

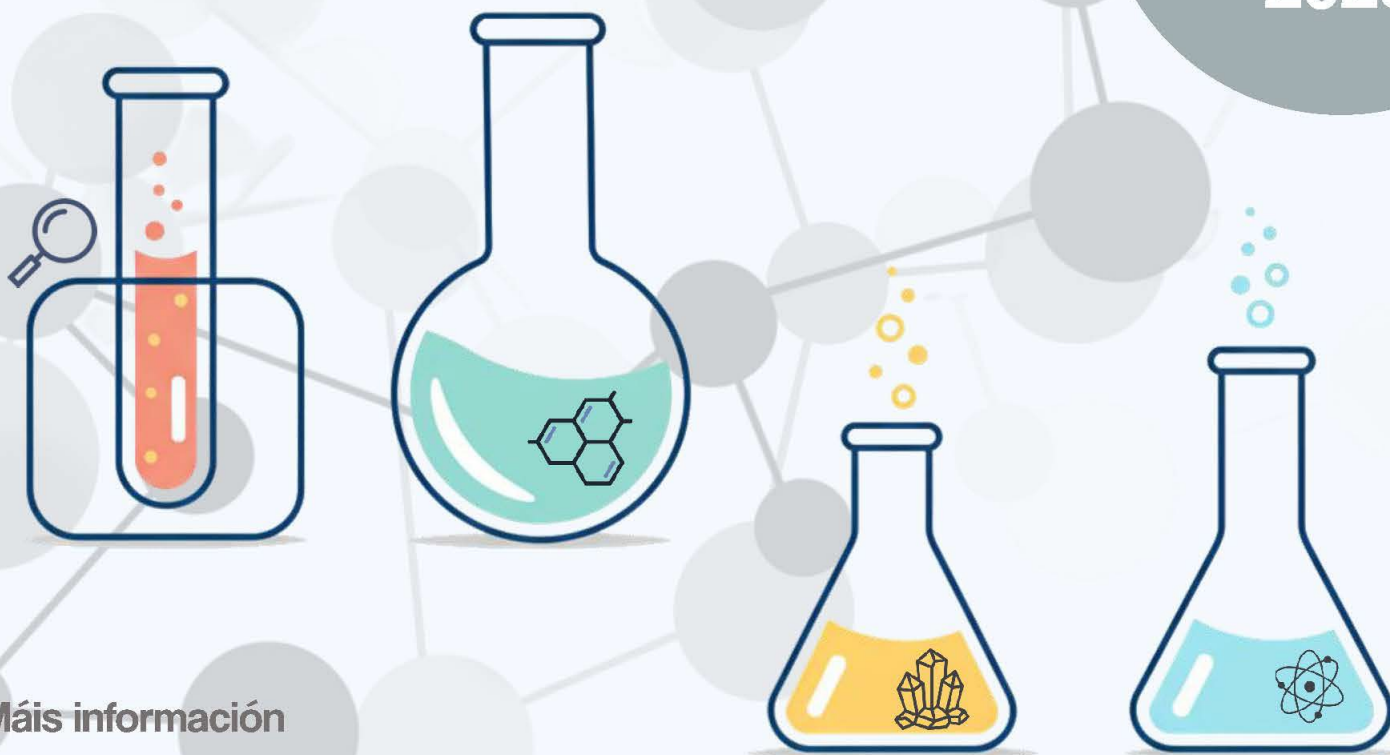
# V XUNTANZA DE INVESTIGADOR@S NOV@S NO ÁMBITO DA QUÍMICA

  @xinq\_usc

XINQ V

Facultade de Química  
Universidade de Santiago de Compostela

19 - 20  
novembro  
2025



Máis información



# XINQ\_5

V Xuntanza de Investigador@s Nov@s  
no ámbito da Química

## LIBRO DE RESUMOS

19 e 20 de novembro de 2025

Facultade de Química da USC

Web: <https://i.gal/QTOUK>

Enderezo electrónico: [xinq.secretaria@usc.gal](mailto:xinq.secretaria@usc.gal)



Organiza: Comisión de Normalización Lingüística da Facultade de Química,  
co apoio do Servizo de Normalización Lingüística da USC



Santiago de Compostela, 2025  
Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela  
HDL: <https://hdl.handle.net/10347/46554>

Distribuída baixo licenza *Creative Commons* 4.0 (CC BY 4.0)



**COMISIÓN DE NORMALIZACIÓN LINGÜÍSTICA DA FACULTADE DE QUÍMICA**, integrada por:

Presidente: Jesús Sanmartín Matalobos  
Secretaria: María Carmen Barciela Alonso  
Vogal: Luis Alberto García Suárez  
Vogal: Benito Quintana Álvarez  
Vogal: Ana M<sup>a</sup> González Noya  
Vogal: Carlos Vázquez Vázquez  
Vogal: Antonio Rumbo Gómez  
Vogal: Ana Guerra Santamarina

#### **COMITÉ CIENTÍFICO**

Martínez Calvo, Miguel (coordinador)  
Montes Goyanes, Rosa María  
Carlos Vázquez Vázquez  
Antonio Rumbo Gómez

#### **COMITÉ ORGANIZADOR**

Montoto Pintos, David  
Rivas Saborido, Adrián  
Seijas Cerceda, Ana  
Parada Pérez, Laura  
Álvarez Martínez, Víctor  
Blanco García, Laura

Organiza: **Comisión de Normalización Lingüística da Facultade de Química, co apoio do Servizo de Normalización Lingüística da USC**



# ÍNDICE

## ÍNDICE

ÍNDICE .....	5
PRESENTACIÓN .....	8
PROGRAMA.....	10
RESUMOS.....	14
C1- Fraccionamento de elementos terras raras en solos ferrálicos de Minas Gerais (Brasil).....	15
C2- Metodoloxía multiresiduo para a determinación de contaminantes emerxentes en lodos de plantas depuradoras de augas residuais. ....	17
C3- Integración da análise de augas residuais con fins epidemiolóxicas con datos de dispensación hospitalaria de ketamina co fin de investigar o seu potencial uso ilícito.....	18
C4- Determinación de metais en material particulado atmosférico.....	19
C5- Aplicación da bioimpresión 3d e das vesículas extracelulares ao estudo da obesidade. ....	20
C6- Modulación dos canais de NaV1.6 por ciguatoxinas do pacífico e do caribe: base molecular da súa potencia similar.....	21
C7- Deseño molecular de estruturas orgánicas covalentes baseadas en radicais para aplicacións de almacenamento de enerxía.....	22
C8- Sistemas microfisiolóxicos (OoC) como ferramenta para estudar a biodispoñibilidade oral das nanopartículas nos alimentos. ....	23
C9- Determinación de proteínas circulantes con carácter predictivo no cancro de mama HER2+.....	24
C10- Química sintética promovida polo potencial redox bacteriano.....	26
C11- Anelación Oxidante [5+2] Catalizada por Paladio de N-Fenil-2-Aminopiridinas con Alquinos: Acceso Sinxelo a Farmacóforos 1-Benzazepínicos. ....	27
C12- Optimización dunha reacción de redución abiótica do nitrato mediante óxidos de Fe e ácidos orgánicos para a súa aplicación en condicións naturais. ....	29
C13- Cando o metal decide: cobre e cobalto na regulación dos radicais biolóxicos. ....	31
C14- Avaliación de métodos de entrega da tecnoloxía CRISPR/Cas9 en liñas celulares mariñas .....	33
BASES, ACTAS e PREMIADOS .....	35
Bases dos premios das IV Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da Química (XINQ_5).....	36
Acta do premio do público .....	36
Acta do premio do xurado .....	37



# PRESENTACIÓN

A XINQ é un espazo de encontro no que as investigadoras e investigadores novos que desenvolven o seu traballo no ámbito da química poden dalo a coñecer ao resto da comunidade universitaria. A xuntanza está pensada para que @s nov@s investigador@s entendan que se pode explicar a ciencia, a química no noso caso, en lingua galega ao mesmo tempo que desenvolven as súas capacidades de comunicación en público.

A xuntanza desenvólvese a través dunha serie de comunicacións orais de carácter divulgativo onde, en galego, expoñen os aspectos máis significativos e xerais da investigación que realizan no seu máster ou doutoramento.

Nesta cuarta edición, o comité organizador considera que a XINQ se consolidou xa como un espazo para a difusión da investigación no ámbito da química na nosa universidade en galego. Nesta xuntanza pódense encontrar participantes procedentes da maioría dos centros de investigación e facultades da nosa institución, pero ten máis importancia, na nosa opinión, a participación de estudantes que non teñen o galego como lingua materna. El@s ofrécenos o exemplo da importancia que lle dan as persoas á lingua no proceso de integración e como ven nela un vínculo sentimental fundamental na nosa sociedade.

Dende a Comisión de Normalización Lingüística da Facultade de Química débese reflexionar sobre a participación do seu profesorado nesta actividade. Sería positivo que en cada edición unha parella de profesores puidesen expoñer a investigación realizada ou un tema científico de actualidade de xeito divulgativo en lingua galega. Deste xeito, co tempo, poderían animarse a desenvolver a súa actividade docente en galego utilizado en pouca medida na nosa facultade.

# **PROGRAMA**

## Programa

### V Xuntanza de Invetigador@s Nov@s no ámbito da Química

#### Mércores 19 de novembro de 2025

##### **09:45** Presentación da V Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da Química

Alberto García Suárez (vicedecano da Facultade de Química da USC), Miguel Martínez Calvo (coordinador do Comité Científico da XINQ\_5) e Manuel Núñez Singala (director do Servizo de Normalización Lingüística da USC).

