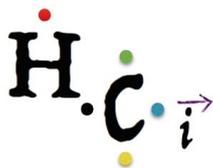
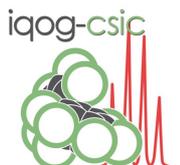


Química, toxicología y nanociencia

Bernardo Herradón García
IQOG-CSIC

CENIM-CSIC
26 de mayo de 2016



R.F.D.: 89718
I.G.M.: 188000

Público

Fecha: 23/05/2009
Sección: CIENCIA
Páginas: 32/33

Los 'nanotóxicos' colonizan los ríos españoles

Científicos del CSIC hallan «concentraciones considerables» de fullerenos, unas moléculas esféricas capaces de transportar sustancias peligrosas, en las aguas residuales de Catalunya

R.F.D.: 89718
I.G.M.: 188000

Público

Fecha: 23/05/2009
Sección: OPINIONES
Páginas: 33

«Los nanomateriales pueden ser una bomba de relojería»

Entrevista

Damià Barceló
Investigador del CSIC

M.A.
MADRID

El coordinador del estudio sobre la presencia de nanomateriales en los ríos es el científico Damià Barceló, del Instituto de Investigaciones Químicas y Ambientales de Barcelona (CSIC). En noviembre de 2007 recibió el premio Rey Jaime I en la modalidad de Protección del Medio Ambiente por sus 15 años dedicados al

estudio de la contaminación del agua. Su equipo ha detectado cocinas, dióxido y flúor en los ríos españoles, pero es la primera vez que se fija en los nanomateriales. ¿Cómo es posible que se desarrolle tanto la industria de los nanomateriales sin conocer sus efectos en el medio ambiente? En Europa, esta línea de investigación no se ha desarrollado porque no ha habido interés por parte de los poderes públicos. La investigación está en paños puros. Los primeros que han empezado a estudiar en este ámbito han sido los científicos de EURL. Llevan tres o cuatro años de ventaja sobre

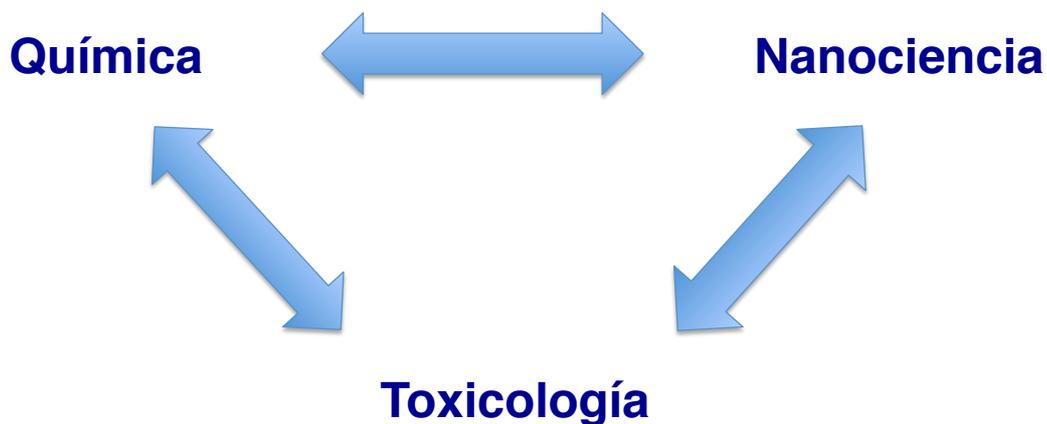


El químico Damià Barceló. Europa. En la Uemo se ha visto como un tema prioritario, quizá por la presión de los lobbies nanotecnológicos. La preocupación es del tipo industrial y no al medioambiental. ¿Cuáles pueden ser los efectos de estos compuestos en los ríos? Los nanomateriales, como los fullerenos, pueden establecer enlaces con las células y actuar como una bomba de relo-

jería. En cualquier momento podrían liberarse. La contaminación se hace más persistente y como los fullerenos son lipofílicos (capaces de disolverse en los grasas), pueden pasar fácilmente a la cadena alimentaria. Es difícil que pase al ser humano porque normalmente los peces de río no se consumen, pero es necesario estudiar su efecto en los ecosistemas sobre la fauna marina. ¿Qué le parece la actuación de las Administraciones europeas? No hay nada legislativo y no sabemos los efectos que pueden tener los nanomateriales, a pesar del desarrollo de la industria. Incluso los científicos se fabrican sus nanomateriales, para evitar el efecto. Y cuando se les avisa de que el medio ambiente puede estar afectado, ¿Y la del Gobierno español? En la Unión Europea quien tiene que llevar la iniciativa. Pero en España no legislan porque no existen datos.

Qué es un fullereno
Un fullereno es una molécula de carbono en forma de esfera o tubo. Está formado por átomos de carbono unidos entre sí por enlaces covalentes. Los fullerenos son moléculas esféricas que pueden transportar sustancias peligrosas.

Cómo llegan a los ríos
1. Los fullerenos pueden ser liberados por actividades industriales o agrícolas.
2. Los fullerenos pueden ser transportados por partículas de polvo o agua.
3. Los fullerenos pueden ser transportados por animales que beben agua de los ríos.



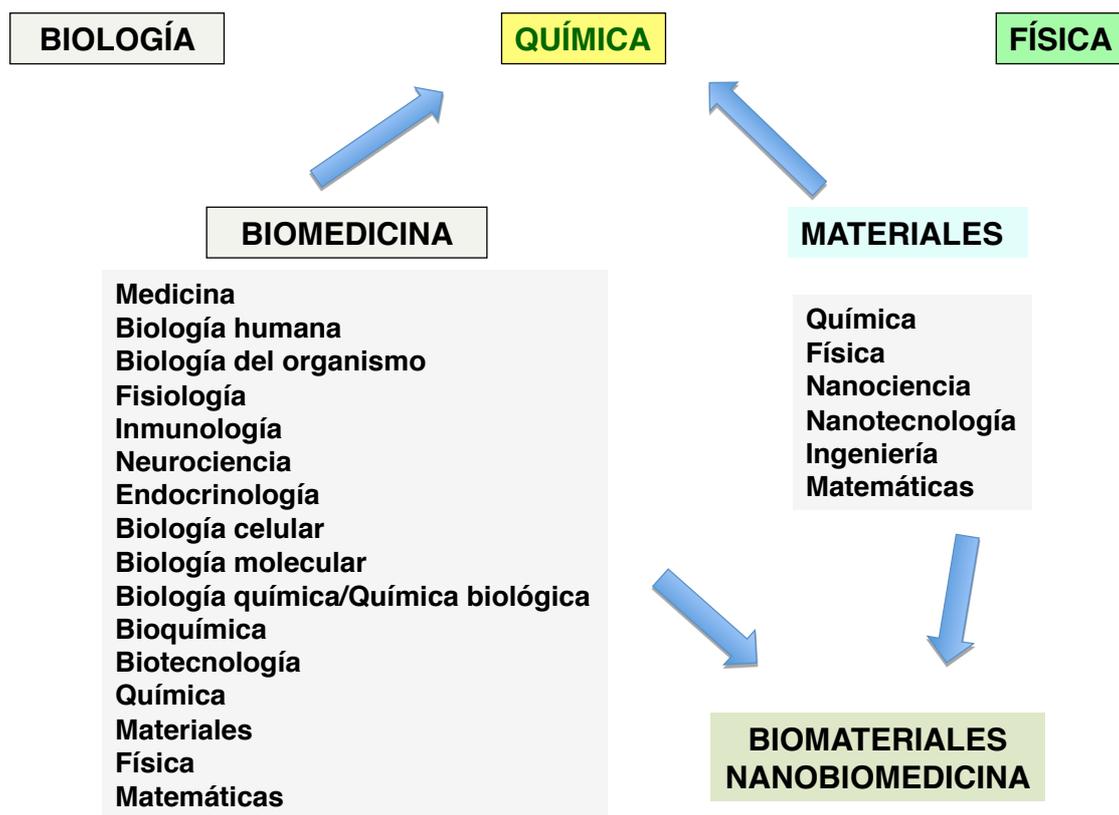
<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>

La ciencia del futuro: satisfacer las necesidades de la sociedad



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>

La ciencia actual (desde la perspectiva de la química)



Dependeremos de procesos y materiales
(formados por moléculas) adecuados

LA QUÍMICA Y LOS MATERIALES DEL "FUTURO": NANOCIENCIA Y NANOTECNOLOGÍA

Nanociencia y nanotecnología: física, química,
biología, matemáticas, ingeniería,...

La química y la nanociencia

La química es la ciencia que estudia la composición, estructura, propiedades y transformaciones de la materia, especialmente a nivel atómico y molecular.

La materia que conocemos está formada por partículas más pequeñas: moléculas, formadas por átomos, e iones.

Por lo tanto, la química es una parte esencial del desarrollo de la nanociencia y de la nanotecnología

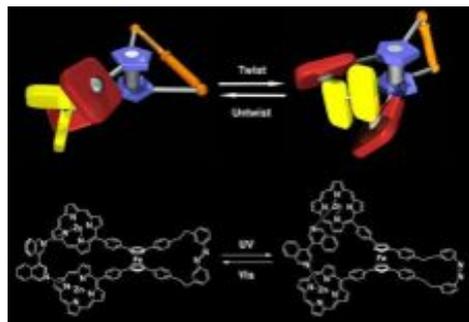
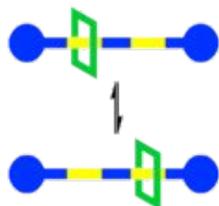
La nanociencia aborda la preparación y estudio de la materia de tamaño nanométrica ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$). La nanotecnología aborda las aplicaciones de las estructuras nanométricas.

