variables colectivas vía técnicas de reducción dimensional para uso en simulaciones en Dinámica Molecular

Un aspecto no menos importante en el desarrollo de nanotecnologías y modelamiento de estructuras y nanoestructuras, es el tiempo dedicado a desarrollarla y la energía utilizada en las máquinas que la desarrollan, es por ello que contar con técnicas que nos ayuden a acelerar el proceso nos permitiría tener un resultado confiable más rápido y disminuir la huella de carbono generada por las máquinas que hacen el modelamiento.

El trabajo se centra en el estudio de las Superficies de Energía Libre (FES) generadas por trayectorias de un muestreo definido de partículas a través de simulaciones en Dinámica Molecular y en el análisis de la convergencia de la FES para saber cuándo ha sido suficiente el muestreo.

Para estudiar estas FES se hace uso de la metodología de “Well Tempered Metadynamics”, que introduce un potencial de sesgo amortiguado a las superficies para encontrar el valor necesario que genera estas trayectorias, lo que en la práctica significa una aceleración del muestreo necesario para la construcción de la FES.

Debido a que se trabaja con grandes cantidades de datos, es esencial hacer una reducción dimensional de las Variables Colectivas (CV) (estas son un conjunto de funciones de coordenadas atómicas que describen los grados de libertad que el muestreo necesita para ser acelerado) que definen el sistema, a través de la metodología tICA, donde se busca la mejor combinación posible de un conjunto apropiado de Variables Colectivas, buscando así un algoritmo más eficiente que mejore los tiempos de simulación y procesamiento.

Este método enfocado en el análisis de superficies de energía de simulaciones en dinámica molecular puede ser aplicado al estudio de plegamientos de proteínas, trasposos de especies iónicas a través de canales de proteínas y nanotubos de carbonos, cambios conformacionales en solución, transiciones de fase de primer orden y reacciones químicas [1], y cualquier estructura o nanoestructura que pueda ser descrita a través de funciones o descriptores que dependan de la posición. En específico, el método se utilizará para estudiar cambios conformacionales de una di-Alanina y el plegamiento de una deca-Alanina.

Agradecimientos

Agradecimientos al grupo Milenio de NANOBIOFÍSICA, a la Universidad de Valparaíso y a la ANID Grant N° 21231231, por acogerme y proveerme de lo necesario para llevar a cabo el estudio.

Referencias

[1] Laio A. and Parrinello M.(2002), doi.org/10.1073/pnas.202427399

Jhon W. González
Department of Physics,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile

Adsorption of silane-based molecular inhibitors on tungsten surfaces: insights from first-principles calculations

Small molecule inhibitors (SMIs) are promising candidates for controlling and manipulating deposition of thin films at the nanoscale. SMIs have been explored in the past few years as promising candidates for bottom-up processing in high volume manufacturing for a variety of materials and structures.

Understanding the adsorption of silane molecules on tungsten surfaces is relevant in various fields, including catalysis, material science, and thin film deposition techniques such as atomic layer deposition processes (ALD). In our work, we explore the selective adsorption of Bis(dimethylamino) methylsilane (MS-DMA) and triisopropyl (dimethylamino)silane (TIPS-DMA) as potential SMIs on three different surfaces: tungsten-oxide (WO_3), metallic tungsten (W) [1], and silicon-oxide (SiO_2) surfaces [2]. We use first-principles calculations based on density functional theory (DFT) to probe the adsorption of these SMIs. We scan for different active surface sites and different reaction paths. Through a combined approach of periodic calculations using the software VASP (Vienna ab-initio simulation package) and gas-phase using ORCA (Semiempirical SCF-MO package), we report the adsorption energies (internal and Gibbs), final geometries, energy barriers (transition state), and vibrational spectra. By considering the Gibbs free energy variation, our analysis includes the pressure and temperature effects on the adsorption properties and provides further understanding into energetics at ALD relevant conditions.

Our findings reveal significant changes in adsorption energetics across all three surfaces, highlighting the influence and importance of surface reactivity. We find that the chemisorption of both silanes favors the generation of different byproducts depending on the surface. While the chemisorption of MS-DMA favors the generation of methane on the WO_3 surface and dimethylamine on the SiO_2 surface, the chemisorption of TIPS-DMA favors the generation of propane on WO_3 and dimethylamine on SiO_2 . Moreover, the adsorption energies vary across all three surfaces showing potential for selective adsorption, $E_{\text{ads}}(\text{WO}_3) > E_{\text{ads}}(\text{SiO}_2) > E_{\text{ads}}(\text{W})$. The activation barriers follow different trends. Considering a gas pressure of 1 Torr and a temperature of 300 K, the activation barrier of MS-DMA on SiO_2 and WO_3 are similar and lower than 10 kcal/mol. For the TIPS-DMA molecule, the activation barrier on WO_3 is higher compared to the SiO_2 surface. The chemisorption of both silanes on metallic tungsten is considered to be non-activated due to the reactivity of the surface.

Overall, our theoretical results provide fundamental insights into selective adsorption of silane molecules on silicon dioxide, tungsten oxide, and metallic tungsten, highlighting their potential to be used as SMIs for area-selective deposition processes [3].

Macarena Menéndez
*Universidad Técnica
Federico Santa María*
Aleksey E. Kuznetsov
*Universidad Técnica
Federico Santa María*

Construcción de bloques moleculares de hexa-peri-hexabenzocoroneno acoplado a porfirinas meso- y beta- sustituidas con -F, -CH₃ y -NO₂

Utilizando la teoría del funcional de densidad, hemos estudiado los efectos sobre las consecuencias estructurales y electrónicas (incluidos los espacios de energía HOMO-LUMO y los mapas de potencial electrostáticos) de un hexa-peri-hexabenzocoroneno acoplado a una Zn-porfirina (HBC-ZnP) incluyendo los siguientes factores: (a) sustituyentes meso- y β - que actúan como donadores inductivos (CH₃), aceptores de electrones inductivos (F), y aceptores habilitados para resonancia (NO₂). Los principales resultados del estudio son: (1) El efecto de los sustituyentes genera disminuciones más evidentes en las brechas de energía singlete-triplete ΔE (1A 3A) para las especies meso_x0002_sustituidas, sin embargo, los valores de las brechas siguen representando moléculas estables. (2) Para las especies HBC-ZnP meso- y β - sustituidas, en la serie 'donantes inductivos (CH₃)' → 'aceptores de electrones inductivos (F)' → 'aceptores habilitados para resonancia (NO₂)' presenta una leve disminución de las brechas de energía de HOMO/LUMO, pero en general se mantuvieron bastantes similares a la especie HBC-ZnP libre para todas las especies de porfirinas sustituidas. (3) Se producen cambios estructurales pronunciados en las distancias de enlace de Zn-N1 y Zn-N2, es decir, se ha observado la distorsión ondulada de la porfirina. (4) En general, los efectos de los β - sustituyentes en la distorsión ondulada del núcleo de porfirina son menos pronunciados. (5) Los compuestos modificados con los sustituyentes en las posiciones meso- y β - pueden poseer interesantes propiedades novedosas, incluyendo aromaticidad y reactividad, dando lugar a sus diversas aplicaciones potenciales, además, de alta estabilidad para la fase gaseosa lo que implica la viabilidad de su síntesis. Entonces, la introducción los sustituyentes donantes, como aceptores electrónicos en las posiciones meso- y β - es una buena estrategia promisoriosa para sintetizar nuevos compuestos con las propiedades deseadas y nuevas aplicaciones