### SESIÓN DE MAÑÁ

---

#### Sesión 1

---

**Moderación:** Rosa María Montes Goyanes e Adrián Rivas Saborido

##### **10:00** Comunicación (C-1) – Athos Alves Vieira

*Fraccionamento de elementos terras raras en solos ferrálicos de Minas Gerais (Brasil).*

##### **10:15** Comunicación (C-2) – Andrés Barros Soto-Quiroga

*Metodoloxía multiresiduo para a determinación de contaminantes emerxentes en lodos de plantas depuradoras de augas residuais.*

##### **10:30** Comunicación (C-3) – Carlos Pernas Fraguela

*Integración da análise de augas residuais con fins epidemiolóxicas con datos de dispensación hospitalaria de ketamina co fin de investigar o seu potencial uso ilícito*

##### **10:45** Comunicación (C-4) – Sheila González Barcia

*Determinación de metais en material particulado atmosférico*

##### **11:00** Debate

---

**11:15-11:45** Descanso para café

---

#### Sesión 2

---

**Moderación:** Carlos Vázquez Vázquez e David Montoto Pintos

##### **11:45** Comunicación (C-5) – Daniel García Barreiro

*Aplicación da bioimpresión 3d e das vesículas extracelulares ao estudo da obesidade*

**12:00 Comunicación (C-6) – María Carmen Outeiral Valiño**

*Modulación dos canais de nav1.6 por ciguatoxinas do Pacífico e do Caribe: base molecular da súa potencia similar. Obtencións de compostos helicoidais con potencial actividade biolóxica*

**12:15 Comunicación (C-7) – Sara Trigo Pérez (Máster)**

*Deseño molecular de estruturas orgánicas covalentes baseadas en radicais para aplicacións de almacenamento de enerxía*

**12:30 Debate**

**Xoves 20 de novembro de 2025**

**SESIÓN DE MAÑÁ**

---

**Sesión 3**

---

**Moderación:** Antonio Rumbo Gómez e Ana Seijas Cerceda

**10:00 Comunicación (C-8) – Iria Domínguez Robles**

*Sistemas microfisiolóxicos (OoC) como ferramenta para estudar a biodispoñibilidade oral das nanopartículas nos alimentos*

**10:15 Comunicación (C-9) – Noelia Vigo Díaz**

*Determinación de proteínas circulantes con carácter predictivo no cancro de mama HER2+*

**10:30 Comunicación (C-10) – David Montoto Pintos**

*Química sintética promovida polo potencial redox bacteriano*

**10:45 Comunicación (C-11) – Alejandro Suárez Lustres**

*Anelación Oxidante [5+2] Catalizada por Paladio de N-Fenil-2-Aminopiridinas con Alquinos: Acceso Sinxelo a Farmacóforos 1-Benzazepínicos*

**11:00 Debate**

---

**11:00-11:30 Descanso para café**

---

---

**Sesión 4**

---

**Moderación:** Miguel Martínez Calvo e Laura Parada Pérez

**11:30 Comunicación (C-12) – Iñaki Beceiro-Cillero**

*Optimización dunha reacción de redución abiótica do nitrato mediante óxidos de Fe e ácidos orgánicos para a súa aplicación en condicións naturais*

**11:45 Comunicación (C-13) – María Rodríguez-Padrón (Máster)**

*Cando o metal decide: cobre e cobalto na regulación dos radicais biolóxicos*

**12:00 Comunicación (C-14) – Ana Seijas Cerceda**

*Avaliación de métodos de entrega da tecnoloxía CRISPR/Cas9 en liñas celulares mariñas*

**12:15 Debate**

**12:30 Votacións finais**

**12:45 Acto de clausura da IV Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da Química**

Alberto García Suárez (vice decano da Facultade de Química da USC), Miguel Martínez Calvo e Rosa María Montes Goyanes (membros do Comité Científico da XINQ\_5).

---

**13:00 Fin da xornada**

---

# **RESUMOS**

## Comunicación -C1

### C1- Fraccionamento de elementos terras raras en solos ferrálicos de Minas Gerais (Brasil).

**Athos Alves Vieira<sup>1\*</sup>; Juan Antelo<sup>1</sup>; Xosé L. Otero<sup>1</sup>, José João Lelis<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>CRETUS. Departamento de Edafoloxía e Química Agrícola, Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago de Compostela, España. athos.alves@rai.usc.gal

<sup>2</sup>Departamento de Solos e Nutrición de Plantas. Universidade Federal de Viçosa, Minas Gerais, Viçosa, Brasil.

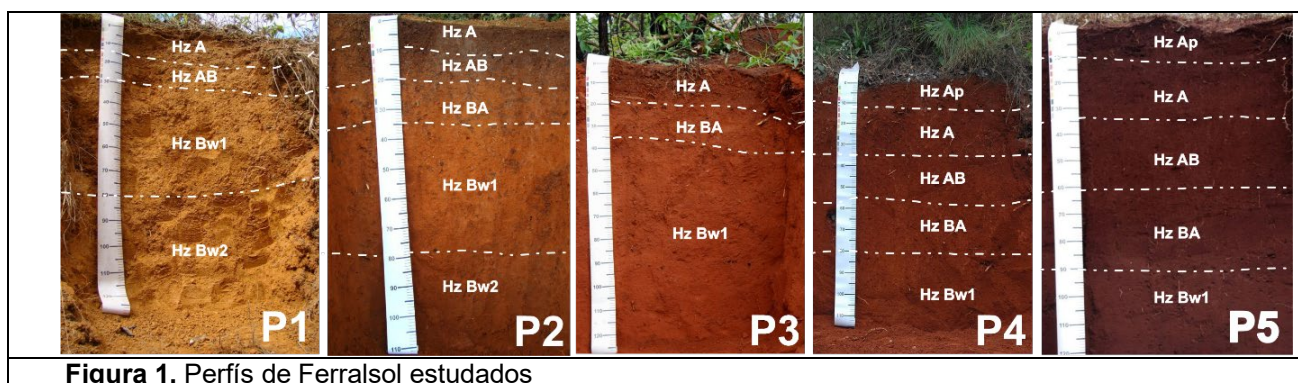
**Palabras chave:** Química ambiental; Xénese do solo; Ferralsol Lantánidos.

Os Elementos Terras Raras (REEs) forman un grupo homoxéneo dentro da táboa periódica e comparten propiedades químicas e físicas moi semellantes [1]. Segundo o establecido pola Unión Internacional de Química Pura e Aplicada [2], os REEs inclúen os 15 elementos do grupo dos lantánidos, con números atómicos (Z) sucesivos de 57 a 71 [3]. Debido ao comportamento xequímico semellante do itrio (Y) e do escandio (Sc) en relación cos lantánidos (o Sc só en medio acuoso), tamén son considerados REEs, totalizando 17 elementos [4, 5].

Minas Gerais (MG) é un estado brasileiro cunha ampla diversidade nos materiais de orixe do solo, con formacións xeolóxicas dos períodos Precámbrico e Fanerozoico. A riqueza xeolóxica deu lugar a pedóns que comprenden unha ampla gama de clases de solos no estado, nas cales a clase dos Ferralsol é dominante. A formación do solo prodúcese mediante interaccións entre factores de meteorización (químicos, físicos e biolóxicos) sobre o material de orixe, dando lugar a diversos procesos pedoxenéticos. Deste xeito, o estudo ten como obxectivo avaliar a distribución dos elementos terras raras (REEs) en diferentes Ferralsol do estado de Minas Gerais, co fin de comprender as implicacións dos seus posibles resultados. Así, recolléronse mostras de 5 perfís de Ferralsol (Táboa 1), totalizando 26 mostras de horizontes de solos (Figura 1), para determinar as súas propiedades morfolóxicas, químicas e físicas, así como o contido de elementos de terras raras.

**Táboa 1:** Clasificación dos Ferralsol estudados

ID	WRB	Tipo de Rocha	Altitude (m)	Clima Koppen
P1	Dystric Xanthic Ferralsol	Metamórfica	223	Cwa
P2	Dystric Rhodic Xanthic Ferralsol	Metamórfica	650	Cwb
P3	Dystric Rhodic Ferralsol	Sedimentaria	785	Cwb
P4	Ferric Rhodic Ferralsol	Metamórfica	1.200	Cwb
P5	Acric Rhodic Ferralsol	Ígnea	768	Aw



**Figura 1.** Perfís de Ferralsol estudados

De modo xeral, todos os solos presentaron un predominio dos elementos terras raras lixeiros ( $\Sigma$ LREE: La a Eu) en relación cos elementos terras raras pesados ( $\Sigma$ HREE: Gd a Lu). Esta tendencia é típica de ambientes fortemente meteorizados, nos cales os LREE son retidos preferentemente por adsorción específica en minerais secundarios, como a caolinita e os óxidos de ferro e aluminio, mentres que os HREE tenden a ser máis móbiles baixo condicións ácidas e oxidantes. Pola contra os contidos absolutos de REE variaron amplamente entre os perfís, reflectindo diferenzas mineralóxicas e químicas asociadas ao grao de meteorización, á mineraloxía dos óxidos presentes e á acidez do solo.

Entre os solos analizados, o Acric Rhodic Ferralsol (P5) e o Dystric Rhodic Ferralsol (P3) foron os máis enriquecidos en  $\Sigma$ REE, con sumas totais superiores a  $1140 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$  (por perfil), mentres que o Ferric Rhodic Ferralsol (P4) é o máis empobrecido, con valores arredor de  $101 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ . Os perfís Dystric Xanthic Ferralsol (P1) e Dystric Rhodic Xanthic Ferralsol (P2) presentaron  $\Sigma$ REEs intermedios ( $250 - 403 \text{ mg}\cdot\text{kg}^{-1}$ ). O comportamento xeoquímico pode resumirse na seguinte secuencia, de maior a menor concentración: Acric Rhodic Ferralsol (P5) > Dystric Rhodic Ferralsol (P3) > Dystric Xanthic Ferralsol (P1) > Dystric Rhodic Xanthic Ferralsol (P2) > Ferric Rhodic Ferralsol (P4).

O Acric Rhodic Ferralsol presentou un bo equilibrio entre acidez e retención en óxidos, así como unha elevada acumulación de REE, aínda que cun forte fraccionamento entre LREEs e HREEs; mentres que o Ferric Rhodic Ferralsol, a pesar de ser moi ferruxinoso, mostrou un empobrecemento debido a que a hematita e goethita aparecen en formas altamente cristalinas e pouco reactivas.

En conclusión, pódese afirmar que os REE están fortemente controlados pola mineraloxía da fracción arxilosa e polos óxidos de Fe e Al. Ademais, o ambiente tropical húmido de Minas Gerais favorece a meteorización intensa e o fraccionamento dos REE, cunha retención preferente dos LREEs nas capas superficiais. Entre os elementos terras raras, o Ce aparece sistematicamente como o máis abundante, reflectindo unha anomalía positiva de Ce, típica de solos ben oxidados, onde se produce a oxidación de  $\text{Ce}^{3+}$  a  $\text{Ce}^{4+}$  e a súa inmovilización como óxido de cerio. En canto ao Eu, este elemento presentou valores absolutos baixos, é dicir, ningunha anomalía positiva marcada; un patrón típico de anomalía negativa de Eu, asociada á eliminación de feldespatos e plaxioclasas durante a meteorización intensa.