**Aportaciones de la Química a la ciencia de los materiales.
El futuro ya está aquí.**

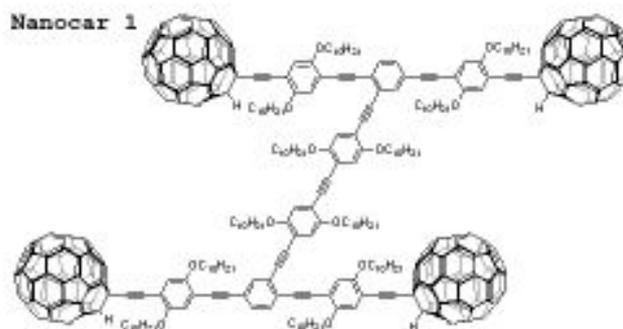
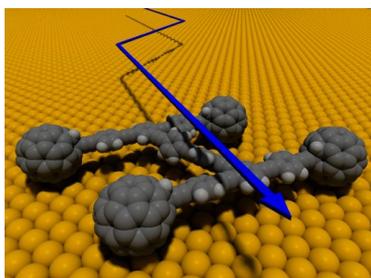
- Máquinas moleculares
- Nanociencia/nanotecnología
- Equipos pequeños para monitorización (ambiental, salud, etc.)
- Electrónica molecular
- Interruptores moleculares (en electrónica o en computación)
- Ordenadores moleculares
- Nanocápsulas para transporte de fármacos
- Biomateriales: inertes biológicamente o que se integren en el tejido (funcionales)
- Purificación y potabilización de agua

El futuro ya está aquí

Máquinas moleculares



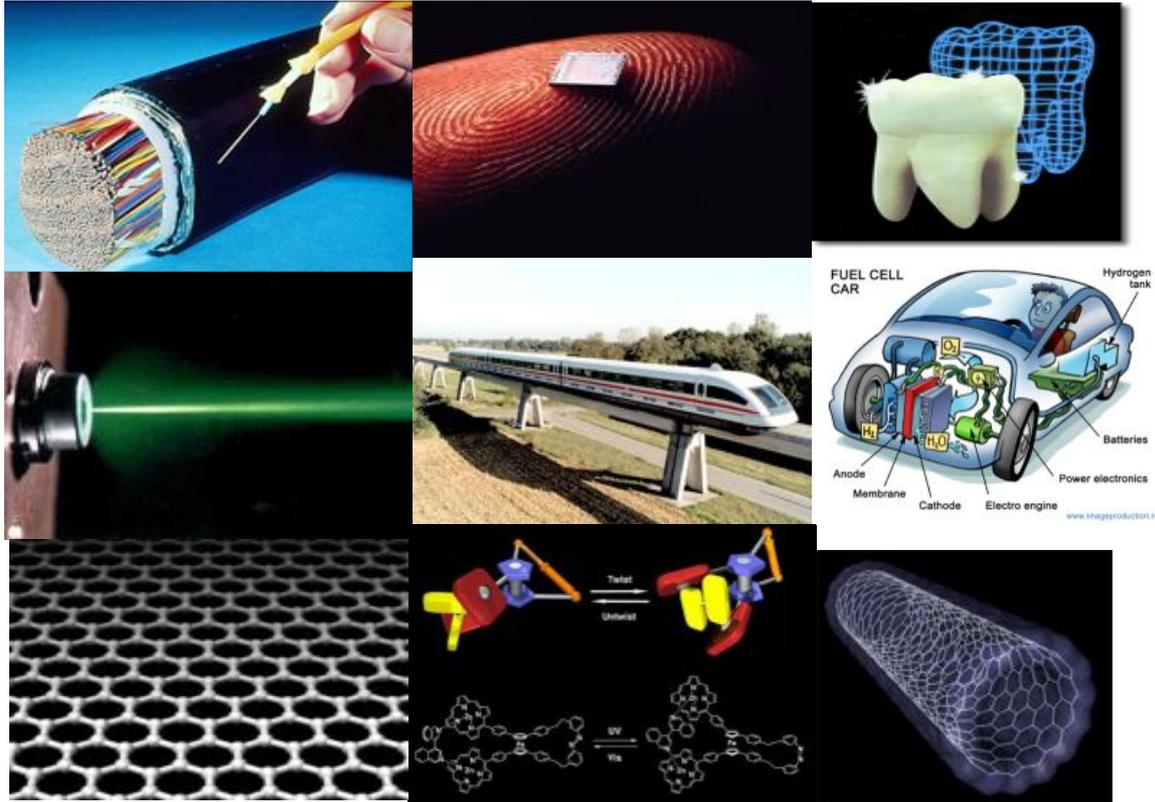
Nanociencia. Nanotecnología



Aportaciones de la Química a la ciencia de los materiales. El futuro ya está aquí.

- Cristales líquidos
 - Materiales con óptica no lineal
 - Diodos emisores de luz
 - Antenas de luz (conversión de energía lumínica en química, centros fotosintéticos artificiales)
 - Materiales quimioluminiscentes
 - Almacenamiento y transporte de hidrógeno
 - Almacenamiento de energía eléctrica
 - Producción eficiente de energía (con el menor impacto medioambiental)
 - Convertidores de energía (química/lumínica/eléctrica).
- y miles de aplicaciones más

Nuevos Materiales (s. XXI)



**Aportaciones de la Química a la ciencia de los materiales.
El futuro ya está aquí.**

Y todo esto, de manera eficaz:

Con el mínimo impacto ambiental

Con el mayor aprovechamiento energético

Lo más barato posible

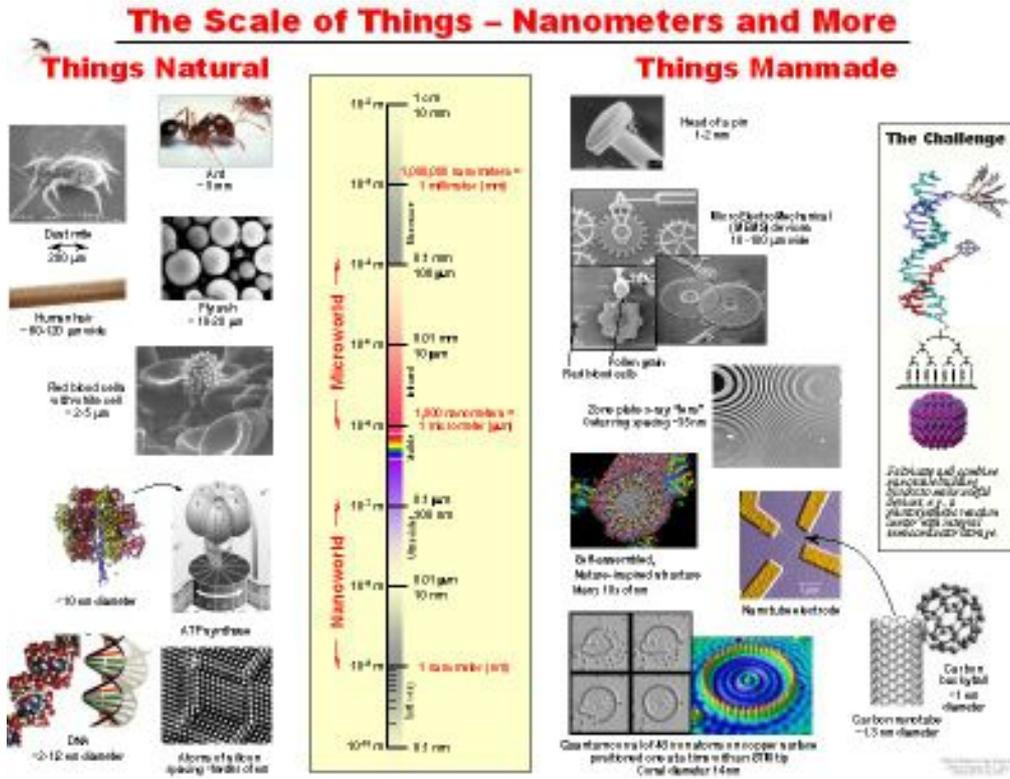
Química verde/Química sostenible



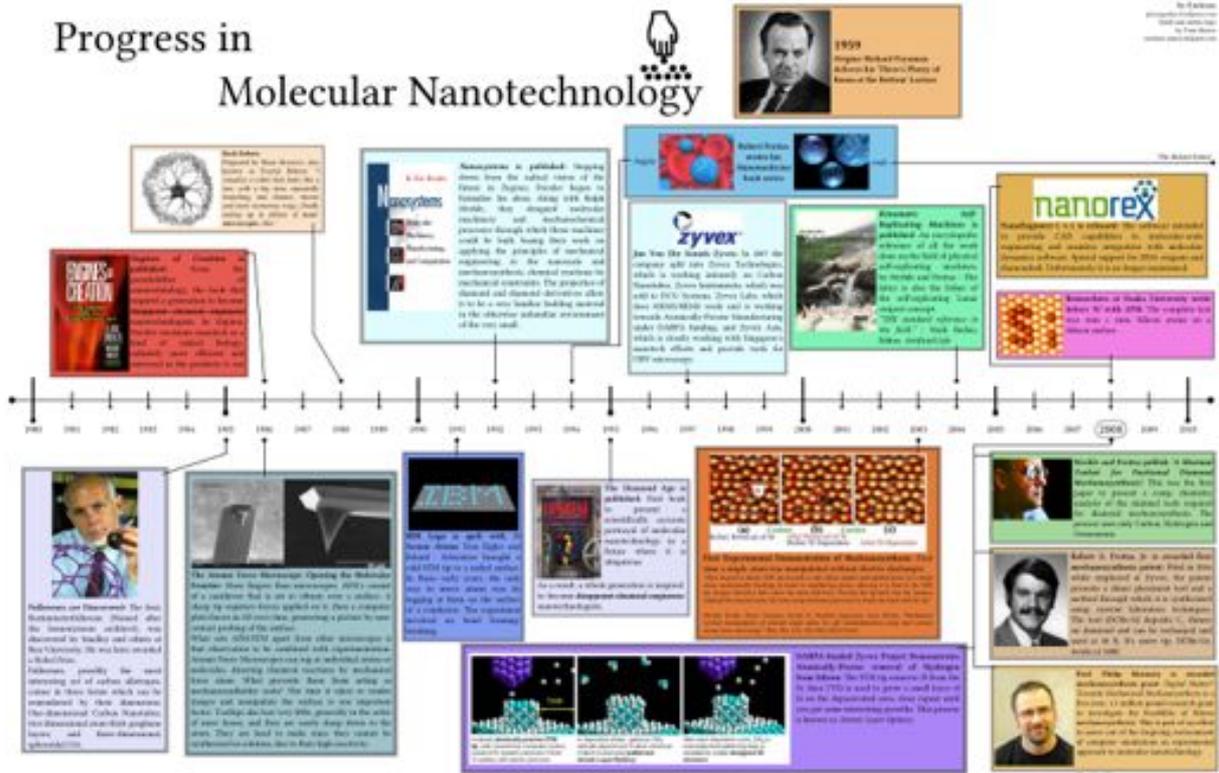
<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