Tópico T8: Otros tópicos de nanotecnología y nanociencia

Study of the effect of side alkyl chains on the molecular stacking and charge transport of OPV devices based on 2D-BDT type electron donor molecules

Cristian Antoine Ortiz
*Departamento de
Química Inorgánica,
Escuela de Química,
Facultad de Química y de
Farmacia, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile*

Felipe Angel Figueroa
*Departamento de
Química Inorgánica,
Escuela de Química,
Facultad de Química y de
Farmacia, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile /
Centro de
Nanotecnología y
Materiales Avanzados,
CIEN-UC, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile /
Centro de Energía,
CE-UC, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile*

Several compounds have been used as donor/acceptor semiconductors in organic photovoltaic (OPV) devices. Among the most common chemical structures reported, it appears the molecule benzo[1,2-b-4,5-b']dithiophene (BDT), a system with good charge transporting properties due to their high planarity and with a high synthetic facility to modulate their band gap (E_g) [1]. Alkyl chains of various lengths are typically used in polymer based OPV devices to improve the low solubility they present. However, the chains can impact transport charge transfer or molecular stacking.

In this work, we studied the effect of alkyl chains in the stacking and transporting of small-molecule donors. We propose five molecules based on the BDT and 2D-BDT units with linear octyl chains on the y-axis of the core rings, with different lateral substituents: hydrogen (TH), ethylhexyl (TEH), and octyl (TOc). All molecules were synthesized by Stille coupling reaction [2]. The devices were manufactured via thermal vacuum evaporation, a high reproducibility technique capable of eliminating compounds' possible solubility interference [3]. The characterization of the molecules included nuclear magnetic resonance spectroscopy (NMR), thermogravimetric analysis (TGA), differential scanning calorimetry (DSC), absorption spectroscopy, and density functional theory (DFT) calculations. J-V characteristics and external quantum efficiency (EQE) measurements were conducted on the devices.

The TGA and DSC provided information on the decomposition temperature (T_d) and melting temperature (T_m), respectively. The BDT set has an average T_d of 362 °C while the set 2D-BDT have T_d values over 450 °C. Instead, the T_m values of the molecules were over 100 °C, except for the two TOc substituted molecules that presented an average T_m of 64 °C. These results correlate with the low intermolecular forces between molecules, suggesting a low stacking degree.

The E_g for the BDT and 2D-BDT set presented similar values according to the results obtained by absorption of the solution, film, and DFT. Therefore, any difference in short-circuit current density (J_{sc}) and power conversion efficiency (PCE) can be correlated to molecular stacking and transport.

The open circuit voltage (V_{oc}) values show an average of 0,80 V for the 2D-BDT set and an average of 0,73 V for the BDT set, confirming no differences in the E_g . The values of J_{sc} in the set 2D-BDT were 2,14 mA/cm² for TH, 1,51 mA/cm² for Toc, and 3,52 mA/cm² for TEH. Subsequently, the PCE values obtained were 0,43%, 0,60%, and 1.15%, respectively.

Consequently, there is a correlation between the Jsc and the enhancement of the molecular stacking by alkyl chains based on ethylhexyl. However, this effect is hampered by the disorder caused by the octyl chains, correlating with its lower melting temperature due to a low intermolecular interaction between molecules.

Acknowledgments

Proyecto PAI 79170049, FONDECYT 11181205, and FONDEQUIP EQM120021.

References

- [1] Li M. et al. (2015), doi.org/10.1039/c4ta06452f
- [2] Farina V. et al. (1997), doi.org/1002/0471264180.OR050.01
- [3] Sree Harsha K.S. (2006), doi.org/10.1016/B978-008044699-8/50002-4

Estudio de la estabilidad coloidal y viabilidad celular de nanopartículas de titanato de bario dopadas con iones samario y gadolinio, como biomarcadores

S. Fuentes

Departamento de Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Ciencias, Universidad Católica del Norte, Antofagasta, Chile

L. León

Departamento de Química de los Materiales, Facultad de Química y Biología, Universidad de Santiago de Chile, Santiago, Chile

J. Valenzuela

Departamento de Minas y Metalurgia, Universidad Católica del Norte, Antofagasta, Chile

F. Carmona

Departamento de Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Ciencias, Universidad Católica del Norte, Antofagasta, Chile

M. Rojas

Departamento de Ciencias Farmacéuticas, Facultad de Ciencias, Universidad Católica del Norte, Antofagasta, Chile

La investigación de las nanopartículas (NPs) y sus usos biomédicos ha impulsado el desarrollo de diversas herramientas en nanomedicina como lo es el uso diagnóstico/tratamiento del cáncer. Una NP de interés diagnóstico es el titanato de bario (BaTiO_3) debido a sus importantes propiedades ferroeléctricas a temperatura ambiente y a la generación de segundo armónico utilizado en microscopía óptica de alta resolución. Presenta una distorsión tetragonal característica, cuya estructura es más simple que la de cualquier otro material ferroeléctrico conocido.

Con la finalidad de plantear un nanomaterial óptimo para imagenología médica y su posible utilidad futura como herramienta diagnóstica, se realizó el recubrimiento de NPs de BaTiO_3 dopadas con Samario y Gadolinio (BT:Sm y BT:Gd) con polietilenglicol (PEG), de distintos pesos moleculares y su posterior estudio de estabilidad coloidal y compatibilidad con los sistemas biológicos.

Se reporta el estudio de estabilidad coloidal y caracterización de NPs de BT:Sm y BT:Gd, recubiertas con PEG de PM 4000 y 6000. Se evaluó el tamaño hidrodinámico y potencial zeta (ζ) en un rango de pH (3.0-10.0), además de buffer fosfato salino (PBS) como pH fisiológico. Los resultados obtenidos mostraron una tendencia general a disminuir de tamaño desde pH 3.0 hasta 7.0-8.0 y luego un aumento desde 8.0.

Acknowledgments

Proyecto Fondecyt regular 1190721 y AFB220001, Centro de Nanociencia y Nanotecnología, CEDENNA.