## Referencias

- [1] Hu, Zhengyi, Haneklaus, Silvia, Sparovek, Gerd and Schnug, Ewald (2006b)' Rare Earth Elements in Soils', Communications in Soil Science and Plant Analysis, 37:9, 1381 - 1420 URL: <http://dx.doi.org/10.1080/00103620600628680>
- [2] IUPAC. International Union of Pure and Applied Chemistry. Nomenclature of Inorganic Chemistry IUPAC Recommendations 2005. ISBN 0-85404-438-8. For further information see our web site at [www.rsc.org](http://www.rsc.org) and the IUPAC site at [www.iupac.org](http://www.iupac.org).
- [3] Kabata-Pendias A., Henryk Pendias. Trace elements in soils and plants. 3rd ed. p. cm. Includes bibliographical references (p. 331). ISBN 0-8493-1575-1 (alk. paper). S592.6.T7 K3 2000 631.4'1-dc21.
- [4] McLennan, S.M., Taylor, S.R., 2012. Geology, geochemistry, and natural abundances of the rare earth elements. Encycl. Inorg. Bioinorg. Chem. John Wiley Sons, Ltd., Hoboken, NJ, USA. <https://doi.org/10.1002/9781119951438.eibc2004>.
- [5] Voncken, J.H.L., 2016. The Rare Earth Elements: An Introduction. Springer. Wall, F., 2014. Elementos de terras raras. Crit. Met. Handb. 312-339.

## Comunicación -C2

### C2- Metodoloxía multiresiduo para a determinación de contaminantes emerxentes en lodos de plantas depuradoras de augas residuais.

**A. Barros, G. Castro, I. Rodríguez, M. Ramil**

*Departamento de Química Analítica, Nutrición y Bromatología, Instituto de Investigación do Medio Acuático para unha Saúde Global (iARCUS). Universidade de Santiago de Compostela. 15782-Santiago de Compostela, Spain.*

[andres.barros@rai.usc.gal](mailto:andres.barros@rai.usc.gal)

**Palabras chave:** química analítica; química ambiental; lodos de depuradora.

Durante as últimas décadas, a presenza de contaminantes emerxentes en diferentes compartimentos presentes no tratamento de augas residuais nas plantas depuradoras foi moi estudado [1,2]. Entre os compartimentos presentes nas plantas depuradoras, o lodo é o residuo máis problemático, debido á súa complexa composición e a súa alta capacidade para reter contaminantes. A pesar disto os estudos sobre a presenza de contaminantes emerxentes en lodo son moi limitados, debido ao reto que supón a análise dunha matriz tan complexa. [3]

Para abordar esta falta de información, probáronse diversos métodos de extracción para fármacos e produtos de coidado persoal en lodo, entre eles, a extracción con líquidos presurizados (PLE) [4], a dispersión de matriz en fase sólida (MSPD) [3] e QuEChERS [5]. A pesar destes avances, aínda é necesario unha metodoloxía analítica robusta capaz de extraer e analizar de forma eficiente un gran número de contaminantes con diferentes propiedades fisicoquímicas.

Neste traballo presentamos unha metodoloxía novidosa e validada baseada nunha extracción en dous pasos por QuEChERS (extracción e purificación), para a determinación simultánea dun gran número de contaminantes emerxentes. Os compostos estudados seleccionáronse tendo en conta as últimas listas de vixilancia da unión europea [6], a directiva de augas residuais ou a presenza dos compostos no medio ambiente.

A metodoloxía proposta foi optimizada avaliando parámetros clave tales como tipo de sorbente e cantidade, disolventes seleccionados e tempo de axitación necesario para garantir a eficiencia, exactitude e repetibilidade. A metodoloxía optimizada foi aplicada para cuantificar os contaminantes seleccionados en mostras de lodo de diferentes plantas de tratamento de auga residual do norte de España, proporcionando información sobre a presenza e distribución destes contaminantes nos residuos do tratamento de augas residuais.

---

#### Referencias

- [1] Ternes, T.A., 1998. Occurrence of drugs in German sewage treatment plants and rivers. *Water Res.* 32, 3245–3260. [https://doi.org/10.1016/S0043-1354\(98\)00099-2](https://doi.org/10.1016/S0043-1354(98)00099-2).
- [2] Hirsch, R., Ternes, T.A., Haberer, K., Mehlich, A., Ballwanz, F., Kratz, K.L., 1998. Determination of antibiotics in different water compartments via liquid chromatography-electrospray tandem mass spectrometry. *J. Chromatogr. A* 815, 213–223. [https://doi.org/10.1016/S0021-9673\(98\)00335-5](https://doi.org/10.1016/S0021-9673(98)00335-5).
- [3] V. Fernández-Fernández, M. Ramil, I. Rodríguez. 2023. Basic micro-pollutants in sludge from municipal wastewater treatment plants in the Northwest Spain: Occurrence and risk assessment of sludge disposal. *Chemosphere* 335,139094. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2023.139094>
- [4] Pang, L., Yang, P., Ge, L., Du, J., Zhang, H., 2017. Accelerated solvent extraction combined with solid phase extraction for the determination of organophosphate esters from sewage sludge compost by UHPLC–MS/MS. *Anal. Bioanal. Chem.* 409, 1435–1440. <https://doi.org/10.1007/s00216-016-0078-8>.
- [5] W. Peysson, E. Vulliet. 2013. Determination of 136 pharmaceuticals and hormones in sewage sludge using quick, easy, cheap, effective, rugged and safe extraction followed by analysis with liquid chromatography–time-of-flight-mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*, 1290, 46– 61. <http://dx.doi.org/10.1016/j.chroma.2013.03.057>
- [6] European Commission, 2022. Decision (EU) 2022/1307 of 22 July 2022 Establishing a Watch List of Substances for Union-wide Monitoring in the Field of Water Policy Pursuant to Directive 2008/105/EC of the European Parliament and of the Council. Off. J. Eur. Union.

## Comunicación -C3

### C3- Integración da análise de augas residuais con fins epidemiolóxicas con datos de dispensación hospitalaria de ketamina co fin de investigar o seu potencial uso ilícito.

**C. Pernas Fraguela<sup>1</sup>, U. Lertxundi<sup>2</sup>, A. Prieto<sup>3</sup>, G. Orive<sup>4</sup>, V. Akhrimenko<sup>4</sup>, I. Aritzi<sup>5</sup>, R. Rodil<sup>1</sup>, R. Montes<sup>1</sup>, J. B. Quintana<sup>1</sup>, A. Estévez<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, Instituto de Investigación do Medio Acuático para Unha Saúde Global (iARCUS), Rúa Constantino Candeira S-N., 15782 Santiago de Compostela, España

\*carlos.pernas.fragueta@usc.gal

<sup>2</sup>Instituto de Saúde Bioaraba, Osakidetza, Red de Saúde Mental de Araba, Hospital Psiquiátrico de Araba, Vitoria-Gasteiz, España

<sup>3</sup>Departamento de Química Analítica, Facultade de Ciencia e Tecnoloxía, Universidade do País Vasco (UPV/EHU), Leioa, País Vasco, España

<sup>4</sup>NanoBioCel group, Laboratorio de Farmacia, Universidade do País Vasco (UPV/EHU), Vitoria-Gasteiz, España

<sup>5</sup>Director de Proyectos, AiLaket!

**Palabras chave:** química analítica; substancias de abuso; augas residuais

Actualmente, hai dous fármacos de uso humano que conteñen ketamina: por un lado, o *Ketalar*, unha forma racémica que se emprega como anestésico; por outro lado, o *Spravato*, que contén unicamente o enantiómero S-ketamina e que ten un uso como antidepressivo<sup>1</sup>. Ademais, tamén existe un uso recreativo da ketamina, máis tradicional en Asia pero que se está estendendo en Europa nos últimos tempos. Este consumo ilícito dáse na forma racémica.

Neste traballo combínase a análise de augas residuais con fins epidemiolóxicas (WBE, das súas siglas en inglés) mediante análise enantiomérica con datos de dispensación hospitalaria para discernir os potenciais consumos ilícitos<sup>2</sup>.

Deste xeito, desenvolveuse unha metodoloxía analítica para detectar e cuantificar os enantiómeros da ketamina atopados na auga residual mediante cromatografía de líquidos cunha columna quiral acoplada a espectrometría de masas en tándem. As mostras filtradas, e con patrón interno engadido, pocesáronse para proceder á súa cuantificación e cálculos de consumo derivados de WBE. Paralelamente, analizáronse mostras reais proporcionadas por *AiLaket!* Para coñecer o perfil enantiomérico da ketamina consumida de forma ilícita.

Finalmente, o método validouse e aplicouse a mostras reais de Galicia e o País Vasco. Asemade, solicitouse a información correspondente á dispensación dos fármacos que conteñen ketamina aos servizos de saúde.

Os resultados das mostras reais demostraron que a ketamina consumida de forma ilícita é racémica. Por outro lado, a análise de augas residuais mostrou que hai un maior consumo de ketamina no País Vasco que en Galicia. En canto ao perfil enantiomérico, o isómero R-ketamina, menos activo no corpo humano, presenta concentracións lixeiramente superiores, reforzando a tese do consumo racémico.

Finalmente, a comparación entre o consumo estimado a través de WBE e a dispensación hospitalaria demostrou que existe un consumo ilícito.

#### Agradecementos

Este traballo foi financiado polo Departamento de Saúde do Goberno Vasco (2023111054), a Rede de Saúde Mental de Araba (Resolución nº 39/2025), Instituto de Saúde Carlos III e fondos FEDER (RD24/0003/0020), rede RIAPAd), a Axencia Estatal de Investigación MCIN/AEI/10.13039/501100011033 (RED2022-134363-T e PID2020-117686RB-C32), o Ministerio de Educación, Formación Profesional e Deportes (FPU23/01870) e a Xunta de Galicia (ED481B-2025/042)

<sup>1</sup> S. Alberich, et al., *Revista de psiquiatría y salud mental*, **2017**, 10(2), 104-112

<sup>2</sup> E. Pocerull, et al., *Revista española de drogodependencias*, **2020**, 45(2), 91-103

## Comunicación -C4

### C4- Determinación de metais en material particulado atmosférico.

**S. González-Barcia, M.C. Barciela-Alonso, E. Peña-Vázquez**

*Grupo de Elementos Traza, Espectroscopia e Especiación (GETEE), Instituto de Materiais (iMATUS), Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía, Facultade de Química, Avenida das Ciencias, s/n, Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago de Compostela, España., sheila.gonzalez.barcia@rai.usc.gal*

**Palabras chave** Química analítica; particulado atmosférico; elementos traza.

A nanotecnoloxía xera preocupación ambiental pola falta de datos sobre a presenza e riscos dos nanomateriais. Entre os nanomateriais máis empregados, destacan as nanopartículas de prata (AgNPs), dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>NPs) e óxido de cerio (CeO<sub>2</sub>), usadas en diversos produtos como pinturas, cremas solares e compostos cerámicos. As nanopartículas de CeO<sub>2</sub> tamén son consideradas potenciais contaminantes, polo seu uso como catalizadores en motores diésel.