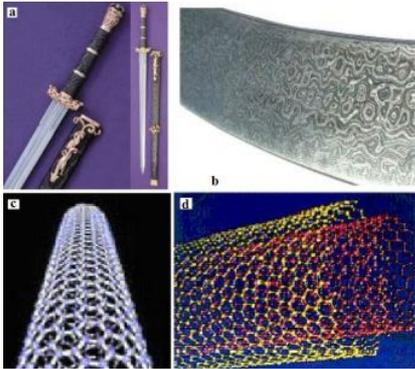
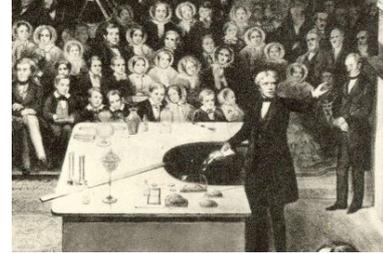
El futuro ya está aquí

Nanociencia. Nanotecnología



Progress in Molecular Nanotechnology





<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>

Nanociencia:

Manipulación de la materia a nivel atómico/molecular (química)

Efectos mecano-cuánticos

Alta relación área/volumen (masa)

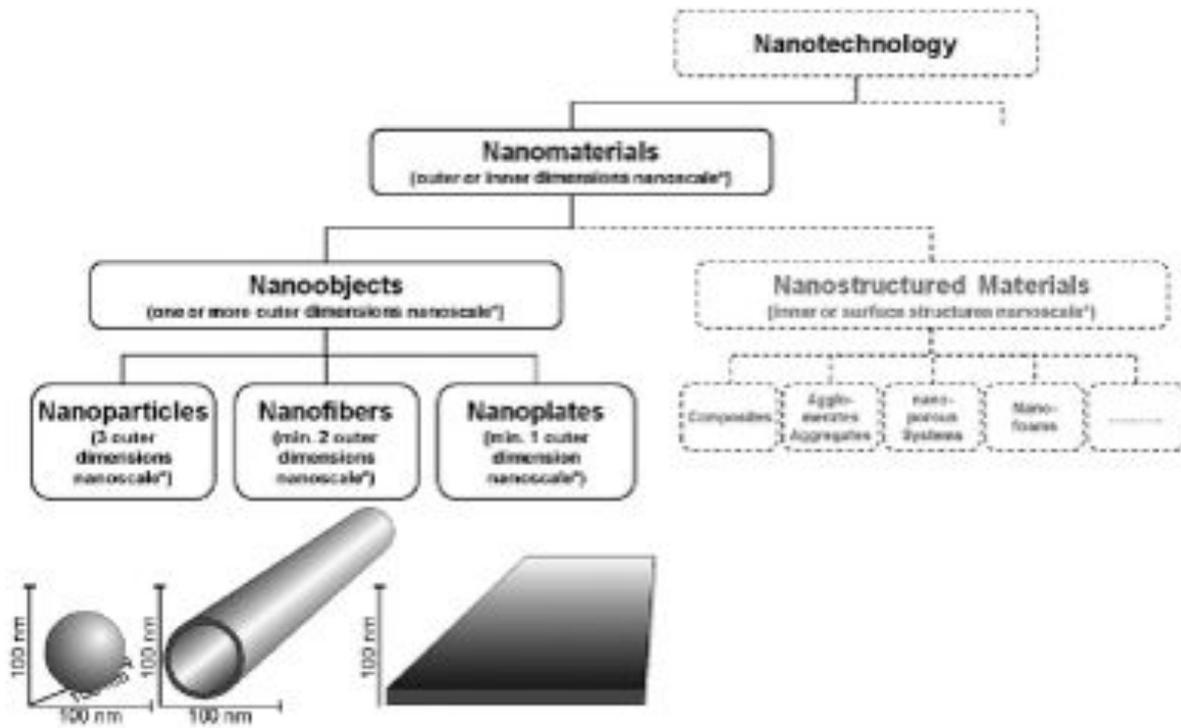
Técnicas instrumentales: microscopía [TEM (1931), SEM (1937), STM (1981), AFM (1986)]

Litografía molecular/nanolitografía

Desarrollo de láseres



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>



<http://www.losavancesdequimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

One nanometer (nm) – one billionth of a meter (10^{-9})

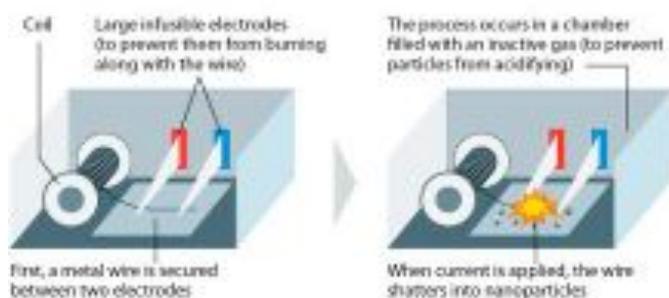
0.1-0.2 nm – diameter of most of atoms

0.1-100 nm – size of nano objects

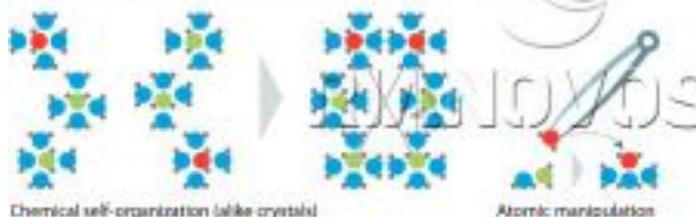
For comparison
The thickness of human hair is **80 000 nm**

Types of nanotechnologies:

Top-down approaches – nanoparts created by splitting larger substance

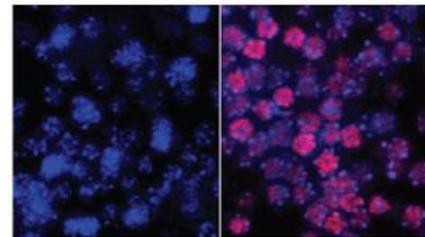


Bottom-up approaches – building materials from molecular components



<http://www.losavancesdequimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

			
Agriculture	Food Processing	Food Packaging	Supplements
<ul style="list-style-type: none"> • Single molecule detection to determine enzyme/substrate interactions • Nanocapsules for delivery of pesticides, fertilizers and other agrochemicals more efficiently • Delivery of growth hormones in a controlled fashion • Nanosensors for monitoring soil conditions and crop growth • Nanosacks for identity, preservation and tracking • Nanosensors for detection of animal and plant pathogens • Nanocapsules to deliver vaccines • Nanoparticles to deliver DNA to plants (targeted genetic engineering) 	<ul style="list-style-type: none"> • Nanocapsules to improve bioavailability of nutraceuticals in standard ingredients such as cooking oils • Nanocapsulated flavor enhancers • Nanotubes and nanoparticles as gelation and viscosity agents • Nanocapsule in films of plant based starches to replace a meat's cholesterol • Nanoparticles to selectively bind and remove chemicals or pathogens from food • Nanosensors and -particles for better availability and dispersion of nutrients 	<ul style="list-style-type: none"> • Antibodies attached to fluorescent nanoparticles to detect chemicals or foodborne pathogens • Biodegradable nanosensors for temperature, moisture and time monitoring • Nanoclay and nanofibers as barrier materials to prevent spoilage and prevent oxygen absorption • Electrochemical nanosensors to detect ethylene • Antimicrobial and antifungal surface coatings with nanoparticles (silver, magnesium, zinc) • Lighter, stronger and more heat-resistant films with silicate nanoparticles • Modified permeation behavior of foods 	<ul style="list-style-type: none"> • Nanosize powders to increase absorption of nutrients • Cellulose nanocrystal composites as drug carrier • Nanocapsulation of nutraceuticals for better absorption, better stability or targeted delivery • Nanocrystals coated nanoparticles to deliver nutrients more efficiently to cells without affecting color or taste of food • Vitamin sprays dispersing active molecules into nanodroplets for better absorption



YANG DENG

A comparison of nanoparticle sunblock in protected (left) versus unprotected (right) mouse cells: Sun damage is represented in pink.

New nanoparticle sunblock is stronger and safer, scientists say



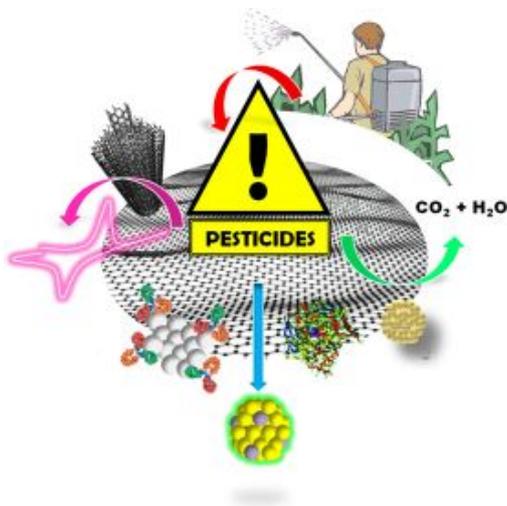
Nanotech Water Purifying Tea Bag

Millions of people around the world have limited access to drinking water – and diseases caused by contaminated water sources kill 1.8 million people each year. As both private and public entities continue to look for viable solutions to the problem, one promising development comes to us from South Africa, where researchers have used nanotechnology to create a water-purifying tea bag that costs just half a cent. In order to activate the tea bag, the user places it into the neck of a water bottle and then drinks water that passes through it. The design is portable and instantly effective. However, none of this would be possible without the help of nanotechnology – researchers have combined ultra-thin, nano-scale fibers with grains of activated carbon to filter harmful contaminants and kill bacteria.

