

Puede concluirse que el AF y el CH son miscibles, sin separación de fases y la topografía de los sistemas mixtos está determinada por el polisacárido. Se ha reportado que se forman conjugados estables y con mayor capacidad de carga con el incremento en el peso molecular del CH. Por lo tanto, el CH argentino sería muy apropiado para encapsular al AF, constituyendo bionanofilms.

061 - XANES study of Sulfur oxidation by Ag₅ atomic quantum clusters in Cysteine and Glutathione

J. M. Devida^{1*}, **L. J. Giovanetti**¹, **D. Buceta**², **M. A. López-Quintela**², **F. G. Requejo**¹

¹ Instituto de Investigaciones Fisicoquímicas Teóricas y Aplicadas, INIFTA - CONICET, La Plata, Argentina

² Department of Physical Chemistry, Fac. Chemistry and Nanomag Laboratory, IIT. University of Santiago de Compostela, E-15782 Santiago de Compostela, Spain

* jmdevida@gmail.com

A large group of proteins and oligopeptides has been reported as essentials for their role in the redox homeostasis regulation. This regulation involves several catalytic processes that includes the oxidation, and their reduction back, of Cysteine residues (Cys-SH), which are susceptible to oxidation at physiological Ph¹. In addition, it has been reported the capacity of Atomic Quantum Clusters (AQC) as oxidation catalysts². In this work, we have studied the oxidative capacity of Ag AQC on Cysteine and Glutathione as a first approach in elucidating the oxidant effect in molecules with biological interest. For this purpose, the sulfur species both before and after catalytic reaction, were characterized by S-K edge XANES spectroscopy.

Ag L₃ (3351 eV) and S K-edge (2470 eV) XANES experiments were performed at de SXS beamline at the *Laboratório Nacional de Luz Síncrotron* (LNLS, Campinas, Brazil). For Cysteine and Glutathione characterization, a fraction of solution were deposited by drop casting on carbon disks (Ted Pella, Inc[®]) in order to have a Sulfur concentration in a detectable value. Phosphate buffered saline (PBS) solution was used as solvent in all the reaction mixes, with the purpose maintain a pH value according to a physiological environmental.

We observed that sulfur present in Cysteine and Glutathione is deeply oxidized on AQC presence, from -2 to +6. However, decreasing the AQC concentration between three and six times, a lower oxidation reaction also take place for cysteine. Disulfide species (S⁻¹), with external groups corresponding to n-butyl, n-propyl or methyl-disulfide species can be also identified by XANES, which are originated on the formation of sulfur dimers between the lineal cysteine molecules. This effect is not clearly observed for glutathione, due to this conformational structure and S-atoms localization, preventing the S-S dimers formation at the concentrations tried. Finally, it can be shown the ability of X-ray absorption near edge structure spectroscopy on the studied molecules, allowing to characterize faithfully the chemical changes allowing the knowledge of possible reaction mechanisms.

Referencias:

1. Thomas, J., Poland, B., Honzatko, R. Arch Biochem Biophys. 1995;319(1):1-9
2. Corma, A.; Concepción, P.; Boronat, M.; Sabater, M. J.; Navas, J.; Yacamán, M. J.; Larios, E.; Posadas, A.; López-Quintela, M. A.; Buceta, D.; et al. Nat. Chem. 2013, 5, 775–781

062 - Crecimiento de cristales en presencia de impurezas de diferente forma y tamaño

López Ortiz J. I.^{1,2}, **Quiroga E.**^{1,3}, **Narambuena C. F.**¹ y **Ramirez-Pastor A. J.**^{1,4},

¹ Instituto de Física Aplicada, CONICET-UNSL, Argentina

² Departamento de Matemática, Facultad de Ciencias Físicas, Matemáticas y Naturales - UNSL, Argentina

³ Laboratorio de Membranas y Biomateriales, Facultad de Química, Bioquímica y Farmacia - UNSL, Argentina

⁴ Departamento de Física, Facultad de Ciencias Físicas, Matemáticas y Naturales - UNSL, Argentina