Os efectos da contaminación atmosférica, ligada a enfermidades respiratorias, agrávase pola presenza de materia particulada (PM) procedente sobre todo do tráfico urbano. Prevese un aumento das nanopartículas no aire, pero existen poucos estudos sobre a súa detección. A Directiva (UE) 2024/2881 endurece os límites de certos metais tóxicos (Pb, As, Ni, e Cd)

<sup>1</sup>, aínda que non regula a concentración das nanopartículas metálicas.

O obxectivo desta investigación é desenvolver un método analítico para cuantificar os elementos presentes en particulado atmosférico recollido en filtros de aire en Galicia. Estudáronse os seguintes analitos: Ti, V, Cr, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Se, Rb, Zr, Mn, Mo, Ag, Cd, Sn, Sb, Ba, Ce, Pt, Hg, Pb, La e Cs.

Para a determinación multielemental empregouse a Espectrometría de Masas con Plasma de Acoplamento Indutivo (ICP-MS). En primeiro lugar, realizouse unha dixestión ácida asistida por microondas con HNO<sub>3</sub> (69% v/v) e H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (33% v/v) para a liberación dos analitos da matriz da mostra. A medida realizouse en modo KED empregando o He como gas de colisión reducindo así as interferencias poliatómicas. A calibración realizouse mediante o método de adición estándar no rango de 5 a 150 µg L<sup>-1</sup> para todos os elementos e utilizouse o Rh como patrón interno.

Avaliáronse as características analíticas do método, obtendo límites de detección instrumentais comprendidos entre 2,5·10<sup>-3</sup> µg L<sup>-1</sup> para Ce ata 0,7 µg L<sup>-1</sup> para Fe. Para avaliar a precisión, realizouse un estudo de repetibilidade, obtendo un CV inferior a 5% para todos os elementos. No caso da exactitude empregáronse materiais de referencia, atopándose una boa concordancia entre os valores experimentais e certificados.

Os resultados nas mostras amosaron concentracións máis elevadas de Fe e Zn con valores de 0,84 µg m<sup>-3</sup> e 0,30 µg m<sup>-3</sup>, respectivamente. Os elementos de menor concentración foron o Cd (0,43 ng m<sup>-3</sup>) e o Mo (0,61 ng m<sup>-3</sup>), mentres que As e Hg non se cuantificaron (concentracións inferiores ao límite de detección).

---

[1] Parlamento Europeo e Consello da Unión Europea. (2024, outubro 23). Directiva (UE) 2024/2881 do Parlamento Europeo e do Consello, sobre a calidade do aire ambiente e unha atmosfera máis limpa en Europa. Diario Oficial da Unión Europea, 2881, 1–70. <https://www.boe.es/buscar/doc.php?id=DOUE-L-2024-81722>.

## Comunicación -C5

### C5- Aplicación da bioimpresión 3d e das vesículas extracelulares ao estudo da obesidade.

#### D. García Barreiro

**Palabras chave:** Bioquímica/biotecnoloxía; Química da saúde; Química de materiais.

A obesidade constitúe un dos principais desafíos sanitarios do século XXI. A súa complexidade metabólica e celular fai difícil reproducir en laboratorio o comportamento real do tecido adiposo humano, especialmente cando se pretende estudar a interacción entre as células, os sinais inflamatorios e os procesos de resistencia á insulina. Neste contexto, a bioimpresión 3D emerxe como unha ferramenta revolucionaria para reconstruír modelos tridimensionais que imiten a estrutura e función do tecido adiposo, ofrecendo novas oportunidades na investigación biomédica e no deseño de terapias personalizadas.

Neste traballo preténdese desenvolver biodispositivos impresos en 3D que combinen adipocitos brancos, obesos e pardos, empregando biotintas de nova xeración optimizadas para reproducir as propiedades da matriz extracelular [5]. Estas biotintas, baseadas en polímeros naturais como a xelatina e o alxinato, melloraránse mediante intelixencia artificial, que permitirá identificar as combinacións máis axeitadas de materiais para maximizar a viabilidade celular e o mimetismo biolóxico [3]. O obxectivo é xerar modelos experimentais que reproduzan con precisión tanto os procesos fisiolóxicos (como a termoxénese nos adipocitos pardos) coma os patolóxicos (como a hipertrofia lipídica ou a resistencia á insulina nos adipocitos brancos obesos).

Unha das innovacións centrais desta investigación é o deseño de sistemas de liberación controlada de vesículas extracelulares (VEs). Estas pequenas estruturas, liberadas polas propias células, conteñen proteínas, lípidos e ARN que actúan como mensaxeiros biolóxicos [4]. Ao incorporalas nas biotintas, créanse scaffolds capaces de liberar gradualmente estes sinais bioactivos, reproducindo de forma controlada o diálogo celular que ocorre no tecido adiposo real. Esta estratexia abre a porta a simular procesos inflamatorios, respostas metabólicas e mecanismos de reparación tisular sen recorrer a modelos animais complexos.

A nivel experimental, este traballo combina a enxeñaría de materiais, bioquímica e ciencia de datos, integrando técnicas de cultivo celular, microscopía avanzada e análise computacional. O uso de algoritmos de aprendizaxe automática permitirá establecer correlacións entre a composición química das biotintas e a resposta biolóxica das células impresas, reducindo tempos de optimización e custos experimentais. Así, a investigación sitúase na fronteira entre a biotecnoloxía e a química dos materiais, ofrecendo unha visión moderna e sostible do desenvolvemento de modelos biolóxicos complexos.

O impacto potencial é dobre: por unha banda, achega novas ferramentas para estudar a obesidade e as súas comorbilidades (diabetes tipo 2, inflamación crónica, dislipemias); por outra, contribúe á creación de biodispositivos personalizados que poderían empregarse para probar fármacos, estudar interaccións metabólicas ou mesmo deseñar terapias rexenerativas. En conxunto, este traballo exemplifica como a química, aplicada ao deseño de materiais biocompatibles e á comprensión das súas interaccións moleculares, pode converterse nunha aliada esencial da medicina preventiva e personalizada do futuro.

#### Referencias

- [1] Flores-Torres, S., et al. *Biomaterials* 2021, 276: 121–143.
- [2] Crewe, C., et al. *Cell Metab.* 2021, 33(4): 716–726.
- [3] Colombo, M., et al. *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.* 2013, 14(5): 316–328.

## Comunicación -C6

### C6- Modulación dos canais de NaV1.6 por ciguatoxinas do pacífico e do caribe: base molecular da súa potencia similar.

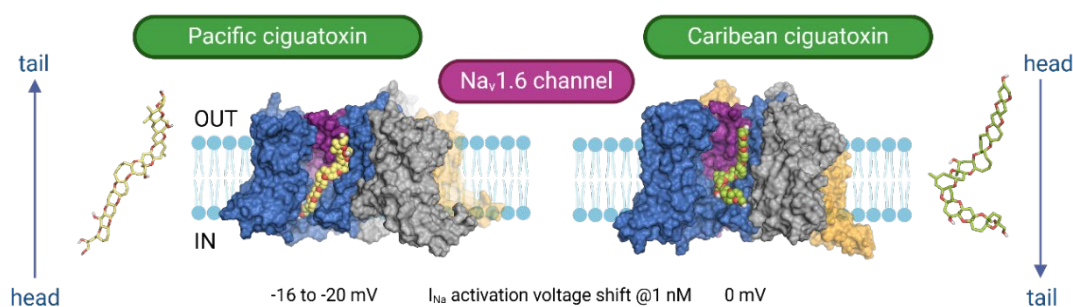
**M.C.Outeiral,<sup>1</sup> E. Lence,<sup>1</sup> e C.González-Bello<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) e Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela (Spain), correo: [mcarmen.outeiral@usc.gal](mailto:mcarmen.outeiral@usc.gal)

**Palabras chave** : química computacional; canais de sodio; ciguatoxinas

A modulación da función das proteínas/encimas é un fenómeno fundamental na bioloxía para comprender procesos relevantes, como a sinalización celular, a expresión xenética, a biodistribución, a biotransformación ou a activación/desactivación. Este mecanismo baséase na capacidade das proteínas/encimas de existir en diversos estados conformacionais con distintas funcións biolóxicas asociadas (activa/inactiva), o cal se induce ao unirse a compostos pequenos ou biomacromoléculas específicas. Estes ligandos actúan como interruptores conformacionais que estabilizan selectivamente certos estados conformacionais das proteínas. Porén, os detalles moleculares que rexen a dinámica das proteínas para alcanzar o seu “estado conformacional bioactivo” e, en moitos casos, a súa estrutura tridimensional completa, seguen sendo difíciles de comprender. Neste sentido, os avances da química computacional nos últimos 50 anos demostraron mellorar a comprensión de moitos procesos biolóxicos relevantes. Técnicas como as simulacións de dinámica molecular ou os cálculos de mecánica cuántica/mecánica molecular permiten unha mellor comprensión do proceso de recoñecemento molecular e a catálises, esenciais para a maioría das funcións biolóxicas.

Aplicamos estas técnicas para comprender a citotoxicidade das ciguatoxinas do Caribe e do Pacífico, que causan en humanos a síndrome denominada intoxicación por ciguatera, a intoxicación alimentaria humana máis común asociada a toxinas mariñas naturais. Durante décadas, as directrices establecidas polas axencias reguladoras asumiron que a potencia da ciguatoxina do Caribe era dez veces menor que a da ciguatoxina do Pacífico. <sup>[1]</sup> Porén, recentemente demostramos que a súa citotoxicidade é similar, polo que é necesario revalidar a súa regulación. <sup>[2]</sup> Os nosos estudos de simulación explican o seu impacto específico no potencial de activación do canle NaV1.6, tal como se observou experimentalmente, e proporcionan unha visión detallada dos efectos causados por estas toxinas a escala atómica.



#### Agradecementos:

Agradecemos a Axencia Estatal de Investigación (PID2022-136963OB-I00), a Xunta de Galicia [ED431C 2021/29, ED431G 2023/03] e ao Fondo Europeo de Desenvolvemento Rexional polo seu apoio financeiro. Agradecemos ao Centro de Supercomputación de Galicia (CESGA) o uso do ordenador Finis Terrae.