Nanomaterials for Sensing and Destroying Pesticides

Gemma Aragay,[†] Flavio Pino,[†] and Arben Merkoçi^{†,‡}

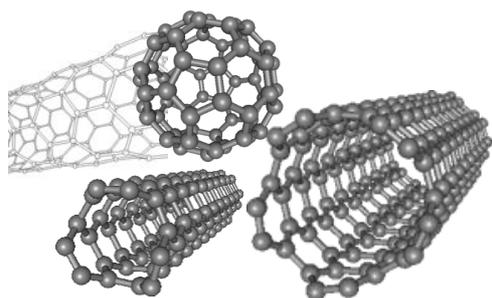
[†]Nanobioelectronics and Biosensors Group, Catalan Institute of Nanotechnology, UAB Campus, 08193 Bellaterra, Barcelona, Spain
[‡]ICREA, Barcelona, Spain



Chemical class	Code	Chemical formula	Commercial group	Human hazardous risk	Symptoms of exposure
Arsenic compounds	AS	AsO ₄ ³⁻	Fungicide Insecticide Herbicide	Ia, Ib	Stomachache, nausea, vomiting, and diarrhea
Bipyridylum derivatives	BP		Herbicide	II	Neurologic effects, irritation
Carbamates	C	(-OC(=O)NHCH ₃)	Acaricide Fungicide	Ia, Ib, II, U	Central nervous system effects
Coumarin derivatives	CO		Rodenticide	Ia, Ib	Internal hemorrhage
Copper compounds	CU	CuO, Cu ₂ S, Cu(OH) ₂	Algacide Fungicide Insecticide	U	Skin and respiratory irritation
Mercury compounds	HG	Inorganic and Organic mercury	Fungicide	Ia, Ib, II	Neurological effects
Nitrophenol derivatives	NP		Acaricide Fungicide Herbicide Insecticide	Ib, II	Nausea, vomiting, and diarrhea
Organochlorine compounds	OC	-CH ₂ Cl	Fungicide Insecticide	Ia, U	Gastrointestinal and neurological effects
Organophosphorus compounds	OP		Acaricide Fungicide Rodenticide	Ia, Ib, II, III	Central nervous system effects
Organotin compounds	OT	R ₂ Sn, R ₃ SnX, R ₄ SnX ₂ , R ₂ SnX ₂	Fungicide Herbicide	II	Gastrointestinal irritation
Phenoxyacetic acid derivatives	PAA		Herbicide	II, U	Skin and eye irritation
Pyrazole derivatives	PZ		Insecticide	U	Cytotoxic and mutagenic effects
Pyrethroids	PY		Acaricide Insecticide	Ib, II, III, U	Respiratory irritation
Triazine derivatives	T		Herbicide	II, U	Nausea, vomiting, diarrhea and abdominal pain
Thiocarbamates	TC		Acaricide Fungicide	III, U	Irritation

Nanociencia y nanotecnología: Fullerenos y nanotubos de carbono

Propiedades

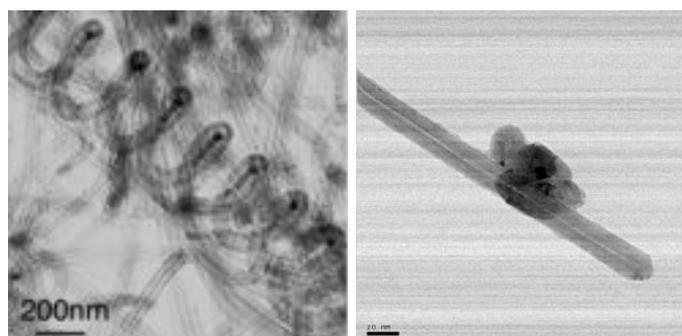


Eléctricas: Semiconductores o Superconductores

Mecánicas: Son muy resistentes a la tensión y presentan una elevada elasticidad

Térmicas: Buenos conductores térmicos a lo largo del tubo y aislantes a través de la pared

Vista de nanotubos al microscopio electrónico



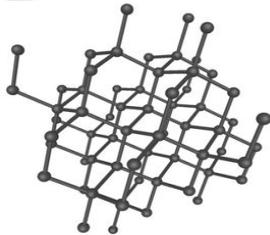
Aplicaciones

Supercondensadores
Células solares
Almacenamiento de hidrógeno
Electrónica
Biomedicina
Industria espacial
Agentes adsorbentes,...

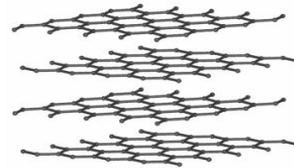
Estado físico: dependiente de las interacciones entre moléculas.

 Carbono (C)

CARBÓN ACTIVO (C)



Grafito



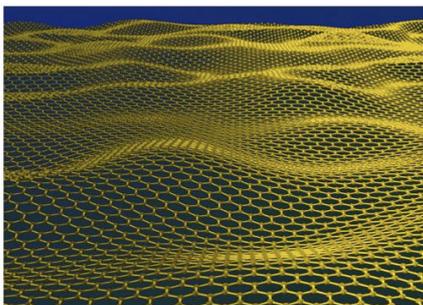
<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>



THE NOBEL PRIZE IN PHYSICS 2010

Graphene  – the perfect atomic lattice

Graphene is a form of carbon. As a material it is completely new – not only the thinnest ever but also the strongest. As a conductor of electricity it performs as well as copper. As a conductor of heat it outperforms all other known materials. It is almost completely transparent, yet so dense that not even helium, the smallest gas atom, can pass through it.



Geim

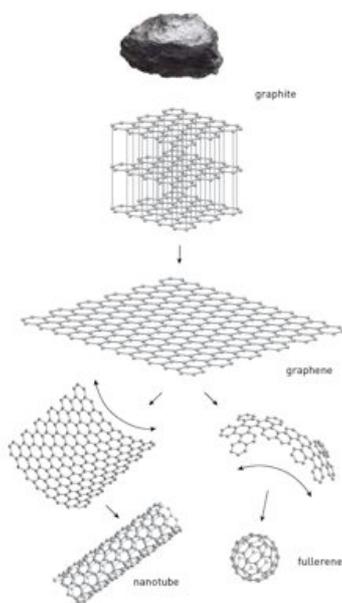


Novoselov



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

PRODUCCIÓN DE GRAFENO Y RELACIÓN CON LOS NANOTUBOS DE CARBONO Y LOS FULLERENOS



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

GRAFENO: CARÁCTERÍSTICAS Y APLICACIONES.

Características:

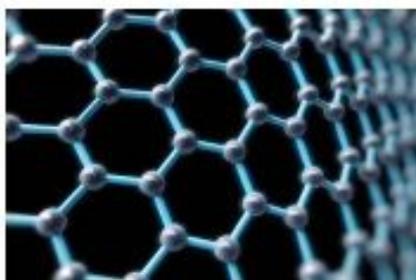
- Alta resistencia mecánica (superior al acero)
- Alta conductividad eléctrica (superior al silicio)
- Alta conductividad térmica
- Ligereza
- Interacción con otras moléculas

Aplicaciones:

- Fuselaje de aviones
- Convertidores de energía
- Material electrónico. Procesadores para ordenadores
- Detectores de gases
- Almacenamiento de electricidad

Preparación:

- Rotura micromecánica
- CVD
- Crecimiento epitaxial
- Reducción de óxido de grafito
- Exfoliación de grafito



El grafeno puede ser el material ecológico por excelencia (15:00 h)

2016/03/30 De Redacción ADN

0

Por: Jorge Castañeda

Osaka de Juárez, 30 de marzo. El grafeno es el material más duro que existe pero con una increíble maleabilidad que le permite deformarse sin romperse, es mucho mejor conductor que el cobre y permite la impresión de circuitos electrónicos en su grosor mínimo. También es el más ecológico, porque puede reducir casi 100 veces la materia prima de los aparatos de tecnología de consumo.

Además, su utilización en la fabricación de paneles solares permitirá que éstos sean más baratos, eficientes, ligeros y duraderos, al tiempo que su capacidad para almacenar energía puede dotar a las baterías de una mayor duración y un menor tiempo de carga, así como establecer conexiones más rápidas.



CSIC
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS



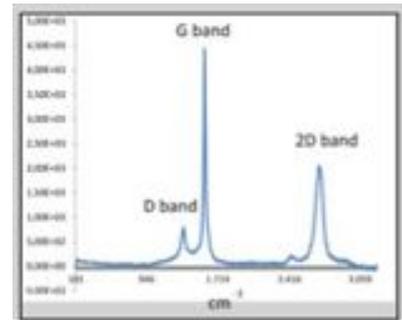
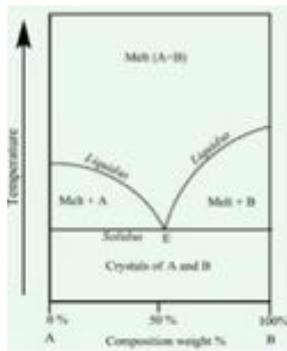
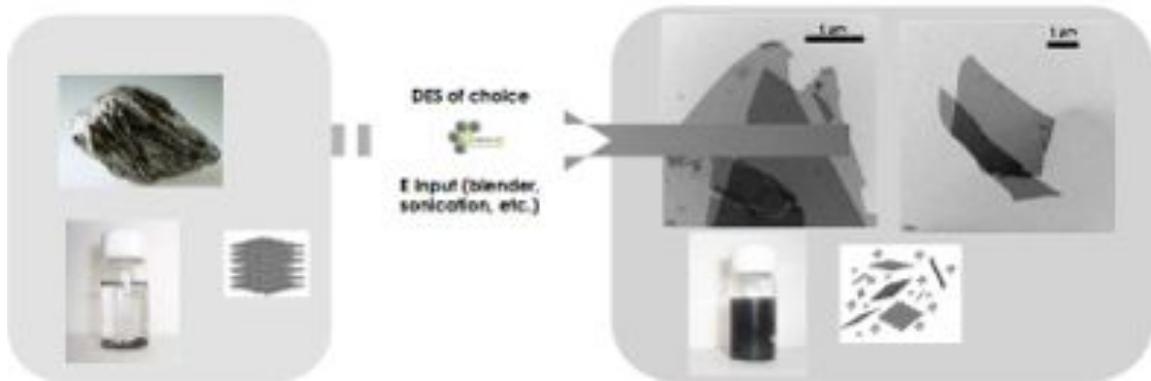
<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>