*jnlopezortiz@gmail.com

En este trabajo nosotros presentamos un nuevo modelo cinético tendiente a describir el crecimiento de cristales a partir de una solución acuosa y en presencia de impurezas. Dicho modelo es desarrollado a partir de una generalización de la aproximación propuesta por Davey y Mullin ¹. El nuevo marco teórico combina (i) una expresión analítica para la velocidad de crecimiento del cristal, donde la misma disminuye linealmente al aumentar el cubrimiento (θ_{eq}) de impurezas adsorbidas, y (ii) una nueva ecuación de isoterma de adsorción (θ_{eq} como función de la concentración de impurezas C_I) en la que el adsorbato puede ocupar más de un sitio de adsorción (impureza estructurada). Este formalismo permite obtener una isoterma exacta de adsorción de impurezas lineales en una dimensión, y proporciona una buena aproximación para un sistema bidimensional de múltiple ocupación de sitios, incorporando así dos factores muy importantes (tamaño y forma) que determinan las características de inhibición del crecimiento del cristal por parte de una impureza. Los datos de la teoría fueron comparados con simulaciones de Monte Carlo. Además, los resultados teóricos fueron aplicados a datos experimentales de velocidades relativas de crecimiento de cristales de KBr en presencia de impurezas (ácidos carboxílicos alifáticos) de diferentes tamaños: HCOOH, CH₃COOH, C₂H₅COOH y C₃H₇COOH. Un buen acuerdo entre teoría, simulaciones y experimentos fue encontrado. El modelo teórico aquí propuesto es simple, con parámetros que tienen un significado físico preciso. Estos parámetros se pueden obtener a partir de experimentos termodinámicos y se relacionan directamente con la configuración espacial de las moléculas de impurezas en el estado adsorbido. En este sentido, es importante enfatizar la diferencia con la teoría de Kubota y Mullin ², donde la presencia de un parámetro empírico (factor de efectividad β) es necesaria para interpretar datos análogos a los analizados aquí.

Referencias:

1. Davey, R. J., Mullin, J. W. "Growth of the {100} faces of ammonium dihydrogen phosphate crystals in the presence of ionic species" *J. Cryst. Growth*, Vol. 26, No 1, 45-51, 1974.
2. Kubota, N., Mullin, J. W. "A kinetic model for crystal growth from aqueous solution in the presence of impurity" *J. Cryst. Growth*, Vol. 152, No 3, 203-208, 1995.

063 - Propiedades Interficiales de Membranas Lipídicas

I: Caracterización de los estados de hidratación de esteres y éteres lipídicos mediante sonda fluorescente.

H. A. Pérez^{1*}, A. S. Rosas¹, J. P. Cejas¹, M. A. Frías¹ y E. A. Disalvo¹

¹Laboratorio de Biointerfases y Sistemas Bioiméticos-CIBAAL-UNSE-CONICET, Argentina

*magnihap@hotmail.com

Las membranas celulares influyen en muchas funciones celulares y están involucradas en la mayoría de los procesos de comunicación celular^{1, 2}. Un parámetro biofísico importante a nivel molecular es el grado de ordenamiento de la membrana ya que determina la velocidad de movimiento de las moléculas, con una relación inversamente proporcional a la microviscosidad de la membrana. Esta propiedad está relacionada con las moléculas de agua en la interfase^{3, 4}. Los principales centros de hidratación son grupos carbonilos, grupos fosfatos. Asimismo se ha informado que el agua puede acumularse entre las cadenas hidrocarbonadas.

En este trabajo se estudió los grados de hidratación de vesículas multilamelares (MLV) compuestas por éster y éter lípidos mediante la sonda fluorescente LAURDAN a los efectos de determinar la influencia de cada uno de esos centros en las propiedades de hidratación de la membrana. Las estructuras químicas de estos lípidos difieren solo con respecto al tipo de enlace (éster carboxílico, éter) entre el glicerol y la cadena hidrofóbica unida al hidroxilo primario de glicerol.

Los resultados mostraron que los valores de GP_{ex} son menores para el éter en comparación al éster, indicando una mayor hidratación en la interfase de la membrana tanto por debajo como por arriba de la temperatura de transición (T_m). Por lo tanto, concluimos que las diferencias espectrales observadas para LAURDAN en lípidos de éter y éster podrían deberse a diferente relajación dipolar del entorno inmediato del