References

- [1] Komsthöft et al. (2022), doi.org/10.1016/j.coche.2022.100849
- [2] Suk et al. (2016), doi.org/10.1016/j.addr.2015.09.012

Enhanced efficiency at maximum power in a Fock-Darwin model quantum dot engine

Francisco J. Peña
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile /
Millennium Nucleus in
NanoBioPhysics (NNBP)*

Nathan Myers
*Department of Physics,
Virginia Tech, Blacksburg,
Virginia, USA*

Daniel Órdenes
*Departamento de Física,
Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile /
Millennium Nucleus in
NanoBioPhysics (NNBP)*

Francisco
Albarrán-Arriagada
*Departamento de Física,
CEDENNA, Universidad
de Santiago de Chile
(USACH), Estación
Central, Santiago, Chile*

Patricio Vargas
*Departamento de Física,
CEDENNA, Universidad
Técnica Federico Santa
María, Valparaíso, Chile*

The study of quantum thermal machines, devices such as quantum engines and refrigerators that operate on working mediums composed of quantum systems, has proved to be a fruitful research area in the last decade [1,2]. These efforts have focused on studying the different thermodynamic cycles, such as the Otto and the Stirling cycles in different regimes [3], and using varying quantum working substances such as spins, quantum dots, and quantum harmonic oscillators. Recent work has also examined the role that quantum properties, such as quantum coherence and quantum correlations, play in the performance of quantum thermal machines.

A primary feature of interest of quantum thermal machines is their potential to surpass the performance of their classical counterparts [4], which opens the door to a new generation of highly efficient quantum engines and refrigerators for application in emerging quantum technologies.

This work studies a finite-time endoreversible magnetic Otto cycle using a Fock-Darwin model quantum dot as a working substance. Modifying the dot geometry profoundly impacts all examined cycle characteristics, including increasing the efficiency at maximum power beyond the Curzon and Ahlborn efficiency. These results indicate that quantum dots can serve as a viable platform of technological interest for implementing endoreversible quantum thermodynamic cycles [5].

Acknowledgments

F.J.P. and D.O. acknowledges financial support from ANID Fondecyt, Iniciación en Investigación 2020 grant no. 11200032, ANID Fondecyt grant no. 1210312, “Millennium Nucleus in NanoBioPhysics” project NNBP NCN2021_021.

References

- [1] Ronnie Kosloff et al. (2014) doi.org/10.1146/annurev-physchem-040513-103724
- [2] Hai-Tao Quan et al. (2007) doi.org/10.1103/PhysRevE.76.031105
- [3] S Hamedani Raja et al. (2021), doi.org/10.1088/1367-2630/abe9d7
- [4] Jaramillo J. et al. (2016), doi.org/10.1088/1367-2630/18/7/075019
- [5] Francisco J. Peña (2023), doi.org/10.3390/e25030518

Lubricación sólida de recubrimientos nanocompuestos tipo sándwich de $Ti_3C_2T_x-MoS_2$

Dario F. Zambrano-Mera¹

Martin I. Broens

Universidad Nacional de
Córdoba, Facultad de
Ciencias Químicas,
Departamento de
Fisicoquímica, Haya de la
Torre esq. Medina
Allende, X5000HUA,
Córdoba, Argentina

Rodrigo Espinoza
González¹

Bo Wang

Chair of Functional
Materials, Department of
Materials Science &
Engineering, Saarland
University, Saarbrücken,
66123, Germany

Andreas Rosenkranz¹

¹Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Ciencias Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile,
Chile

Lubricantes sólidos se están volviendo cada vez más relevantes en aplicaciones avanzadas debido a su sencillez de aplicación [1,2]. A diferencia de los lubricantes líquidos como los aceites y grasas, los recubrimientos sólidos presentan una mayor estabilidad a altas temperaturas y en condiciones de vacío. En este contexto, el grafeno, el óxido de grafeno y el MoS_2 son nanomateriales de vanguardia que se utilizan actualmente en la lubricación sólida [1,2]. Sin embargo, en los últimos años se ha centrado una considerable cantidad de investigación en el estudio del rendimiento de los MXenes en la lubricación sólida [2]. Estos materiales han demostrado un excelente desempeño en términos de resistencia al desgaste, gracias a la formación de películas tribológicas beneficiosas. No obstante, el coeficiente de fricción resultante de estos recubrimientos sigue siendo alto, lo que indica la necesidad de una optimización adicional [1-3]. Con el fin de abordar esta limitación, se diseñaron recubrimientos compuestos tipo sándwich que combinan la baja fricción del MoS_2 (S) con la alta resistencia al desgaste del $Ti_3C_2T_x$ (MX). Se comparó el rendimiento tribológico de estos compuestos con diferentes secuencias de apilado (MX/S) versus S/MX) y se evaluaron individualmente los componentes por separado utilizando ensayos de tribometría de bola sobre disco en condiciones de deslizamiento en seco y variando la carga normal aplicada (presión de contacto). Posteriormente, se procedió a la caracterización de las superficies desgastadas mediante diversas técnicas de análisis avanzado. Se utilizó HR-XPS localizado y EDS para identificar la composición química y la distribución espacial (mapeo químico) de la tribo-capa. Mediante FIB-TEM se estudió la microestructura de la tribo-capa a nivel nanométrico, obteniendo imágenes de alta resolución que revelaron posibles cambios en la morfología y la presencia de defectos. La espectroscopía Raman se empleó para investigar la presencia de estructuras cristalinas y amorfas en la tribo-capa. Por último, la interferometría de luz blanca se utilizó para medir la rugosidad superficial y evaluar cambios en la topografía de la superficie desgastada. Los resultados obtenidos indicaron que los recubrimientos compuestos tipo sándwich presentaron un rendimiento tribológico superior, logrando una reducción de aproximadamente el 50 % en la fricción y el desgaste. Entre las diferentes secuencias de apilado, se encontró que el recubrimiento MX/S mostró las mejores características de fricción y desgaste. Estas tendencias experimentales sugieren que la formación de una capa tribológica beneficiosa mejora la estabilidad química y reduce la fricción en comparación con los materiales puros, lo que los convierte en candidatos ideales para mejorar el rendimiento tribológico de componentes mecánicos sometidos a elevadas presiones de contacto.

Agradecimientos

Dario F. Zambrano-Mera agradece el apoyo financiero otorgado por ANID a través del FONDECYT postdoctoral (3220165) y el proyecto FONDECYT 1231474. A. Rosenkranz agradece el apoyo financiero otorgado por ANID-CONICYT en el marco de los proyectos Fondecyt 11180121 y Fondequip EQM190057. B. Wang agradece el apoyo financiero otorgado por la Fundación Alexander von Humboldt (beca Feodor-Lynen).