#### Referencias

[1] [Report of the expert meeting on ciguatera poisoning: Rome, 19-23 November 2018](#)

[2] S. Raposo-García, D. Castro, E. Lence, E. Estévez, J. M. Leão, C. González-Bello, A. Gago-Martínez, M. C. Louzao, C. Vale, L. M. Botana, *Expo. Health* **2023**, *15*, 641–660.

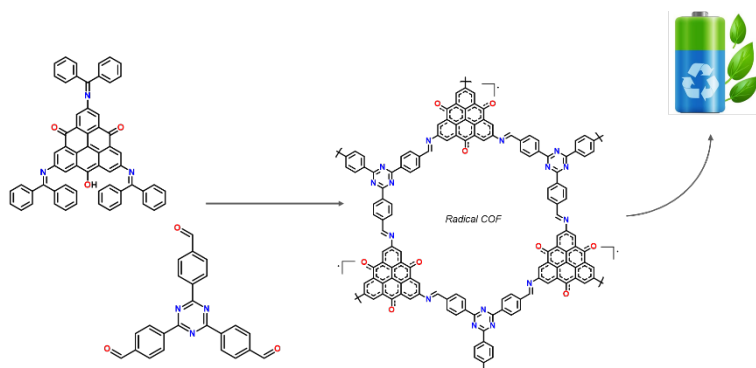
## Comunicación -C7

### C7- Diseño molecular de estruturas orgánicas covalentes baseadas en radicais para aplicacións de almacenamento de enerxía.

**S. Trigo,<sup>1</sup> P. Escamilla,<sup>1</sup> M. Souto<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CIQUS) e Departamento de Química Física, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela (España), [sara.trigo@rai.usc.gal](mailto:sara.trigo@rai.usc.gal)

**Palabras chave:** Química de materiais; química sostible; redes orgánicas covalentes; materiais electroactivos; baterías orgánicas.



O enfoque molecular da ciencia de materiais demostrou ser un campo de investigación prometedor para o desenvolvemento de novos materiais e tecnoloxías, sendo moi interesante polas aplicacións en electrónica e almacenamento de enerxía, entre outras. Entre estes materiais, as redes orgánicas covalentes (COFs) destacan por ser polímeros porosos e cristalinos formados por bloques de construción unidos mediante enlaces covalentes, obtendo redes bidimensionais (2D) e tridimensionais (3D) [1]. Nos últimos anos, os COFs emerxeron como alternativa a materiais orgánicos para eléctrodos en baterías e supercondensadores, grazas á súa ampla versatilidade química e estrutural [2]. En comparación cos eléctrodos inorgánicos convencionais, os COFs ofrecen certas vantaxes como materiais de eléctrodo para baterías, tales como a abundante dispoñibilidade de materias primas, a sustentabilidade, a alta estabilidade e a insolubilidade no electrólito [3]. Ademais, os COFs presentan sitios activos redox, podendo así reducirse e oxidarse durante as etapas de carga e descarga das baterías. A baixa condutividade que presentan estas redes orgánicas limita a súa aplicabilidade como sistema de almacenamento enerxético ou material electrónico. Como potencial solución a este inconveniente, o uso de radicais orgánicos neutros é un enfoque prometedor debido á súa capacidade para aumentar a condutividade ao incrementar o número de portadores de carga libres dentro da estrutura. [4]

Para explorar as propiedades electrónicas dun COF mediante a incorporación de unidades radicais neutras, decidimos investigar o uso do bloque de construción radical trioxotrianguleno (TOT) para a creación de COFs baseados en radicais. As propiedades estruturais, químicas e electrónicas do TOT, previamente estudadas [5], convérteno nunha molécula de alto interese para empregar na construción de COFs. Neste proxecto presentamos o emprego dun derivado do TOT (TOTBr<sub>3</sub>) como bloque de construción precursor para a preparación dun novo COF poroso e cristalino baseado en radicais, adecuado para aplicacións en baterías de ións metálicos (Li<sup>+</sup>, Na<sup>+</sup>).

## Referencias

- [1] C. S. Diercks, O. M. Yaghi, *Science* **2017**, *355*, 923.
- [2] Haldar, S.; Schneemann, A.; Kaskel, S. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 13494-13513.
- [3] Souto, M.; Ribeiro, C.; Dantas, R. **2023**, *60*, 138-149.
- [4] Deng, N.; Liu, Y.; Yu, W.; Kang, J.; Li, Q.; Gao, H.; Zhang, L.; Kang, W.; Liu, Y.; Cheng, B. *Energy Storage Materials* **2022**, *46*, 29-67.
- [5] Murata, T.; Yokoyama, M.; Ueda, A.; Kanzaki, Y.; Shiomi, D.; Sato, K.; Takui, T.; Morita, Y. *Chem. Lett.* **2024**, *49*, 95-98.

## Comunicación -C8

### C8- Sistemas microfisiolóxicos (OoC) como ferramenta para estudar a biodisponibilidade oral das nanopartículas nos alimentos.

**I. Domínguez-Robles<sup>1</sup>, R. Domínguez-González<sup>1</sup>, O. Beltrán-Osuna<sup>1,2</sup>, P. Taboada Antelo<sup>2</sup>, A. Moreda-Piñeiro<sup>1</sup>.**

<sup>1</sup> Grupo de Elementos Traza, Espectroscopía e Especiación (GETEE), Instituto de Materiais (iMATUS), Departamento de Química Analítica, Nutrición e Bromatoloxía. Facultade de Química, Universidade de Santiago de Compostela, España. iria.domínguez.robles@rai.usc.gal

<sup>2</sup> Grupo de Física de Coloides y Polímeros (GFPC), Instituto de Materiais (iMATUS), Departamento de Física de Partículas. Facultade de Física, Universidade de Santiago de Compostela, España.

**Palabras chave:** Química analítica; Biodisponibilidade oral; *Organ-on-a-Chip*.

O uso crecente de nanopartículas (NPs) metálicas na industria alimentaria fai necesaria a implementación de modelos avanzados que permitan avaliar o seu comportamento tras a inxestión. Xorde a necesidade de optimizar os métodos de determinación e caracterización de NPs en matrices biolóxicas, así como avaliar a bioaccesibilidade e biodisponibilidade oral das mesmas<sup>1</sup>.

As metodoloxías *in vitro* tradicionais, aínda que eficaces, presentan limitacións á hora de reproducir as condicións fisiolóxicas reais do tracto gastrointestinal humano. Neste traballo explóranse sistemas microfisiolóxicos baseados en dispositivos microfluídicos avanzados (órganos nun chip, OoC) que integran cocultivos de células epiteliais intestinais humanas (Caco-2 e HT-29) baixo condicións de fluxo dinámico. Estes modelos permiten simular de maneira máis realista a barreira intestinal, incluíndo a capa de moco naturalmente presente, esencial para estudar a absorción e retención das NPs tras un proceso previo de dixestión *in vitro* estandarizado (INFOGEST).

Estudáronse nanopartículas de prata (AgNPs) e de dióxido de titanio (TiO<sub>2</sub>NPs), amplamente empregadas na industria alimentaria polas súas propiedades antimicrobianas. Para a súa determinación, proponse o emprego da espectrometría de masas con plasma acoplado inductivamente, medindo en modo de partículas individuais (spICP-MS) que permite cuantificar o contido e determinar o tamaño das NPs nas distintas fraccións analizadas.

Próbanse catro dispositivos microfluídicos diferentes, con arquitecturas variadas, que permiten analizar, segundo o modelo, ata catro fraccións analíticas: a fracción bioaccesible, a fracción retida nas células, a parte asociada ao coláxeno e a fracción biodisponíble que atravesará a barreira<sup>2</sup>.

A tecnoloxía OoC representa unha innovación significativa respecto aos métodos tradicionais, xa que a súa capacidade para recrear microambientes dinámicos permite unha comprensión máis precisa e detallada das respostas celulares fronte á exposición a NPs. Este estudo pretende contribuír a clarificar os posibles riscos toxicolóxicos asociados á inxestión de NPs por parte dos seres humanos.

## Referencias

[1] A. Nel, T. Xia, L. Mädler, and N. Li, *Science*, **2006**, no. 5761, 311, 622–627.

[2] S. N. Bhatia and D. E. Ingber, *Nat. Biotechnol.*, **2014**, 32, 760–772.

## Comunicación -C9

### C9- Determinación de proteínas circulantes con carácter predictivo no cancro de mama HER2+.

**N. Vigo-Díaz<sup>1</sup>, M. Rodríguez-Padrón<sup>1</sup>, L. Rodríguez-Silva<sup>1</sup>, A.M. Luzardo-Álvarez<sup>2</sup>, M. Maneiro-Maneiro<sup>1</sup>, C. Núñez<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Ciencias, Campus Terra, Universidade de Santiago de Compostela, 27002 Lugo, España. [noelia.vigo@usc.gal](mailto:noelia.vigo@usc.gal)

<sup>2</sup> Departamento de Farmacoloxía, Farmacia e Tecnoloxía Farmacéutica, Facultade de Ciencias, Universidade de Santiago de Compostela, 27002 Lugo, España

**Palabras chave:** química da saúde; cancro de mama; proteómica.

A pesar do emprego cada vez máis estendido da terapia neoadxuvante (NAT) en pacientes con cancro de mama (CM) HER2-positivo, continúa sen resolverse o reto clínico de predicir a resposta individual ao tratamento, sendo esencial evitar a administración de réximes terapéuticos que non resulten eficaces [1]. Neste contexto, os biomarcadores séricos están a adquirir un protagonismo crecente polo seu potencial para anticipar a resposta terapéutica e contribuír ao desenvolvemento de estratexias personalizadas [2].

O obxectivo deste estudo é identificar proteínas circulantes que actúen como biomarcadores predictivos da resposta á NAT en pacientes con CM HER2-positivo. Para iso, desenvolveuse unha análise proteómica cualitativa e cuantitativa a gran escala en mostras séricas de pacientes respondedoras e non respondedoras.

As mostras de soro de todas as pacientes con CM foron recollidas antes de iniciar a NAT e procesadas mediante tres aproximacións diferentes, tanto en presenza como en ausencia de nanopartículas (ver Figura 1).