CSIC
CONSEJO SUPERIOR DE INVESTIGACIONES CIENTÍFICAS

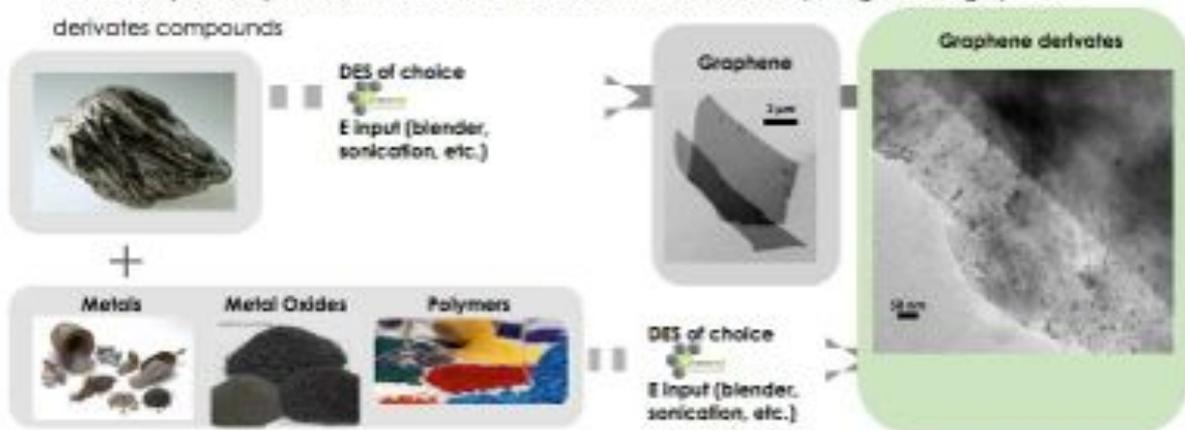


<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

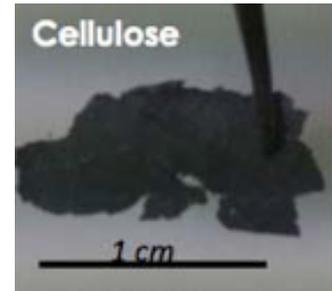
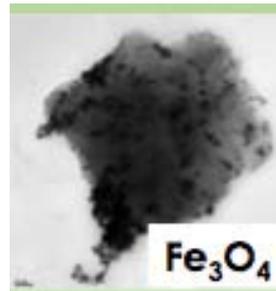
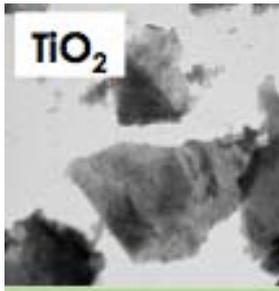
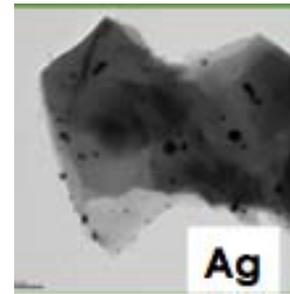
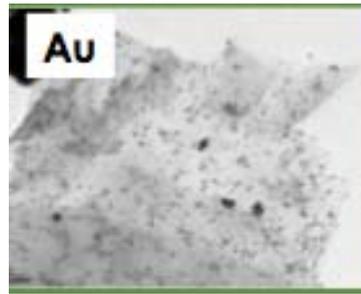


<http://www.losavancesdequimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

Taking advantage of the capability of DES to readily stabilize exfoliated graphenic structures, together with the solubility of many different molecule families we are able, in-one-step, to generate graphene derivatives compounds



<http://www.losavancesdequimica.com/>
<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://www.madrimsd.org/blogs/quimicaysociedad/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>

N.º 12: 97/10
I.S.B.N.: 148800

Público

Fecha: 25/01/2007
Sección: CIENCIA
Páginas: 32/33

Los 'nanotóxicos' colonizan los ríos españoles

Científicos del CSIC hallan «concentraciones considerables» de fullerenos, unas moléculas esféricas capaces de transportar sustancias peligrosas, en los ríos residuales de Catalunya

¿Debemos temer a los nanomateriales?

SI/NO

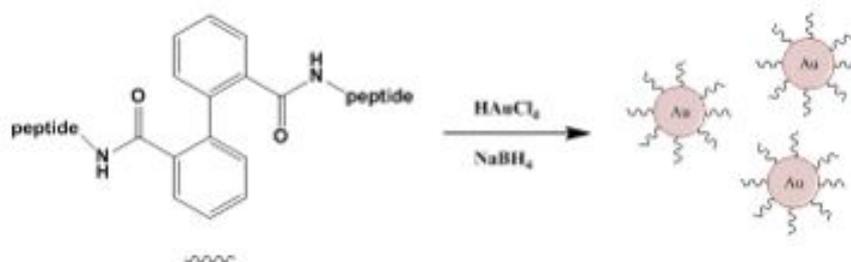
¿¿¿???

La investigación en toxicología

Publicar en toxicología, medio ambiente y áreas relacionadas



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>



Connolly et al. *Nanoscale Research Letters* 2013, 8:315
<http://www.nanoscalereslett.com/content/8/1/315>

Nanoscale Research Letters
a SpringerOpen Journal

NANO EXPRESS

Open Access

Peptide-biphenyl hybrid-capped AuNPs: stability and biocompatibility under cell culture conditions

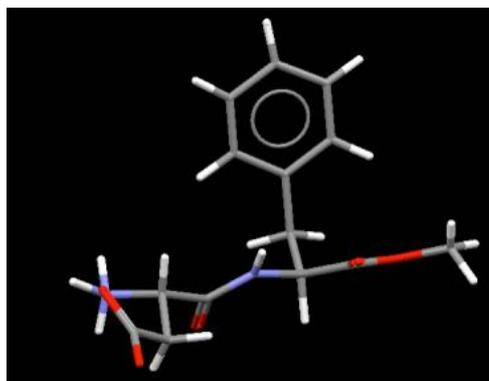
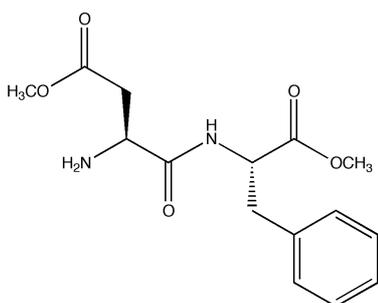
Mona Connolly¹, Yolanda Pérez^{2*}, Enrique Mann³, Bernardo Herradón³, María L. Fernández-Cruz^{1*} and José M. Navas¹



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>

La investigación en toxicología

Publicar en toxicología, medio ambiente y áreas relacionadas



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>



PII S0024-3205(98)00282-3

Life Sciences, Vol. 63, No. 5, pp. 337-349, 1998
Copyright © 1998 Elsevier Science Inc.
Printed in the USA. All rights reserved
0024-3205/98 \$19.00 + .00

FORMALDEHYDE DERIVED FROM DIETARY ASPARTAME BINDS TO TISSUE COMPONENTS *IN VIVO*

C. Trocho, R. Pardo, I. Rafecas, J. Virgili, X. Remesar, J.A. Fernández-López and M. Alemany

Adult male rats were given an oral dose of 10 mg/kg aspartame ^{14}C -labelled in the methanol carbon. At timed intervals of up to 6 hours, the radioactivity in plasma and several organs was investigated. Most of the radioactivity found (>98 % in plasma, >75 % in liver) was bound to protein. Label present in liver, plasma and kidney was in the range of 1-2 % of total radioactivity administered per g or mL, changing little with time. Other organs (brown and white adipose tissues, muscle, brain, cornea and retina) contained levels of label in the range of 1/12 to 1/10th of that of liver. In all, the rat retained, 6 hours after administration about 5 % of the

formation from aspartame and binding to biological components. The chronic treatment of a series of rats with 200 mg/kg of non-labelled aspartame during 10 days resulted in the accumulation of even more label when given the radioactive bolus, suggesting that the amount of formaldehyde adducts coming from aspartame in tissue proteins and nucleic acids may be cumulative. It is concluded that aspartame consumption may constitute a hazard because of its contribution to the formation of formaldehyde adducts.



Paracelso (1493-1541)

**Todas las cosas son venenosas y nada es inócuo.
Únicamente la dosis determina lo que no es un veneno.**



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>



toxicología.

(Del gr. τοξικόν, veneno, y *-logía*).

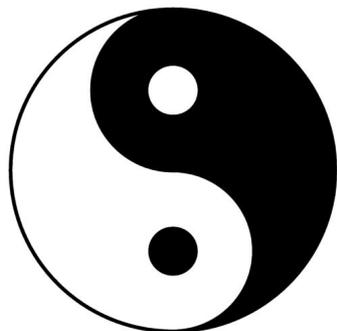
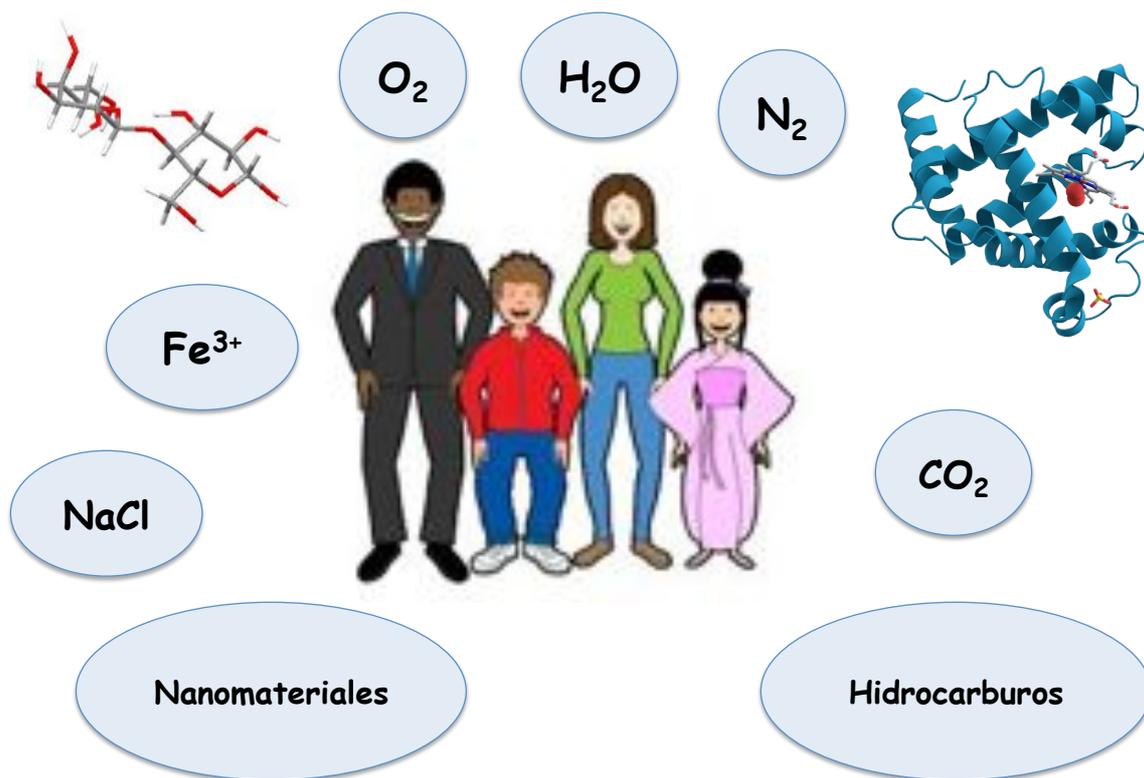
1. f. Estudio de las sustancias tóxicas y sus efectos.