Referencias

- [1] Wyatt B.C. et al. (2021), doi.org/10.1002/adma.202007973
- [2] Rosenkranz A. et al. (2023), doi.org/10.1002/adma.202207757
- [3] Macknoija A. et al. (2023), doi.org/10.1021/acsnano.2c09640

Controlling temperature-responsive bilayer actuators of Cs-MoS₂/PVDF using infrared light and laser

Jorge Maureira
*Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Ciencias Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile,
Chile*

Humberto Palza
*Departamento de
Ingeniería Química,
Biotecnología y
Materiales, Facultad de
Ciencias Físicas y
Matemáticas,
Universidad de Chile,
Chile*

Soft actuators are materials that can change their shape or size in response to chemical, electrical, or thermal stimuli. Among these, one of the most studied is bilayer actuators, consisting of an active and inert layer [1]. The active layer responds to external stimuli while the inert layer does not, and this structural asymmetry causes deformation in the structure [2]. Controlling this deformation would allow their use in various applications. Therefore, the aim is to create temperature-responsive bilayers and control their performance through exposure to infrared light and laser. For the fabrication of the bilayers, a liquid exfoliation process of molybdenum disulfide (MoS₂) in the presence of chitosan (Cs) was carried out in an acid medium. After the centrifugation, the supernatant was vacuum-filtered through a polyvinylidene fluoride (PVDF) membrane, resulting in Cs-MoS₂/PVDF bilayers. These bilayers were characterized using XRD and SEM to validate the morphology of the nanosheets. Simultaneously, using computational software, the performance was studied for different bilayer configurations by capturing photographs and measuring the respective curvature angles over time.

Regarding the first-mentioned studies, images were obtained that validate the laminar nature of the bilayers and the successful exfoliation of MoS₂ particles in the Cs matrix. In the second analysis, the circular configuration showed an approximate 50% decrease in the curvature angle when exposed to infrared light, while the decrease was approximately 10% when exposed to the laser. Combining both effects, the angle decreased by 60%, demonstrating reproducibility over 10 actuation cycles. In the case of the "linear" configuration, exposure to infrared light reduced the angle by 70% over 10-second cycles, while the laser caused an approximate 10% decrease. However, in contrast to the circular configuration, the combination of both effects allowed the bilayer to rotate 90° or -90° with respect to the vertical, depending on the sector where the laser acted. This difference in behavior is explained by the relationship between the length and width of both configurations, causing greater thermal expansion in the area affected by the laser, resulting in the displacement of the bilayer in the respective direction [3]. The "spiral" configuration showed a rotation of the bilayer of about 60° with respect to one of its ends when exposed to infrared light. The exposure to the laser increased this rotation by approximately 15° and made it irreversible, achieving displacement.

From the described results, the importance of the length-to-width ratio of the actuators is evident since, depending on the configuration type, the dual actuation allows additional movement beyond the original one. In general, the application of the laser increases the curvature angle decrease by 10% for circular and linear configurations and allows control over

the type of bilayer actuation.

Acknowledgments

The authors acknowledge the support of ANID National Doctoral Scholarship No. 21231122 and Fondecyt Regular No. 1200093.

References

- [1] J. Zuo, et al. (2023), doi.org/10.1016/j.sna.2023.114208
- [2] Y. Cheng, et al. (2018), doi.org/10.1016/j.snb.2017.09.137
- [3] R. Yang, et al. (2020), doi.org/10.1002/aisy.202000146

Liposomal encapsulation of anti-freeze proteins with potential agricultural use

Cristian Aranzaez-Ríos
*Department of Chemical
Engineering, Universidad
de La Frontera, Temuco,
Chile*

Stefania E Short
*Department of Chemical
Engineering, Universidad
de La Frontera, Temuco,
Chile*

Nanotechnology has received great attention due to diverse applications in agriculture, the food industry, biotechnology, and medicine. In the agricultural sector, nanotechnology has generated significant interest in the formulation of nanopesticides and nanofertilizers [1]. However, there are applications aimed at protecting agricultural crops from adverse environmental conditions that have been little studied and could minimize crop losses due to low temperatures. In this context, antifreeze proteins (AFPs) have shown a high capacity for inhibiting ice recrystallization (IRI) [2]. An innovative and potential alternative application of these proteins is by using liposomes as nanocarriers, which could retain the active compound, protect the molecule, improve its solubility, and allow the release of the encapsulated molecule. Liposomes are vesicles synthesized by hydrating dried phospholipids. These nanoparticles can be prepared in different structures, compositions, sizes, and flexibility using various types of lipid molecules [3]. Due to their amphiphilic nature, biocompatibility, biodegradability, and easy surface modification, liposomes have been extensively used as carriers for hydrophilic and lipophilic molecules [4].

In this regard, the use of these nanostructures in conjunction with the AFPs would have significant applications in the agricultural sector as stabilizers of cellular structure or the macromolecules during freezing. This study aims to evaluate the nanoencapsulation of antifreeze proteins in liposomes for future agricultural applications. For this purpose, liposomes will be synthesized, and antifreeze proteins will be encapsulated using a kit (L4395 Sigma-Aldrich). Subsequently, the particle size distribution and polydispersity index will be determined, morphology will be examined using optical microscopy, and finally, will be assessed the encapsulation efficiency. The goal is to obtain antifreeze proteins encapsulated in liposomes with a homogeneous size distribution and a higher mass of encapsulated proteins compared to the mass of proteins without encapsulation.

Acknowledgments

Postdoctoral Fondecyt Project 3210633.

References

- [1] Prasad R et al. (2017), doi.org/10.3389/fmicb.2017.01014
- [2] Kontogiorgos V. et al. (2007), doi.org/10.1111/j.1745-4514.2007.00112.x
- [3] Gupta S. et al. (2023), doi.org/10.35629/7781-080218471859
- [4] Li C. et al. (2023), doi.org/10.1080/10717544.2023.2174206

Synergistic impact of nanoarchitected GQDs-AgNCs(APTS) modified glassy carbon electrode in the electrochemical detection of guanine and adenine

Vinoth Victor

Laboratorio de
Fotoquímica y Fotofísica,
Departamento de
Química, Universidad
Técnica Federico Santa
María, Valparaíso, Chile.

Nalandhiran

Pugazhenthiran

Laboratorio de
Fotoquímica y Fotofísica,
Departamento de
Química, Universidad
Técnica Federico Santa
María, Valparaíso, Chile.

Ramalinga

Viswanathan

Mangalaraja

Faculty of Engineering
and Sciences,
Universidad Adolfo
Ibanez, Santiago, Chile

In this work, a facile green approach for the synthesis of graphene quantum dots (GQDs) embedded on silicate network silver nanocrystals (GQDs-AgNCs(APTS)) is reported. Moreover, glassy carbon-GC electrodes were modified with the prepared nanocomposite containing graphene quantum dots supported on silver nanocrystals (GQDs-AgNCs(APTS)) and applied for simultaneous detection of guanine (GA) and adenine (AD). The chemically modified electrode was assessed during the determination of purine bases by cyclic voltammetry-CV and differential pulse voltammetry-DPV. The incorporation of GQDs-AgNCs(APTS) nanocomposites over the surface of the GC electrode considerably enhances the anodic peak currents and decreases the adenine and guanine peak potentials. Compared to other electrodes, GQDs-AgNCs(APTS)/GC improved the electrochemical behavior towards the detection of adenine and guanine. At optimal conditions, calibration curves were obtained by DPV being linear in the range of 0.1-6.0 micromolar and 0.1-5.0 micromolar for guanine and adenine, respectively. The detection limits of both guanine and adenine were estimated as 0.1 micromolar. Additionally, interferences analyses were performed on the existence of other interferent compounds. Furthermore, the method developed for the identification of guanine and adenine was proved using fish sperm DNA samples.