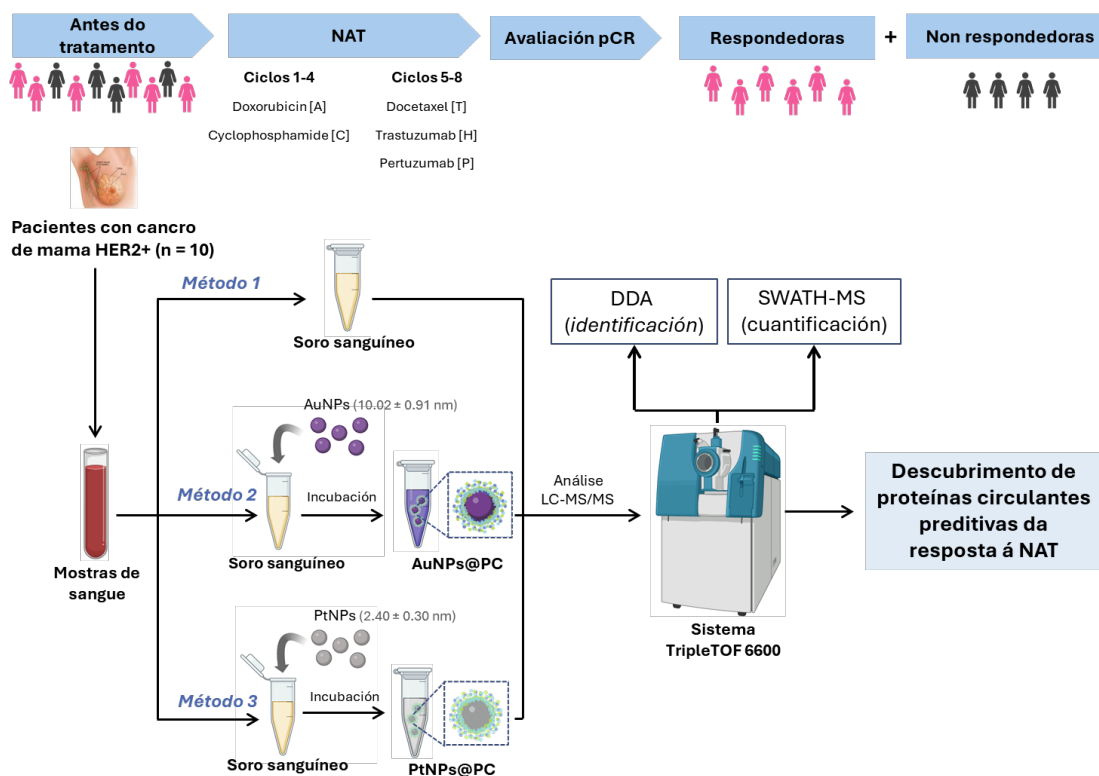


Figura 1. Esquema do procedemento experimental.

Os resultados cualitativos amosaron perfís proteómicos claramente diferenciados entre as pacientes respondedoras e non respondedoras, especialmente en proteínas implicadas nas cascadas do complemento e da coagulación, así como en diversas apolipoproteínas. Cómpre salientar a asociación de tres delas - afamina (AFM), alfa-1-antitripsina (SERPINA1) e apolipoproteína D (APOD) - coa resistencia ao tratamento neoadxuvante.

En conxunto, estes achados evidencian que os perfís de biomarcadores séricos permiten distinguir entre pacientes respondedoras e non respondedoras. Se se validan en estudos adicionais, poderían converterse nunha ferramenta clínica de gran utilidade para optimizar e personalizar os réximes terapéuticos no cancro de mama HER2-positivo no contexto neoadxuvante.

**Agradecementos:** Esta investigación foi financiada polo Instituto de Saúde Carlos III (ISCIII) mediante a axuda PI22/00025 e tamén polo Ministerio de Ciencia, Innovación e Universidades a través do programa de “Consolidación Investigadora 2024” (CNS2024-154855).

## Referencias

[1] F.J. Esteva, E. Katz, *JCO Oncol Pract*, **2024**, *20*,1046-1054.

[2] M. García-Vence, M.P. Chantada-Vázquez, S. Vázquez-Estévez, J.M. Cameselle-Teijeiro, S.B. Bravo, C. Núñez, *Clin Chim Acta*, **2020**, *501*, 102-111.

## Comunicación -C10

### C10- Química sintética promovida polo potencial redox bacteriano.

**D. Montoto Pintos,<sup>1,2</sup> J.F. Salgado Barca,<sup>1,2</sup> C. Mayer Mayer,<sup>1</sup> M. Tomás Gamasa,<sup>1,2</sup>  
J.L. Mascareñas Cid<sup>1,2</sup>**

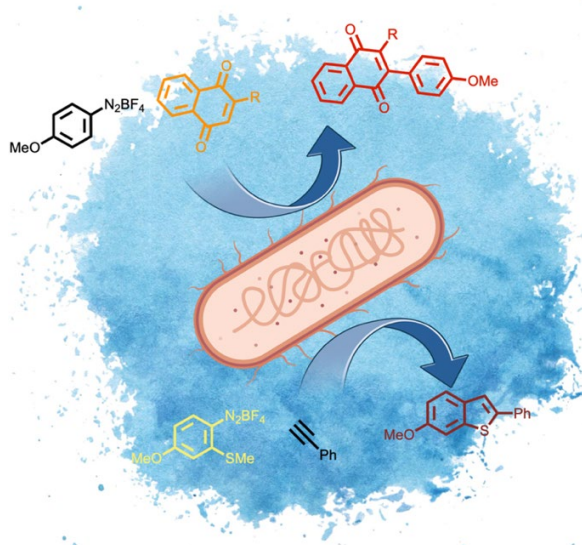
<sup>1</sup> Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS), Universidade de Santiago de Compostela, r/Jenaro de la Fuente, 15782. david.montoto.pintos@usc.gal

<sup>2</sup> Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela

**Palabras chave:** química orgánica; química biolóxica; microbioloxía

O desenvolvemento de reaccións sintéticas non naturais que interaccionan co metabolismo de organismos vivos é un campo emerxente na fronteira entre a química e a bioloxía. Estas reaccións poderían proporcionar novas rutas sintéticas sostibles para a produción de moléculas de interese, e presentar potenciais aplicacións en biomedicina e bioloxía. Recentemente, tense demostrado que é posible empregar o potencial redox intrínseco dos sistemas vivos para promover reaccións de polimerización radicalarias [1,2].

Neste traballo, demostrábase que o metabolismo redox de bacterias vivas pode promover reaccións radicalarias artificiais de formación de enlaces carbono-carbono para a síntese de moléculas de pequeno tamaño. En concreto, a bacteria electroxénica *Shewanella oneidensis* MR-1 e a bacteria modelo *Escherichia coli* son capaces de promover a arilación de Meerwein de naftoquinonas mediante a redución de sales de arildiazonio. Esta estratexia sintética empregouse tamén para a síntese de benzotiofenos, o que abre a porta a estruturas de interese farmacolóxico.



**Agradecementos:** Este traballo recibiu apoio económico de axudas españolas (SAF2016-76689-R, rede ORFEO-CINQA CTQ2016-81797-REDC), a Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria da Xunta de Galicia (2015-CP082, ED431C-2017/19 e acreditación como Centro Singular de Investigación de Galicia 2016-2019, ED431G/09), a Unión Europea (Fondo Europeo de Desenvolvemento Rexional correspondente ó Marco Financeiro Plurianual 2014-2020) e o Consello Europeo de Investigación (Advanced Grant No. 340055). D.M.P. agradece ó CiQUS, a Universidade de Santiago de Compostela e a Xunta de Galicia un contrato de iniciación á investigación. Ilustracións feitas con BioRender.

## Referencias

- [1] S. Wallace, E.P. Balskus, *Current Opinion in Biotechnology* **2014**, *30*, 1-8.
- [2] J.C. Sadler, J.A. Dennis, N.W. Johnson, S. Wallace. *RSC Chemical Biology* **2021**, *2*, 1073-1083.

## Comunicación -C11

### C11- Anelación Oxidante [5+2] Catalizada por Paladio de N-Fenil-2-Aminopiridinas con Alquinos: Acceso Sinxelo a Farmacóforos 1-Benzazepínicos.

**A. Suárez-Lustres, J. A. Varela\*, C. Saá\***

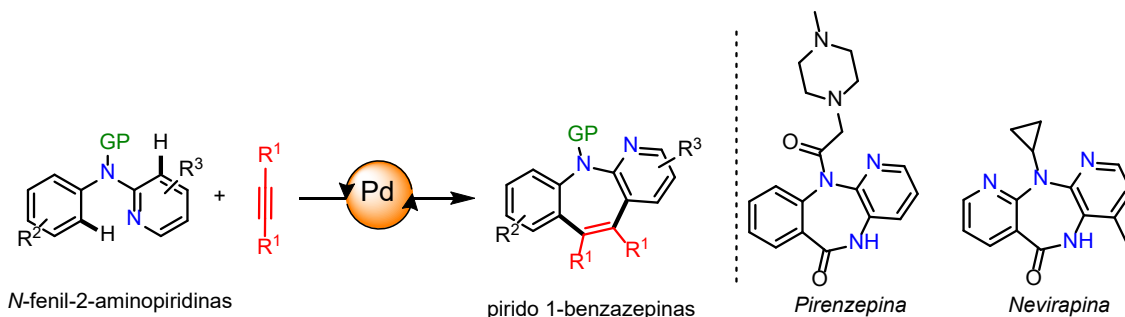
Centro Singular de Investigación en Química Biolóxica e Materiais Moleculares (CiQUS) e Departamento de Química Orgánica, Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela (Spain), [alejandrosuarez.lustres@usc.gal](mailto:alejandrosuarez.lustres@usc.gal)

**Palabras chave** (anelación, catálise organometálica, química orgánica)

Os aneis nitroxenados de sete membros fusionados a aneis bencénicos (benzazepinas) e máis particularmente os análogos tricíclicos fusionados a un terceiro anel piridínico destacan polas súas actividades farmacolóxicas e bioactivas.<sup>[1]</sup> Algúns exemplos coma a *Pirenzepina* ou a *Nevirapina* son empregados coma antagonistas muscarínicos ou retrovirais.<sup>[2]</sup>

En todos os ámbitos da síntese química cada vez toma unha maior importancia a realización de procesos sostibles (*Principles of Green Chemistry*)<sup>[3]</sup> empregando substancias de partida máis sinxelas. Baséanse na funcionalización de enlaces C-H promovida por metais, unha estratexia sintética versátil e sustentable que minimiza a xeración de residuos perigosos. Neste eido o noso grupo contribuíu con avances significativos á síntese de aneis nitroxenados de sete membros empregando dienos, alenos ou alquinos.<sup>[4]</sup>

Neste proxecto presentamos unha nova metodoloxía de anelación [5+2] a través dunha dobre activación Csp<sup>2</sup>-H en aneis de fenilo e piridina para a síntese de pirido 1-benzazepinas que aborda limitacións non resoltas na literatura, demostrando unha versatilidade que contrasta coa escasa variedade reportada ata o momento. A presenza do grupo protector (GP) demostrou ser clave para a quimioselectividade da reacción, modulando a coordinación e reactividade do centro metálico, evitando a formación de indois ou carbazois,<sup>[5]</sup> comunmente observados para o núcleo de N-fenil-2-aminopiridina.