Toxicología (clásica): Estudio de los efectos adversos de los agentes xenobióticos.

Origen: los antiguos envenenadores.

Toxicología (moderna). También se ocupa de:

- ◆ Uso de agentes tóxicos como herramientas en biomedicina
- ◆ Mecanismos por los que un agente endógeno puede provocar una respuesta tóxica.
- ◆ Mecanismo de acción y exposición a sustancias químicas como causas de enfermedades agudas o crónicas.



La toxicología, ciencia fundamental en el mundo actual

1) Evaluación de:

- Fármacos
- Aditivos y complementos dietéticos
- Pesticidas y productos fitosanitarios
- Productos de consumo

TOXICOLOGÍA MOLECULAR

2) Contribución a procesos reguladores (leyes, normas, etc.) que afectan a personas, animales, medio ambiente

TOXICOLOGÍA AMBIENTAL

3) Prácticas sanitarias:

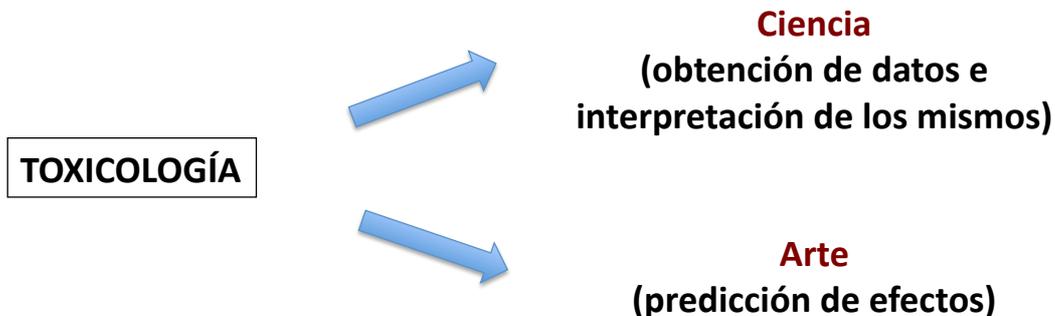
- ◆ Antídotos
- ◆ Tratamiento de los síntomas
- ◆ Efectos de xenobióticos

TOXICOLOGÍA CLÍNICA

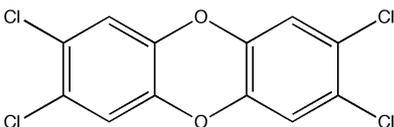
4) Evaluación de:

- Materiales tecnológicos
- Nanomateriales

NANOTOXICOLOGÍA



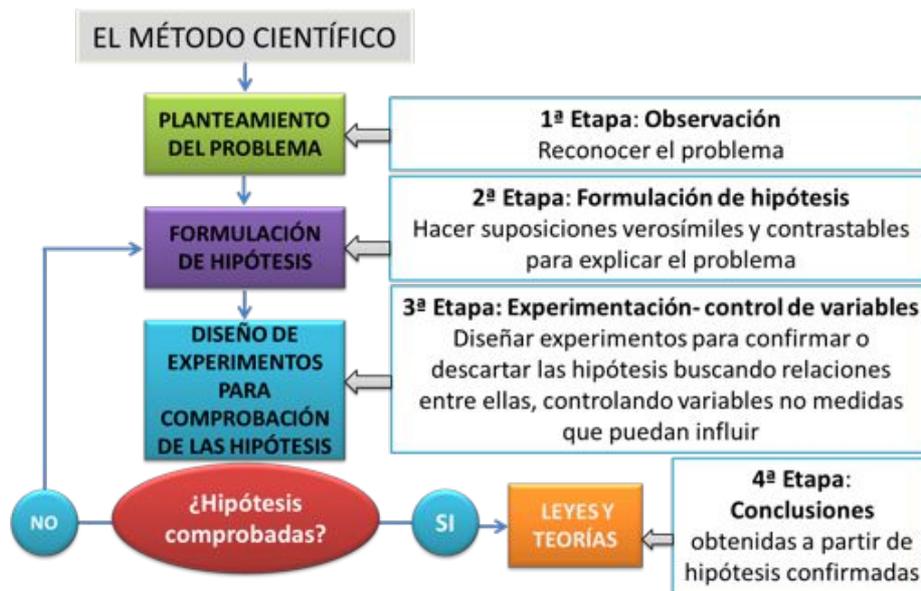
Distinción entre los datos y la predicción



Dato: La TCDD induce hepatocarcinoma en ratas *Sprague Dawley*



↓
¿Extrapolable al ser humano?



Certezas:

Teorema > Ley > Principio > Hipótesis > Especulación > Conjetura > Adivinación



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>

COMPUESTOS BIOLÓGICAMENTE ACTIVOS

Química médica (farmacéutica)

Toxicología



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>



<http://www.quimica2011.es/>



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>



Paracelso (1493-1541)

**Todas las cosas son venenosas y nada es inócuo.
 Únicamente la dosis determina lo que no es un veneno.**

Adrien Albert (1907-1989):



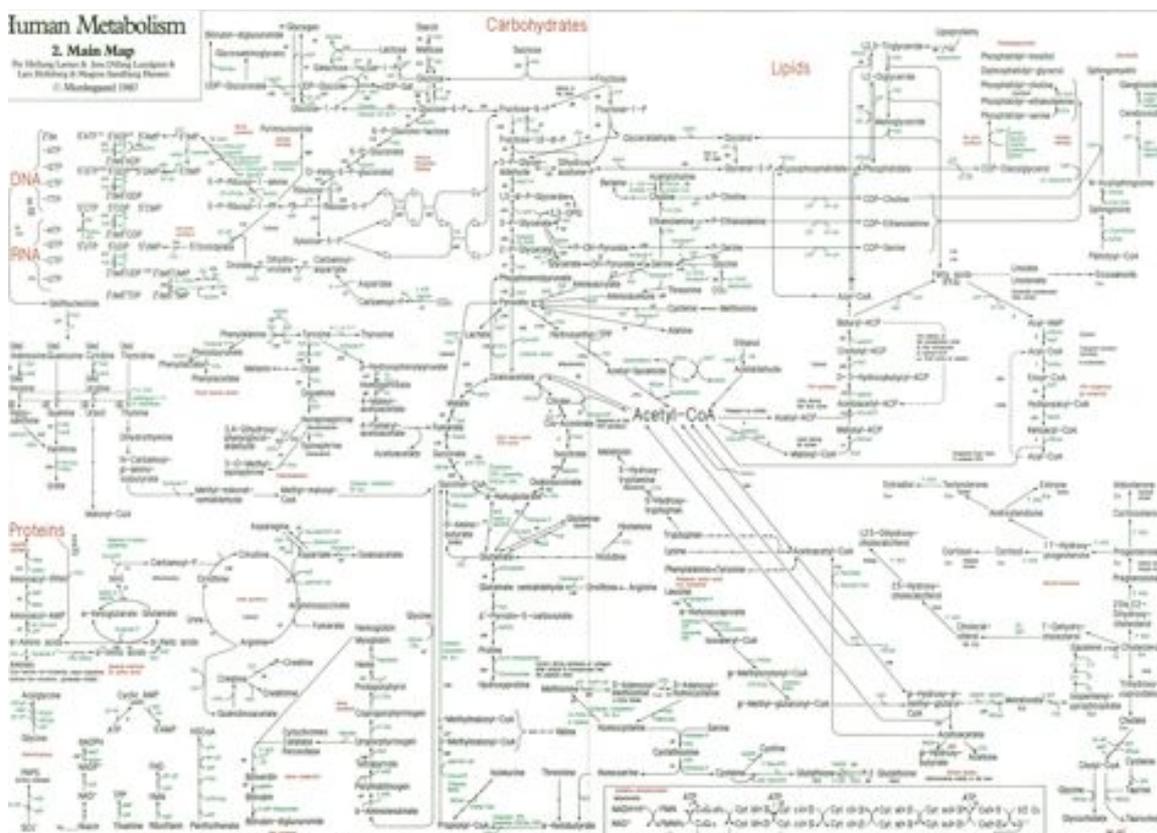
Toxicidad selectiva.

Los tres principios:

- **Selectividad a través de la acumulación**
- **Selectividad a través de la bioquímica comparada**
- **Selectividad a través de la citología comparada**



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>



COMPUESTOS BIOLÓGICAMENTE ACTIVOS

Toxicología

En seres humanos

En animales

En ecosistemas

Impacto medioambiental

Ensayos muy caros y laboriosos

Resultados difíciles de interpretar

COMPUESTOS BIOLÓGICAMENTE ACTIVOS

Química médica



Toxicología



Cribado virtual
“virtual screening”

Herramientas computacionales

Estructura

Propiedades moleculares

Semejanza molecular

Relaciones estructura-actividad



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>

<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

<http://educacionquimica.wordpress.com/>

Investigación en toxicología computacional (IQOG-CSIC)

Metodología:

- ✦ Experimental. Datos de actividad biológica homogéneos y comparables (Dr. J. M. Navas, INIA).
- ✦ Determinación de propiedades moleculares por modelización computacional.
 - ✦ Análisis conformacional.
 - ✦ Cálculos mecano-cuánticos.
 - ✦ Estructura (estática, dinámica).
 - ✦ Interacciones intermoleculares.
 - ✦ Propiedades electrostáticas (potencial electrostático, momentos electrostáticos, polarizabilidad).
 - ✦ Descriptores de reactividad (polarizabilidad, potencial químico, dureza-blandura, electrofilia).
 - ✦ Mecanismos de reacción.