Acknowledgments

The authors V. Vinoth and N. Pugazhenthiran gratefully acknowledge the Universidad Técnica Federico Santa María, Av. España 1680, Valparaíso, Chile Post-doctoral program for the financial assistance.

References

- [1] F. Xiao, et al. (2008), doi.org/10.1016/j.electacta.2008.05.053
- [2] F.-T. Wang et al. (2022), doi.org/10.1021/acssuschemeng.1c07082
- [3] Y.-Y. Hou et al. (2021), doi.org/10.1021/acs.analchem.1c03521
- [4] S. Gu et al. (2020), doi.org/10.1016/j.jlumin.2019.116774

Hierarchical surface texturing in stainless steel through Electron Beam Lithography as an alternative to prevent bacterial adhesion

Javiera Castillo Lagos
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Esteban Ramos-Moore
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Gonzalo Pizarro
Puccio
*Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Bacterial attachment to material surfaces can lead to the development of biofilms that cause severe economic and health problems. Several studies have shown that bacterial settlement can be controlled to a certain degree using patterned surfaces featuring repeating topographical elements of sizes ranging from nanometers to micrometers. Yet, understanding of the underlying mechanisms of attachment is still limited [1]. Nanofabrication techniques can conventionally be categorized as bottom-up technique, which includes self-assembled monolayers, lithography, and layer-by-layer assembly [2]. Our preliminary results in copper produced by direct laser interference patterning (DLIP) show a strong correlation between surface and the micro-topography with the bacterial settlement [3], where the lowest settlement is observed in the smallest patterns, however the limit of observed periodicity was of 4,7 μm .

In this presentation we will show the latest results related to surface characterization and biological test performed on *Pseudomonas* sp. on textured stainless steel 316 L coupons by electron beam lithography and hierarchical surface at nanoscale.

Acknowledgments

This work is supported by Fondo Nacional de Desarrollo Científico y Tecnológico 1221476 (and Beca ANID Doctorado Nacional N folio 21190051 Thanks to Marine Energy Research Innovation Center Project MERIC 14 CEI 2 28228 for the funding of this work.

References

- [1] Cheng Y. et al. (2019), doi.org/10.3389/fmicb.2019.00191
- [2] Linklater DP. et al. (2017), doi.org/10.1021/acsami.7b05707
- [3] Caro-Lara L. et al. (2021), doi.org/10.1016/j.colsurfb.2021.111656

Diseño, implementación y puesta en marcha de equipo de fotolitografía sin máscara

Martín Muñoz Espinoza
*Laboratorio de Películas
Delgadas, Facultad de
Física, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile*

Ignacio Alcarráz
*Laboratorio de Películas
Delgadas, Facultad de
Física, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile*

Esteban Ramos-Moore
*Laboratorio de Películas
Delgadas, Facultad de
Física, Pontificia
Universidad Católica de
Chile, Santiago, Chile*

El grabado por fotolitografía es una técnica fundamental en la fabricación de micro y nano estructuras, utiliza luz ultravioleta para transferir un patrón desde una máscara a un sustrato, permitiendo la texturización de superficies planas. Se utiliza ampliamente en la industria de dispositivos microelectrónicos, circuitos integrados, semiconductores y sobre todo en la investigación académica. Esta técnica permite modificar de manera controlada las propiedades de la superficie como topografía, rugosidad y mojabilidad, abriendo posibilidades de estudios en áreas tan diversas como ciencia de materiales, nanotecnología, tribología y microbiología.

Una de las grandes limitaciones de esta técnica es el uso de máscaras que contienen patrones fijos que deben ser fabricadas mediante procesos de grabado de alto costo económico. La fotolitografía óptica sin máscara es una técnica que busca superar esta limitación [1,2]. A diferencia de los métodos tradicionales de fotolitografía, esta permite la creación de estructuras mediante una proyección de luz controlada en el espacio, eliminando la necesidad de fabricar y alinear máscaras, simplificando y abaratando considerablemente el proceso de grabado. También permite mayor flexibilidad en la generación de patrones con geometrías complejas y en el rápido cambio entre diferentes patrones.

En este trabajo se presenta el diseño, la implementación y los resultados preliminares de un sistema de fotolitografía sin máscara fabricado en el Laboratorio de Películas Delgadas UC. El sistema consiste principalmente de un proyector modificado, un microscopio trinocular modificado, piezas auxiliares impresas en 3D y elementos electrónicos para el control de parámetros ópticos. Debido a que el dispositivo es "hecho en casa" posee un costo aproximado de inversión de aproximadamente 1% comparado con sistemas de fotolitografía óptica comerciales.

Agradecimientos

Grupo de trabajo del laboratorio de películas delgadas.

Referencias

- [1] Menon, R. et al. (2005), doi.org/10.1016/S1369-7021(05)00699-1
[2] Musgraves, J. D. et al. (2005), doi.org/10.1119/1.1924491

Formulation and characterization of solid lipid nanoparticles containing fleshed colored potatoes extract that has potential inhibitory activity against *Rhizoctonia solani* pathogen of *Solanum tuberosum* crops

Sheina Rivas Albano

Departamento de Ciencias Químicas y Recursos Naturales, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile

Paola Fincheira

Centro de Excelencia en Investigación Biotecnológica Aplicada al Medio Ambiente (CIBAMA), Facultad de Ingeniería y Ciencias, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile

Antonieta Ruiz

Departamento de Ciencias Químicas y Recursos Naturales, Universidad de La Frontera, Temuco, Chile

Solid lipid nanoparticles (SLNs) offer controlled release of active compounds while minimizing degradation and volatilization, benefiting from their high efficacy, stability, and solubility. In agriculture, fleshed colored potato (FCP) extracts have demonstrated in vitro inhibitory activity (minimum inhibitory concentration (MIC) of 20 mg/L) against *R. solani*, a pathogen that causes damage and losses in potato cultivation. However, the stability and coloration of FCP's bioactive compounds, such as polyphenols, can be affected by environmental factors. Currently, there is a need to develop a sustainable technology for the application of this extract, and solid lipid nanoparticles offer a promising solution as nanocarriers for its efficient delivery. Optimization of the formulation methodology is necessary, and various reported techniques like Ultrasonication, single emulsification, and high shear homogenization have been employed. Particle size, polydispersity index (PDI), zeta potential (ZP), and scanning transmission electron microscopy (STEM) analysis were used for characterization. The most significant results showed particle sizes of 369.3 nm for C-SLN2+FCP and 417.8 nm for C-SLN2, along with favorable PDI values (0.247 and 0.157). STEM analysis confirmed the nanoparticles' proper spherical shape and size distribution. To avoid the use of toxic fungicides/pesticides, there is a growing demand for eco-friendly alternatives like phenolic compounds. However, effective protection, stability, and improved delivery of these active agents are necessary, which can be achieved through lipid nanocarrier systems. SLNs represents a sustainable strategy for encapsulating the extract, thereby enabling its potential application in agricultural systems for the biocontrol of phytopathogenic fungi.