**Agradecementos:** Esta investigación foi financiada por MICIU (proxectos PID2023-151279NB-I00 e ORFEO-CINQA network RED2022- 134287-T), a Xunta de Galicia (proxecto ED431C 2022/27 e Centro Singular de Investigación de Galicia acreditación 2023–2027, ED431G 2023/03) e Unión Europea (European Regional Development Fund – ERDF). Tamén agradecemos a CESGA (Xunta de Galicia) polo tempo de computación. A.S.-L agradece á Xunta de Galicia pola Axuda Predoutoral da Xunta de Galicia (ED481A-2023-137).

**Referencias:**

- [1] Vitaku, E.; Smith, D. T.; Njardarson, J. T. J. *Med. Chem.* **2014**, *57*, 10257–10274
- [2] (a) Hammer, R., Berrie, C. P., Birdsall, N. J. M., Burgen, A. S. V. & Hulme, E. C. *Nature* **1980**, *283*, 90–92 (b) Grozinger, K. G.; Fuchs, V.; Hargrave, K.D.; Mauldin, S.; Vitous, J.; Campbell, S.; Adams, J. J. *Heterocyclic Chem.* **1995**, *32*, 259-263
- [3] Tang, S. L. Y.; Smith, R. L.; Poliakoff, M. *Green Chem.*, **2005**, *7*, 761–762
- [4] (a) Velasco-Rubio, Á.; Varela, J. A.; Saá, C. *Org. Lett.* **2020**, *22*, 3591–3595 (b) Velasco-Rubio, Á.; Bernárdez, R.; Varela, J. A.; Saá, C. *J. Org. Chem.* **2021**, *86*, 10889-10902. (c) Suárez-Lustres, A.; Martínez-Yáñez, N.; Velasco-Rubio, Á.; Varela, J. A.; Saá, C. *Org. Lett.* **2023**, *25*, 5, 794–799
- [5] Chen, J.; Song, G.; Pan, C-L.; Li, X. *Org. Lett.* **2010**, *12*, 23, 5426–5429

## Comunicación -C12

### C12- Optimización dunha reacción de redución abiótica do nitrato mediante óxidos de Fe e ácidos orgánicos para a súa aplicación en condicións naturais.

**I. Beceiro-Cillero<sup>1</sup>; J. Antelo<sup>1</sup>; S. Fiol<sup>2</sup>; P. Vázquez<sup>3</sup>; X. L. Otero<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>CRETUS. Departamento De Edafoloxía e Química Agrícola, Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago de Compostela, España. [inaki.beceiro.cillero@usc.gal](mailto:inaki.beceiro.cillero@usc.gal)

<sup>2</sup>CRETUS. Departamento de Química Física, Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago de Compostela, España

<sup>3</sup>Departamento de Física Aplicada. Universidade de Santiago de Compostela, 15782, Santiago de Compostela, España

**Palabras chave:** Química Ambiental; Química Sostible; Eutrofización

O nitróxeno é un elemento limitante para o desenvolvemento vexetal nos sistemas naturais e explotacións agrícolas. Dende comezos do século XX o emprego de fertilizantes nitroxenados nas actividades agrícolas non parou de crecer. Paralelamente produciuse un incremento substancial da emisión de N cara á atmosfera e os vertidos de augas residuais nas masas de agua, coma consecuencia do crecemento poboacional. Todo iso levou ó incremento da dispoñibilidade de nitróxeno no medio natural, especialmente nos ecosistemas acuáticos, aumentando así o risco de eutrofización.

A eutrofización é na actualidade, xunto co cambio climático e a perda de biodiversidade, un dos principais problemas ambientais que esta a causar o colapso de moitos ecosistemas acuáticos a nivel global [1,2]. Os datos aportados por informes do Parlamento e Consello Europeo amosan un exceso global nos aportes de N, excedendo perigosamente os límites planetarios considerados seguros [1]. Ademais, diferentes estudos amosan que un 50% dos lagos de Europa, América e Asia se atopan en estado ou en risco de eutrofización [3], sendo una tendencia con perspectivas de agravamento no futuro. A pesar da importancia da contaminación por nitróxeno, as técnicas enfocadas a remediala ou detela son altamente ineficientes e/ou presentan grandes problemas ambientais, sendo dominantes na actualidade aquelas centradas na redución ou detención en orixe dos fluxos de nutrientes cara os medios naturais.

As tentativas de redución das entradas de nitróxeno cara ó medio amosan unha baixa efectividade debido a la importancia que teñen os compostos nitroxenados en la sociedade actual, sendo necesaria a procura de alternativas efectivas e respectuosas co medio ambiente. No noso grupo de investigación atopamos unha posible solución nos procesos naturais que controlan a dispoñibilidade del nitróxenos nos medios naturais, especialmente aqueles que operan nos sistemas sedimentarios e edáficos. Neste traballo recorreremos ó emprego dunha reacción de redución abiótica con ferro e materia orgánica que interoperan nun proceso coñecido coma Roda Ferrosa que acontece naturalmente en solos [4]. No desenvolvemento desta investigación empregáronse dous óxidos de Fe(III) (goetita e ferrihidrita), e sete compostos orgánicos (4 ácidos orgánicos, 2 azucres e 1 alcohol), para comprobar o seu efecto sobre a redución do nitrato, tanto en presenza como en ausencia de Fe(II) en forma iónica. Tras isto comprobouse o efecto do pH, a forza iónica, e a presenza de ións comúns no medio natural para observar o seu efecto. Os resultados obtidos amosaron que o sistema FeO(OH)/R-COOH presenta unha alta eficiencia na redución do nitrato, así coma unha alta resistencia ós cambios de pH, composición e concentración iónica do medio, sinalándoo como una alternativa prometedora e respectuosa co medio ambiente ás técnicas de control e remediación da eutrofización empregadas até este momento.

**Agradecementos:** Este traballo foi financiado pola Axencia Estatal de Innovación a través do proxecto EUTROSTOP (TED2021- 131737B-I00), pola Consellería de Educación e Ordenación Universitaria da Xunta de Galicia (Consolidación e Estructuración de Unidades de Investigación Competitivas; GI-1245, ED431C 2022/40) e polo Ministerio de Ciencia, Innovación e Universidades (Ayudas de Formación del Profesorado Universitario (FPU); FPU23/02836) do Goberno de España.

## Referencias

- [1] W. Steffen, K. Richardson, et al., *Science*, **2015**, *347*, 1259855.
- [2] J. Richardson, W. Steffen, W. Lucht, J. Bendtsen, S.E. Cornell, et.al., *Science Advances*, **2023**, *9*, 37
- [3] R.B. Colin, E. Robert, et al., *Journal of Experimental Marine Biology and Ecology*, **2007**, *344*, 206–214.
- [4] F. Matus, S. Stock, et al., *Geochimica et Cosmochimica Acta*, **2019**, *245*, 514-524.

## Comunicación -C13

### C13- Cando o metal decide: cobre e cobalto na regulación dos radicais biolóxicos.

**María Rodríguez-Padrón<sup>1</sup>, Cristina Núñez<sup>1</sup>, Marcelino Maneiro<sup>1</sup>, Noelia Vigo-Díaz<sup>1</sup>  
Laura Rodríguez-Silva<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Departamento de Química Inorgánica, Facultade de Ciencias, Universidade de Santiago de Compostela, Lugo 27002, España

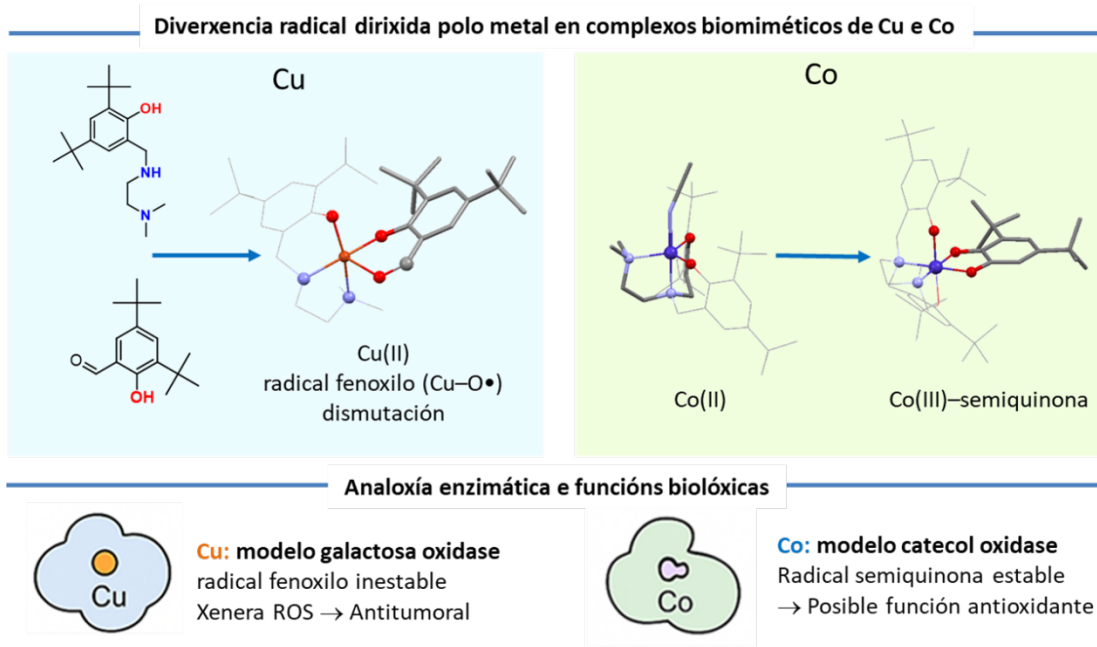
**Palabras chave:** Química inorgánica; biomimese redox; radicais metálicos

Na natureza, moitos procesos vitais, como a respiración celular ou a degradación de compostos orgánicos, dependen de reaccións nas que participan radicais, especies químicas extremadamente reactivas que conteñen electróns desapareados. A súa formación e control son esenciais: se son demasiado reactivas poden danar as células, mais en equilibrio permiten reaccións clave para a vida.