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>

<http://www.madrimasd.org/blogs/quimicaysociedad/>

<http://educacionquimica.wordpress.com/>

Queroetin, Resveratrol, and Curcumin Are Indirect Activators of the Aryl Hydrocarbon Receptor (AhR)

Anshu Mohanrao-Bardooji¹, Jotarna Bangsawang, Ulf Pannekoeg, Agneta Karihuog, and Emma Wänstrand^{1,2}
¹Institute of Environmental Medicine, Karolinska Institutet, Stockholm, Sweden
²Department of Pharmacology and Toxicology, School of Pharmacy, Södra University of Medical Sciences, SöU
³Department of Genetics, Microbiology and Toxicology, Stockholm University, Sweden

Chem. Res. Toxicol., 2013, 26 (1), pp 1079-1088

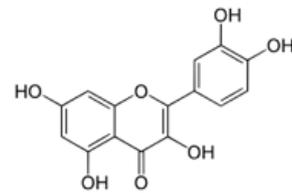
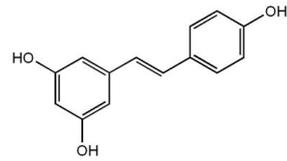
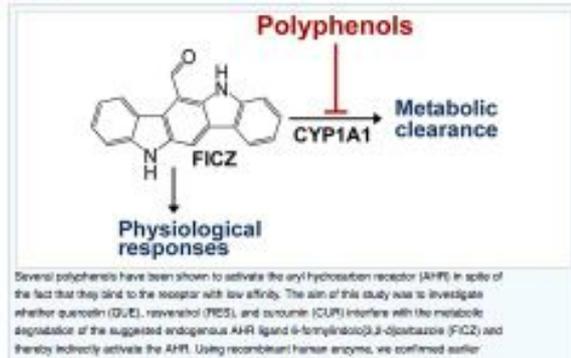
DOI: 10.1021/tx300499g

Publication Date (Web): August 06, 2013

Copyright © 2013 American Chemical Society

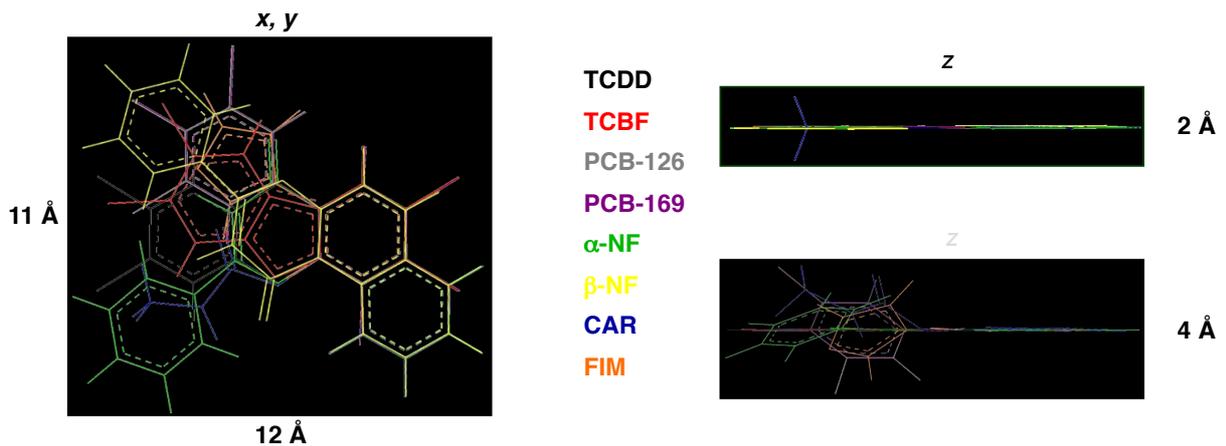
*Tel: +46-8-3348022; Fax: +46-8-20881; E-mail: emma.wanstrand@ki.se

Abstract



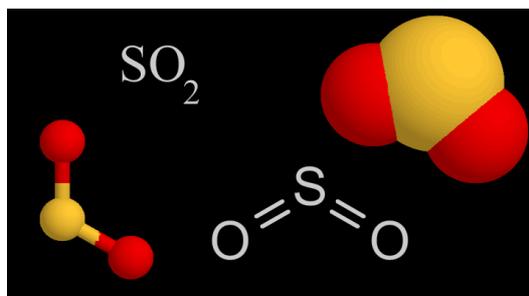
<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>

**Activantes del receptor de hidrocarburos aromáticos (AhR).
 Modelo de activación.**



REQUISITOS PARA SER UN LIGANDO DEL AhR

- 1.- Posibilidad de adoptar una conformación plana de dimensiones máximas $12 \times 10 \times 2 \text{ \AA}^3$.
- 2.- Presencia de, al menos, una región de potencial electrostático negativo en las zonas laterales del ligando.
- 3.- Polarización electrónica a lo largo del eje x mayor que a lo largo del eje y: $\alpha_{xx} - \alpha_{yy} > 0$.
- 4.- Presencia de un grupo voluminoso en la posición que ocurre el enlace en los NF.



ARTICLE IN PRESS

LFS-13837; No of Pages 5

Life Sciences xxx (2013) xxx–xxx



Contents lists available at ScienceDirect

Life Sciences

journal homepage: www.elsevier.com/locate/lifescie



Minireview

Sulfur dioxide, a double-faced molecule in mammals

Xin-Bao Wang^a, Jun-Bao Du^{b,*}, Hong Cui^{a,*}

^a Department of Pediatrics, Beijing Friendship Hospital, Capital Medical University, Beijing 100050, PR China

^b Department of Pediatrics, Peking University First Hospital, Beijing 100034, PR China

ARTICLE INFO

Article history:
Received 21 September 2013
Accepted 20 December 2013
Available online xxx

Keywords:
Sulfur dioxide
Physiological effects
Biology

ABSTRACT

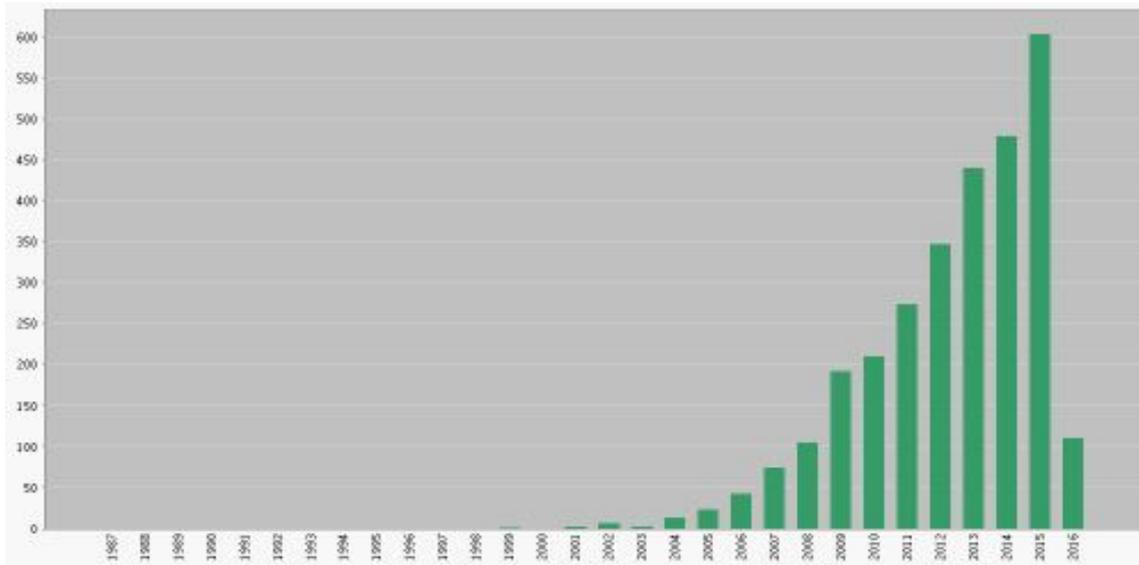
Sulfur dioxide (SO₂) is a common air pollutant and is detrimental to many organs. Its toxic effects including oxidative damage, deoxyribonucleic acid (DNA) damage and inflammation have been extensively studied. However, recent studies showed that SO₂ can be generated endogenously in mammals. In contrast to the toxic effects of SO₂, protective effects have also been found in mammals. Endogenous SO₂ has antioxidant, anti-inflammatory, anti-hypertension, and anti-atherogenic effects and regulates vascular tone and cardiac function in mammals. SO₂ may have a dual role in regulating physiological and pathophysiological effects in mammals. The biological effects of SO₂ in mammals are reviewed in this study.

© 2013 Published by Elsevier Inc. 27



Fig. 1. SO₂: a "double faced" molecule in mammals. Low SO₂ levels are cytoprotective, whereas high SO₂ levels are cytotoxic.

Nanotoxicología



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>

BioStorPhases vol. 2, Issue 4 (2007) pages MR17 - MR172

33



Figure 14. Indoor air pollution from (a) heating, (b) cooking (Courtesy E.E. Sokolovskiy), (c) candle smoke, (d) TEM of 1000 particle from indoor pollution [127], reproduced with permission from Environmental Health Perspectives, (e) Death from indoor smoke from solid fuels according to World Health Organization [128].

Table 1. Measured concentrations of nanoparticles resulting from various common indoor household activities, after [124].