Acknowledgments

Proyecto ANID/FONDECYT 1230587.

References

- [1] Fincheira P et al. (2020), doi.org/10.1016/j.colsurfa.2020.124739
- [2] Ercoli et al. (2021), doi.org/10.1016/j.lwt.2020.110370

Caracterización de nanoestructuras de exoesqueletos en coleópteros del desierto de Atacama

María José González

*Departamento de
Química y Biología,
Facultad de Ciencias
Naturales, Universidad de
Atacama, Chile /
Departamento de
Ingeniería en Metalurgia,
Facultad de Ingeniería,
Universidad de Atacama,
Chile*

Carlos Tirado

*Departamento de
Química y Biología,
Facultad de Ciencias
Naturales, Universidad de
Atacama, Chile*

Alejandra Tello

Zamorano

*Departamento de
Química y Biología,
Facultad de Ciencias
Naturales, Universidad de
Atacama, Chile*

La naturaleza ha desarrollado diversas soluciones a nivel nanométrico que permiten por ejemplo, a los artrópodos, sobrevivir y prosperar en entornos desérticos, donde la disponibilidad de agua está determinada por las escasas y variables precipitaciones o por la neblina costera (camanchaca), característica de los ecosistemas de lomas en el borde costero de la región de Atacama.

La evidencia bibliográfica muestra que la organización estructural del exoesqueleto de ciertas especies de escarabajos, junto con patrones conductuales, puede compensar la deficiente capacidad fisiológica osmorregulatoria de ciertas especies de coleópteros en el desierto de Namibia, permitiéndoles recolectar agua del aire, con la finalidad de mantener un balance hídrico positivo en su ambiente natural. Estas nanoestructuras del exoesqueleto de los coleópteros son un fascinante ejemplo de adaptación biológica a los ecosistemas de zonas áridas, que podrían estar presentes en especies endémicas de la zona costera de la región de Atacama.

Con el objetivo de identificar patrones nanoestructurales similares en poblaciones de coleópteros del desierto costero de Atacama, se caracterizó la superficie del exoesqueleto de especies del género *Nycterinus* y *Diastoleus* mediante la técnica de microscopía electrónica de barrido (SEM). Mediante esta técnica se observaron estructuras de baja dimensionalidad en la superficie de los élitros, con presencia de protuberancias similares a nanopelos. En su conjunto, estas estructuras conforman una morfología similar a una escalera o valle., que presenta zonas de carácter hidrofílico y otras hidrofóbicas. Esta disposición morfológica podría contribuir a la captación pasiva o activa de humedad del aire por parte de ambas especies, especialmente durante la presencia de la camanchaca.

Las morfologías nanoestructuradas observadas en la superficie de exoesqueletos, junto con los patrones conductuales de especies del género *Nycterinus* y *Diastoleus* presentaron características que permiten su aplicación, entre otras, en el diseño biomimético de dispositivos o soluciones innovadoras para la captación de agua del aire.

Referencias

- [1] Nørgaard. T. et al. (2010), doi.org/10.1186/1742-9994-7-23.
- [2] Guandi. H et al. (2023), doi.org/10.1016/j.isci.2022.10581.lo

Higher-order obstructed atomic phase in centrosymmetric pentagonal monolayer PdSe₂

Víctor Núñez

*Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Sergio Bravo

*Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Mónica Pacheco

*Universidad Técnica
Federico Santa María,
Valparaíso, Chile*

Leonor Chico

*Universidad Complutense
de Madrid, Madrid,
España*

Julian Correa

*Universidad de Medellín,
Medellín, Colombia*

In this study, we delve into an investigation of the electronic and topological properties of monolayer palladium diselenide (PdSe₂), a two-dimensional material with an irregular pentagonal lattice structure. This monolayer has proven to be a stable system [1] with remarkable electrical and optical transport characteristics [2].

Our research was focused on analyzing the fundamental features of the valence bands of PdSe₂ monolayer using first-principles calculations and topological band theory tools [3]. We found that its electronic structure exhibits an atomic obstructed phase, related to higher-order topology (HOT) [4]. A detailed calculation of the electron localization function and Wannier charge centers suggests that this obstructed phase arises from the dimerization of selenium-selenium bonds and is protected by inversion symmetry.

One of the distinctive features of obstructed phases is the presence of highly localized electronic states at the corners of finite systems, known as corner states [5]. These corner states are related to the bulk obstruction and are a direct consequence of higher-order topology. Surprisingly, we found that, despite their localization, the corner charge in this system is not quantized, meaning its value can vary but remains protected by inversion symmetry.

Furthermore, we conducted numerical experiments to investigate how the application of mechanical strain affects the robustness of these corner states and their associated charge. Our results show that even under strain, obstructed phases can maintain their robustness and preserve their distinctive characteristics under the action of inversion-preserving perturbations. Moreover, we achieved controlled variation in the magnitude of the corner charge by manipulating the strain, opening the door to potential applications in future devices requiring control over specific electronic properties.

In summary, our study reveals the presence of an atomic obstructed phase with higher-order topology in PdSe₂ monolayer and demonstrates its robustness and controllability under different conditions, making it a promising system for technological applications and an exciting research platform in the field of materials physics.

Acknowledgments

VN and MP acknowledge the financial support of Chilean FONDECYT by grant 1211913. SB acknowledges DGIIE (UTFSM) through the Postdoctoral initiative. LC acknowledges financial support from the Spanish Ministry of Science and Innovation grants

PID2019-106820RB-C21 and PID2022-136285NBC31.