Nesta comunicación móstrase como dous metais veciños na táboa periódica, o cobre e o cobalto, poden dirixir de xeito moi diferente o comportamento destes radicais cando están presentes nun mesmo tipo de molécula.

Empregando un ligando orgánico común (bis-aminobisfenolato), xeramos complexos metálicos que imitan o contorno activo de encimas oxidases, como a galactosa oxidase ou a catecol oxidase. A través de técnicas electroquímicas e espectroscópicas observamos unha diverxencia fascinante:

- Co cobre (Cu), o radical fórmase sobre o osíxeno do ligando (tipo fenoxilo) e descomponse rapidamente, liberando produtos oxidados como aldehidos.
- Co cobalto (Co), o radical estabilízase sobre a molécula orgánica (tipo semiquinona) e permanece en disolución sen degradarse.



**Figura 1.** Representación esquemática da diverxencia radicalaria: (a) formación e descomposición do radical fenoxilo Cu-O•; (b) estabilización da semiquinona centrada no ligando no complexo de Co(III)

Esta diferenza débese á “personalidade” electrónica de cada metal: o cobre favorece unha cooperación metal–ligando máis activa, pero menos estable, mentres que o cobalto impón unha maior rixidez redox que outorga maior lonxevidade ao radical [1,2].

Comprender como os metais modulan a reactividade radicalaria axúdanos a deseñar novos catalizadores bioinspirados, máis sostibles e selectivos, para transformar moléculas orgánicas ou eliminar contaminantes. Ademais, permite entender mellor como a natureza emprega distintos metais para controlar reaccións tan delicadas como a oxidación biolóxica.

**Agradecementos:** Esta investigación foi apoiada pola Consellería de Cultura, Educación e Ordenación Universitaria, Xunta de Galicia (ED431C 2023/02), e o Ministerio de Ciencia e Innovación (MCIN), Project PID2021-127531NB-I00 (AEI/10.13039/501100011033/FEDER, UE).

#### References

[1] Y. Shimazaki, S. Huth, A. Odani, O. Yamauchi, *Angew. Chem.*, 112 (2000) 1732.

[2] M. A. Halcrow, *Coord. Chem. Rev.* **257** (2013) 2556–2591.

## Comunicación 14

### C14- Avaliación de métodos de entrega da tecnoloxía CRISPR/Cas9 en liñas celulares mariñas

**A. Seijas**<sup>1,2</sup>, **S. Veiga**<sup>2</sup>, **D. Cora**<sup>1</sup>, **M. A. González-Gómez**<sup>3</sup>, **M. Carballeda**<sup>2</sup>, **D. Polo**<sup>4</sup>, **A. Cuesta**<sup>5</sup>, **Y. Piñeiro**<sup>3</sup>, **J. Rivas**<sup>3</sup>, **M. Novo**<sup>1</sup>, **W. Al-Soufi**<sup>1</sup>, **P. Martínez**<sup>2</sup>,  
**D. Robledo**<sup>2,6</sup>, **L. Sánchez**<sup>2</sup> and **Á. J. Arana**<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química Física, Facultade de Ciencias, Campus Terra, Universidade de Santiago de Compostela, 27002 Lugo, Spain. e-mail: ana.seijas@rai.usc.es

<sup>2</sup>Departamento de Zooloxía, Xenética e Antropoloxía Física, Facultade de Veterinaria, Campus Terra, Universidade de Santiago de Compostela, 27002 Lugo, Spain.

<sup>3</sup>NANOMAG Laboratory, Department of Applied Physics, Materials Institute (iMATUS) and Health Research Institute (IDIS), Universidade de Santiago de Compostela, 15782 Santiago de Compostela, Spain

<sup>4</sup>NANOTOXGEN Research Group in Nanotoxicology and Genetic Toxicology, Universidade da Coruña, 15071 A Coruña, Spain

<sup>5</sup>Fish Innate Immune System Group, Department of Cell Biology, Faculty of Biology, University of Murcia, 30100 Murcia, Spain

<sup>6</sup>The Roslin Institute and Royal (Dick) School of Veterinary Studies, University of Edinburgh, Easter Bush Campus, UK

**Palabras chave:** biotecnoloxía; edición xenética; CRISPR/Cas9

A tecnoloxía CRISPR/Cas9 emerxeu como un sistema revolucionario de edición xenética. Esta tecnoloxía baséase na enzima Cas9, que é capaz de realizar cortes en rexións específicas do ADN coa colaboración dunha molécula de ARN guía [1]. Aínda que esta tecnoloxía resultou eficaz en múltiples tipos celulares e organismos, segue sendo clave a realización de investigacións para optimizar a súa entrada ao interior celular [2] e, neste contexto, estanse a desenvolver numerosas metodoloxías de transporte[3].

Este estudo compara tres metodoloxías de transporte para a tecnoloxía de edición xenética CRISPR/Cas9 (electroporación, nanopartículas lipídicas e nanopartículas magnéticas), en liñas celulares de robaliza e dourada. Así, avalíouse a eficiencia da edición xenética e a localización intracelular da Cas9 mediante diversas técnicas como a microscopía confocal [4]. Os resultados mostran diferenzas entre as distintas metodoloxías de entrega e tamén dependencia coas liñas celulares estudadas.

En resumo, a comunidade científica precisa estandarizar os métodos de transfección, e varias metodoloxías de entrega, como as nanopartículas lipídicas, están baixo estudo. Os nosos resultados abren novas vías para a optimización da edición xenética en especies de interese en acuicultura, establecendo así as bases para estudos posteriores tanto en novas liñas celulares como en organismos modelo.

**Agradecementos:** Financiado por Campus Terra, Universidade de Santiago de Compostela (2024-PU012), Fundación Caixa Rural Galega Tomás Notario Vacas (2024-PO026), Universidade de Santiago de Compostela (2025-PU018), Plan Español de Recuperación e Resiliencia, (liña nº 1, compoñente número 17, Complemento RTDI Plan de Ciencias Mariñas, Programa de Ciencias Mariñas de Galicia) e Unión Europea ERC Programa Starting Grant 2022 (Nº 101076432 (FishTRIM)). D.R. foi apoiado polo programa Oportunius da Axencia Galega de Innovación (GAIN, Xunta de Galicia) e polo BBSRC Institute Strategic Grants do Roslin Institute (BBS/E/20002172, BBS/E/D/30002275, BBS/E/D/10002070 e BBS/E/RL/230002A).

#### Referencias

- [1] M. Jinek, K. Chylinski, I. Fonfara, M. Hauer, J. A. Doudna, E. Charpentier, "A programmable dual-RNA-guided DNA endonuclease in adaptive bacterial immunity" *Science* **2012**, 337, 816–821.
- [2] K. Paunovska, D. Loughrey, J. E. Dahlman, "Drug delivery systems for RNA therapeutics" *Nat Rev Genet* **2022**, 23, 265–280.
- [3] A. Seijas, D. Cora, M. Novo, W. Al-Soufi, L. Sánchez, Á. J. Arana, "CRISPR/Cas9 Delivery Systems to Enhance Gene Editing Efficiency" *International Journal of Molecular Sciences* **2025**, 26, 4420.
- [4] Á. J. Arana, S. Veiga-Rua, D. Cora, M. A. González-Gómez, A. Seijas, M. Carballeda, D. Polo, A. Cuesta, Y. Piñeiro,

**V Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da Química (XINQ\_5)**  
**Santiago de Compostela, 19-20 de novembro de 2025**

J. Rivas, M. Novo, W. Al-Soufi, P. Martínez, L. Sánchez, D. Robledo, "Comparative Analysis of CRISPR/Cas9 Delivery Methods in Marine Teleost Cell Lines" *International Journal of Molecular Sciences* **2025**, *26*, 10703.

## **BASES, ACTAS e PREMIADOS**

## **Bases dos premios das IV Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da Química (XINQ\_5)**

Na V Xuntanza de Investigador@s Nov@s no ámbito da Química (XINQ\_5) entregaranse premios ás mellores comunicacións na opinión do público e do comité científico en cada unha das categorías presentes (Máster e Doutoramento). As persoas premiadas serán recoñecidas con cadanseu agasallo valorado aproximadamente en 150 €.

O premio do público concederáse mediante votación telemática secreta das persoas presentes nas sesións. En cada sesión (xa sexa doutoramento ou máster) elixirase un gañador ou gañadora (quen reciba máis votos) que se clasificará para a final en cada unha das categorías.

No caso de producirse un empate na sesión, clasificaranse conxuntamente para a devandita final as persoas cun maior número de votos.

Unha vez finalizadas todas as sesións, elixirase o gañador de cada categoría mediante votación telemática anónima. No caso de producirse un empate a votos entre as persoas finalistas, procederáse a outra votación ata conseguir unha única persoa gañadora por categoría.

O premio do xurado será decidido polo comité científico nunha reunión secreta tras a adxudicación do premio do público. O comité científico outorgará un premio por cada unha das categorías (doutoramento ou máster) mediante deliberación entre os seus membros.

### **Acta do premio do público**

Tras a selección en cada unha das sesións, mediante votación popular, anónima e telemática, das mellores exposicións, procedeuse, do mesmo xeito, á votación final entre os candidatos seleccionados en cada categoría, outorgándose os seguintes premios do público:

#### **Premio da categoría Máster**

**Sara Trigo Pérez** coa comunicación “*Deseño molecular de estruturas orgánicas covalentes baseadas en radicaís para aplicacións de almacenamento de enerxía*”.

#### **Premio da categoría Doutoramento.**

**Sheila González Barcia** coa comunicación “*Determinación de metais en material particulado atmosférico*”.

### **Acta do premio do xurado**

O comité científico da IV Xuntanza de investigador@s nov@s no ámbito da Química, actuando como xurado, reunido o día 20 de novembro do 2025 e tralas oportunas deliberacións, acordou outorgar os seguintes premios:

#### **Premio do xurado na categoría Máster**

**María RodríguezPadrón** coa comunicación “*Cando o metal decide: cobre e cobalto na regulación dos radicaibiolóxicos*”.

#### **Premio do xurado na categoría Doutoramento.**

**Noelia Vigo Díaz** coa comunicación “*Determinación de proteínas circulantes con carácter predictivo no cancro de mama HER2+*”.