References

- [1] A. D. Oyedele et al. (2019), doi.org/10.1021/jacs.9b02593
- [2] B. Sergio et al. (2022), doi.org/10.1039/d2cp01822e
- [3] J. Cano and B. Bradlyn (2021), doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-041720-124134
- [4] F. Schindler et al. (2018), doi.org/10.1126/sciadv.aat0346
- [5] B. Xie et al. (2021), doi.org/10.1038/s42254-021-00323-4

Síntesis y caracterización de nanopartículas de oro multifuncionalizadas con ciclodextrinas y péptidos de reconocimiento de células tumorales de cáncer de ovario para la formulación y entrega controlada de epigallocatequina-3-galato (EGCG)

Fredys Sánchez Hoyos

ACCDIS, Facultad de
Ciencias Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile

Adriana Gauna

ACCDIS, Facultad de
Ciencias Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile

Maycol Huerta-Matus

Laboratorio de
Nanotecnología,
Departamento de
Química, Facultad de
Ciencias Químicas,
Universidad Andrés Bello

Eyleen Araya-Fuentes

Laboratorio de
Nanotecnología,
Departamento de
Química, Facultad de
Ciencias Químicas,
Universidad Andrés Bello

Marcelo Kogan

ACCDIS, Facultad de
Ciencias Químicas y
Farmacéuticas,
Universidad de Chile

El cáncer de ovario es uno de los tipos de cáncer más frecuentes en el mundo, ocupando el octavo lugar en la lista de diagnósticos. En 2020, más de 313.000 mujeres recibieron un diagnóstico de cáncer de ovario, y aproximadamente 207.000 murieron a causa de esta enfermedad. De hecho, el cáncer de ovario es la segunda causa más común de muerte por cánceres ginecológicos [1]. Para combatir esta enfermedad, se están implementando nuevas alternativas, como el uso de EGCG (epigallocatequina-3-galato), que ha demostrado ser prometedor en numerosos campos gracias a su potencial actividad anticancerígena y prooxidante [2,3]. La tecnología de nanopartículas de oro (NpAu) es una estrategia eficaz para la vehiculización de los complejos de inclusión de ciclodextrina/ fármaco, lo que permite una dosificación controlada y una vectorización mejorada por péptido de reconocimiento hacia células de cáncer de ovario. El objetivo de este trabajo es obtener NpAu esféricas de 30 nm multifuncionalizadas con ciclodextrinas y péptidos de reconocimiento de células de cáncer de ovario para la formulación y entrega controlada de EGCG. Para direccionar el sistema, se plantea la implementación del péptido FSH β 33-53, el cual es específico al receptor FSH, expresado en el cáncer de ovario. La ciclodextrina (CD) se utilizará para formar complejos de inclusión con la molécula EGCG, mejorando su estabilidad. Las NpAu funcionarán como nanovehículo para transportar los complejos de inclusión y ser vectorizado por el péptido, mejorando la selectividad y eficacia del tratamiento [4, 5]. Se logró sintetizar exitosamente NpAu esféricas de 30 nm con un plasmón de 526 nm utilizando la estrategia de síntesis a altas diluciones a una relación molar de 15 ([Citrato]/[oro]). La síntesis fue reproducible y se obtuvo una concentración final de 0,97 nM. Además, se logró estabilizar las NpAu con PEG carboxilo y metoxilo. El grupo carboxilo del PEG nos permitió funcionalizar la ciclodextrina y el péptido FSH. Se obtuvieron tres nanosistemas funcionalizados con diferentes proporciones de ciclodextrina y péptido. El seguimiento fisicoquímico mostró una variación en el diámetro hidrodinámico y potencial zeta de los nanosistemas. El potencial zeta fue el factor determinante para visualizar la funcionalización, al variar significativamente en cada proporción de funcionalización al disminuir el FSH. Posteriormente, se evaluó el efecto citotóxico de los nanovehículos sin carga de EGCG en concentraciones de hasta 1 nM, utilizando el ensayo

colorimétrico de MTT en la línea celular A2780. De acuerdo con la norma ISO 10993-5, los resultados indicaron que los nanovehículos no tuvieron un efecto citotóxico significativo, con un porcentaje de viabilidad superior al 80%. En los próximos estudios, se investigará la formación de complejos de inclusión con EGCG para su posterior análisis de actividad prooxidante, inhibición de proliferación e internalización celular en la línea A2780.

Agradecimientos

Fondap, Código: 1513001. Beca Minciencia (Colombia) Doctorado Exterior - 8852. Beca ANID Doctorado Nacional 2023; Folio No 21231043.

Referencias

- [1] American Cancer Society. (2023).
<https://www.cancer.org/cancer/types/ovarian-cancer/about/key-statistics.html>
- [2] Almatroodi et al. (2020), doi.org/10.3390/molecules25143146
- [3] Dobrzynska et al. (2020), doi.org/10.3390/biom10091268
- [4] Yao et al. (2020), doi.org/10.3389/fmolb.2020.00193
- [5] Amina et al. (2020), doi.org/10.2147/IJN.S279094

Aline Alfaro Ramírez
*Centro para el Desarrollo
de la Nanociencia y la
Nanotecnología
CEDENNA, Usach.*

Citotoxicidad de nanomateriales: formación del primer Laboratorio de Nanoseguridad en Chile

La nanotecnología ha tenido un gran desarrollo en los últimos años, lo que se espera siga aumentando en la próxima década. Actualmente está presente en campos como la agricultura, minería y medicina donde su aplicación ha traído considerables mejoras, así también su utilización en productos de uso cotidiano como desinfectantes, pinturas y la industria cosmética [1], en ese contexto que CEDENNA decidió crear un Laboratorio exclusivo para evaluar la citotoxicidad de los nanomateriales y las dosis adecuadas para su uso y aplicación. Desde su formación el Laboratorio de Nanobioensayos de la Unidad de Nanoseguridad de CEDENNA ha logrado realizar más de 30 análisis, tanto para muestras provenientes de laboratorios de investigación como para empresas que apliquen la nanotecnología a sus productos. El ensayo que se realiza sigue la norma ISO 19007 “Nanotechnologies – In vitro MTS assay for measuring the cytotoxic effect of nanoparticles”, análisis para el cual se está en proceso de acreditación. Esta norma nos entrega las directrices para realizar el ensayo y según los valores de citotoxicidad nos permite clasificar el material como no citotóxico, ligeramente, moderada o extremadamente citotóxico. Además de comparar los resultados obtenidos con el control recomendado de Cadmio.

Al evaluar los resultados de las concentraciones citotóxicas media (CC50) para el control de Cadmio de las muestras recibidas en este último año, logramos analizar los datos y evidenciar la complejidad del análisis biológico, las diferencias que se presentan según el tipo celular estudiado y la incertidumbre propia del método. Estos análisis nos muestran grandes desafíos para poder aproximarnos al efecto citotóxico de los nanomateriales y a buscar diferentes mecanismos para determinar la exposición a nanomateriales y su uso seguro para seguir aplicando los beneficios de nanotecnología.

Agradecimientos

PROY.BASAL-PUENTE CEDENNA AFB220001

Referencias

[1] Sanchez, F. et al (2010). doi.org/10.1016/j.conbuildmat.2010.03.014

Diseño y construcción de electrospinning de campo cercano

Cristian Castillo

*Magister Electricidad y
Electrónica Aplicada -
Universidad Austral de
Chile*

Carlos Fuhrhop

*Instituto de Electricidad y
Electrónica - Universidad
Austral de Chile*

Sebastián Braüchi

*Instituto de Fisiología -
Universidad Austral de
Chile*

El presente proyecto tiene como objetivo el diseño y la construcción de un sistema de electrospinning de campo cercano (NFES) [1] de bajo costo utilizando tecnologías de código abierto, como impresión 3D, hardware y software libre. La técnica de electrospinning es versátil y ampliamente aplicable en áreas como la biomedicina, electrónica y materiales avanzados. En particular, ésta se ha utilizado con éxito para generar estructuras de nanofibras alineadas, uniformes y controladas, las cuales son de gran superficie y de estructura porosa. ideales para la fabricación de biosensores de alta sensibilidad y selectividad. Diversos autores han diseñado biosensores basados en esta tecnología para la detección de biomoléculas como la glucosa, dopamina, estreptavidina, vitamina D3, MUC1, nicotina, progesterona, entre otras [2, 3].

En el diseño del equipo se ha utilizado el sistema mecánico de una impresora 3D económica (Monoprice Mini Select V2) para implementar el colector móvil y controlar la posición de la punta de la jeringa. Este sistema es controlado mediante un microcontrolador Arduino MEGA y una shield RAMPS 1.4.

Además, se ha diseñado y construido una bomba de jeringa utilizando piezas impresas en 3D y un motor paso a paso. La bomba de jeringa se controla mediante un Arduino nano y un controlador de motores. A través de una pantalla táctil, el usuario puede programar el caudal y volumen de la solución polimérica utilizada en el proceso de electrospinning.

Para mantener condiciones ambientales óptimas durante el proceso, todo el sistema de electrospinning se encuentra contenido dentro de una caja de acrílico. Se han incorporado sensores tanto dentro como fuera de la caja para monitorear constantemente la temperatura y la humedad.

La interfaz de usuario para ordenador ha sido desarrollada utilizando un lenguaje de código abierto. Esta permite el manejo del movimiento del colector y la altura de la aguja; el control del caudal y volumen de la solución a ser eyectada/absorbida por la bomba de jeringa y el control el voltaje de la fuente de alta tensión.

En las pruebas del sistema se ha empleado una solución polimérica PEO. A través de un protocolo de experimentación se determinaron los parámetros óptimos que permitan la producción de fibras alineadas de alta calidad, alcanzando fibras alineadas del orden de las 10µm. Las muestras obtenidas se han analizado utilizando microscopía óptica y electrónica.

En futuras aplicaciones se pretende utilizar las fibras producidas para diseñar biosensores, depositándolas sobre distintos electrodos y circuitos electrónicos, como guías de onda [4], circuitos interdigitales [5], transistores de efecto de campo, entre otros. Posteriormente, se procederá a la biofuncionalización con receptores biológicos para la detección de diversas biomoléculas, lo que abrirá nuevas posibilidades en el campo de la detección y diagnóstico

biomédico.

Agradecimientos

Programa de Magister Electricidad y Electrónica Aplicada, Laboratorio de Fisiología Sensorial.
Núcleo Milenio de Enfermedades Asociadas a Canales iónicos (MiNICAD, NCN 19_168).

Referencias

- [1] Sun et al, (2006), doi.org/10.1021/nl0602701
- [2] Halicka et al. (2021), doi.org/10.3390/ijms22126357
- [3] Aliheidari et al.(2019), doi.org/10.3390/s19163587
- [4] Fuhrhop et al.(2015), doi.org/10.13140/RG.2.1.3391.9840
- [5] Asmatulu et al.(2019), doi.org/10.1007/s12221-019-1096-x

Perovskite-based X-ray detector for radiotherapy applications

Emilia Antonia Suárez
Poblete

*Instituto de Física,
Pontificia Universidad
Católica de Chile / Centro
de Investigación en
Nanotecnología y
Materiales Avanzados,
Pontificia Universidad
Católica de Chile*

José Raúl
Sosa-Acosta
*Instituto de Física,
Pontificia Universidad
Católica de Chile / Centro
de Investigación en
Nanotecnología y
Materiales Avanzados,
Pontificia Universidad
Católica de Chile /
Facultad de Química,
Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Leunam
Fernández-Izquierdo
*Department of Material
Science and Engineering,
The University of Texas*

Beatriz Sánchez-Nieto,
Paola Caprile, Ignacio
Espinoza
*Instituto de Física,
Pontificia Universidad
Católica de Chile*

Daniel Cerda, Samuel
A. Hevia
*Instituto de Física,
Pontificia Universidad
Católica de Chile / Centro
de Investigación en
Nanotecnología y
Materiales Avanzados,
Pontificia Universidad
Católica de Chile*

In recent years there has been a growing interest in using perovskite-based detectors for X-ray dosimetry and imaging in radiotherapy (RT) and diagnosis. These direct detection detectors are characterized by a high sensitivity, which allows precise dose measurements at low radiation levels and an enhanced spatial resolution, as very small detection volumes are needed. Additionally, these detectors can be manufactured at low cost, making them highly attractive for practical applications. This study aimed to fabricate a perovskite-based X-ray detector, following the n-i-p architecture. The device consists of perovskite (CsPbBr₃) film as a photoactive material, located between an electron transport layer (ETL) and a hole transport layer (HTL). A compact nanometric layer of TiO₂ is used as ETL and a Carbon Nanotube based paste is used as HTL.

The synthesis of the CsPbBr₃ films was done by Chemical Vapor Deposition (CVD) in one step [1]. Films with thicknesses of 2.5 μm and a sensitive detection area of 1 cm² were fabricated. Its characterization as a dosimeter was performed using the XRad-320 preclinical irradiation cabinet. The first assessment included the evaluation of reproducibility, linearity with tube current (10 to 35 mA), and energy response (50 to 320 kVp). All the measurements were performed in complete darkness (closed cabinet door), for a 20 by 20 cm square field, locating the detector at the center of it, at 50 cm from the x-ray source. The detector was controlled by homemade software developed in LabView and operated at 1.5 V. It was possible to evaluate the reproducibility of the system by programming periodic beam on/off cycles of the irradiator with different times (30 to 60 s). The linearity measurement was performed for the 100 kVp beam with a 2 mm Al filter. For the energy response, a fixed tube current of 10 mA was used. The cabinet temperature was monitored periodically.

Preliminary results showed good reproducibility within cycles by exhibiting variations smaller than 1%. A linear fit to tube current vs. detector signal rate resulted in a R² of 0.94, which confirms the linear relation, but suggests that adjustments to the detector system or signal processing algorithm should be incorporated. As expected, increasing the X-ray beam energy, while maintaining irradiation time and tube current, resulted in an incrementing detector signal. These promising findings encourage further research on these perovskite-based detectors, aiming to develop flexible devices (i.e., adaptable to patient's surfaces) that can be used as dosimeters for in vivo peripheral dose measurements during RT. The successful realization of such detectors would significantly advance patient safety in radiation therapy.

Acknowledgments

This work was funded by Instituto de Física and Centro de Investigación en Nanotecnología y Materiales Avanzados of Pontificia Universidad Católica de Chile.

References

[1] Samuel A. Hevia, Leunam Fernández-Izquierdo, "Preparation Method of CsPbBr₃ Perovskite Films Using Chemical Vapor Deposition", Solicited International Patent PCT/CL2020/050082 (2020)