Nanoparticle source	Concentration (nanoparticles/cm ³)	Estimated source strength (particles/min × 10 ¹⁵)
Pure wax candle	241,500	3.65
Radiator	218,400	8.84
Cigarette	213,300	3.76
Frying meat	150,900	8.27
Heater	116,800	3.89
Gas stove	79,600	1.3
Scented candles	69,600	0.88
Vacuum cleaner	38,300	0.38
Air freshener spray	29,900	2.34
Ironing a cotton sheet	7,200	0.007

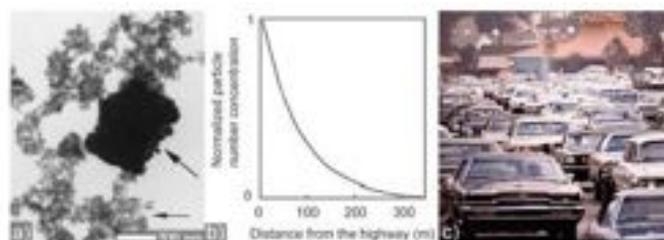


Figure 15. (a) TEM showing typical engine exhaust particles consisting of carbon aggregates (small arrow) around a larger mineral particle (large arrow) [114]; (b) particle concentration decreases exponentially with downwind distance from the freeway (particle diameter between 6-220 nm) [24]; (c) Traffic in Los Angeles, courtesy EPA.

La contaminación mata incluso en concentraciones legales en Europa

Un estudio publicado hoy en "The Lancet" asegura que el aumento de 5 microgramos por metro cúbico de exposición anual a las PM2,5 eleva el riesgo de muerte un 7%

BUNIA S. REPELLARD | Madrid | 11/10/2013 - 11:11:20Z

Archivado en: The Lancet, Contaminación atmosférica, Prensa, Contaminación, Problemas ambientales, Medio ambiente, Comunicación, Medio ambiente, Salud



Barcelona ha reducido el tráfico por contaminación. / OMBUDSMAN

Varios estudios han medido hasta la fecha el efecto en la salud a corto plazo de las partículas PM2,5, de diámetro menor a 2,5 micras y procedentes en gran medida de los vehículos con motores diésel. Sobre su efecto a largo plazo, sin embargo, apenas había investigaciones. Hoy la revista *The Lancet* publica un trabajo con datos de 22 grupos de estudio de toda Europa que incluyen a 367.251 personas a las que los investigadores

han seguido durante cerca de 14 años. Sus conclusiones son preocupantes para quienes viven en áreas con alta contaminación: por cada incremento de 5 microgramos por metro cúbico (µg/m³) en la exposición anual a las PM2,5 el riesgo de morir por causas naturales aumenta un 7%.



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>

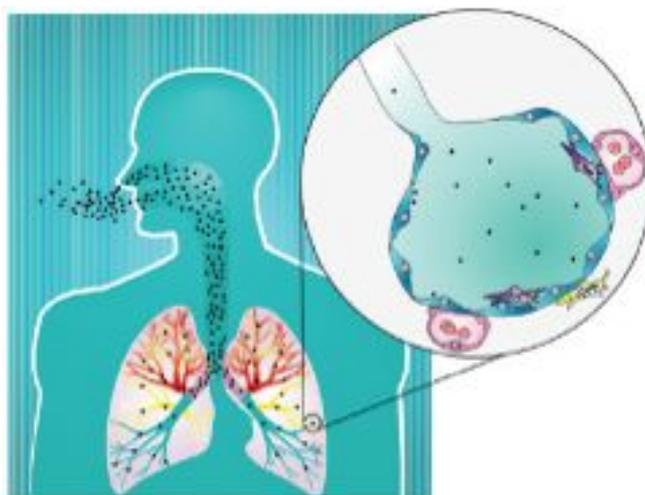


Figure 5. Possible transport pathway for nanoparticles in the lung. Inhaled particles that are smaller than 2.5 µm (PM_{2.5}) have access to the alveolar structures of the deep lung and may, in high doses, induce inflammation. A very small portion of the nanoparticles can cross the air-blood barrier and will be distributed via the bloodstream (red). Within the alveoli, most of the particles will be phagocytized by macrophages (purple) or dendritic cells (yellow) or may also be taken up by epithelial cells (blue).



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>

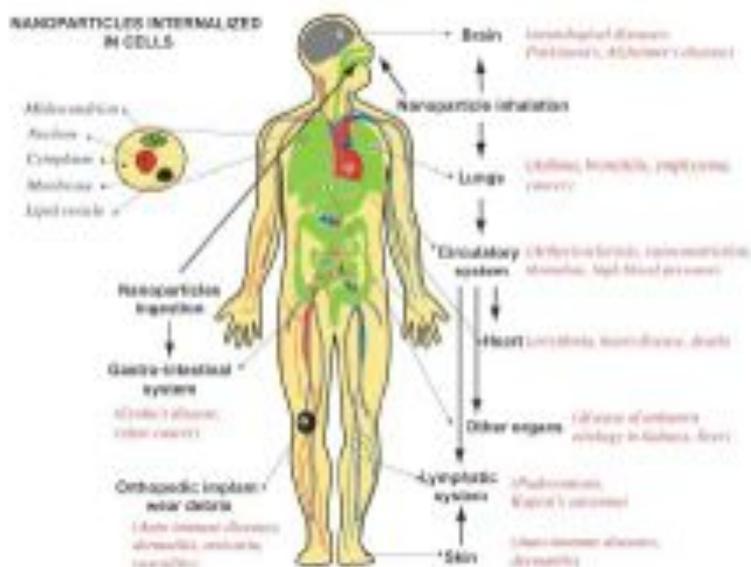


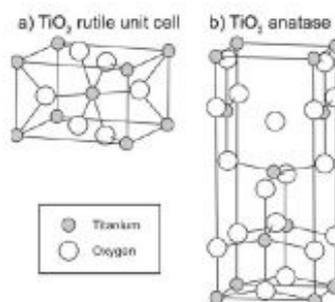
Figure 7. Schematic of human body with pathways of exposure to nanoparticles, affected organs, and associated diseases from epidemiological, *in vivo* and *in vitro* studies.



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>

Table 4. Nanomaterials, their morphologies, and their relative cytotoxicity index (RCI) on murine macrophage cells [113].

Material	Mean aggregate size (µm)	Mean particle size (nm)	RCI (at 5 µg/ml)	RCI (at 10 µg/ml)
Ag	1	30	1.5	0.8
Ag	0.4	30	1.8	0.1
Al ₂ O ₃	0.7	50	0.7	0.4
Fe ₂ O ₃	0.7	50	0.9	0.1
ZrO ₂	0.7	20	0.7	0.6
TiO ₂ (rutile)	1	short fibers 5-15 nm diam.	0.3	0.05
TiO ₂ (anatase)	2.5	20 nm	0.4	0.1
Si ₃ N ₄	1	60	0.4	0.06
Asbestos	7	Fibers 20 nm diam., up to 500 aspect ratio	1	1
Chrysotile				
Carbon black	0.5	20	0.8	0.6
SWCNT	10	100 nm diam.	1.1	0.9
MWCNT	2	15 nm diam.	0.9	0.8



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>

SEGURIDAD Y SALUD EN EL TRABAJO CON

NANOMATERIALES



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>

Bernardo Herradón

Director del Instituto de Química Orgánica General del CSIC. "Todo lo cotidiano es química. Al día una persona está en contacto con unas cien mil sustancias". Como químico, Herradón intenta reducir su utilización en su rutina diaria. Por ejemplo, en vez de una pastilla de detergente para lavar la vajilla, opta por tres cuartas partes

"Hay que minimizar el uso de sustancias químicas"

Diario de Mallorca

15 de junio de 2011

—En la relación química-medio ambiente, ¿El CO₂ es el máximo problema?

—El mayor problema a nivel global es el alto nivel de CO₂ en la atmósfera que se deriva del consumo excesivo de energía. Para resolver este problema la química

puede diseñar métodos para capturar CO₂, que es un producto químico que tiene sus aplicaciones industriales como por ejemplo para las bebidas carbonatadas.

Hay otros problemas más locales como el uso excesivo de productos químicos. En mi vida diaria minimizo el uso de las sustancias químicas. Todos queremos usar un detergente que cuanto más eficaz, mejor pero debemos poner la dosis adecuada porque el excedente se va al río. Si el fabricante recomienda poner una pastilla de detergente para lavar la vajilla, yo echo tres cuartas partes y queda igual de bien. Esto se puede extrapolar al agricultor que usa un abono para cuidar sus cosechas y en lugar de usar un cazo, usa uno y

medio pero este medio vaso de más no sirve para nada, solo para que las lluvias se lo lleven al río. También estamos todos los días manipulando miles de productos químicos. Se ha estimado que la cifra que diariamente cada persona está en contacto con sustancias químicas ronda los cien mil. El CO₂ es un gran problema global pero luego localmente nos encontramos que hay pesticidas en cualquier río de España. Muchas veces el problema ambiental viene porque no somos conscientes de que eso que estamos manipulando son sustancias químicas y que suelen tender a acumularse en el medio. Todos tenemos que ser prudentes, la protección ambiental comienza con el individuo.



<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>

Reducir, reusar, reciclar.

La basura más limpia es la que no se genera.

Y si ya no es posible, incinerar (en condiciones controladas científicamente).

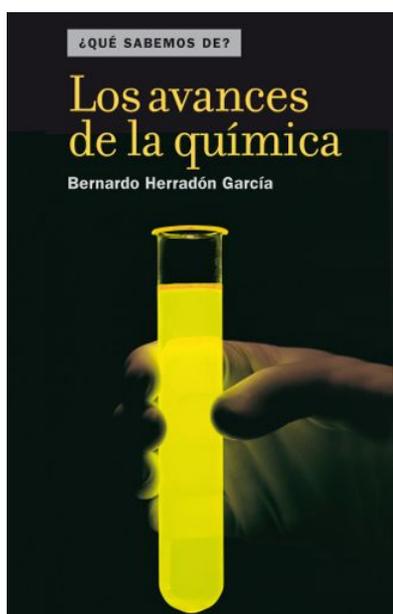


<http://www.losavancesdelaquimica.com/>
<http://educacionquimica.wordpress.com/>
<https://twitter.com/QuimicaSociedad>



Save Our World

Muchas gracias por vuestra atención



Curso de divulgación
Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad

Del 26 de noviembre de 2015 al 28 de abril de 2016

Más información:
<http://www.losavancesdelaquimica.com>
b.herradon@csic.es

- ◆ El curso constará de 17 conferencias y dos mesas redondas.
- ◆ Se celebrará los jueves a las 18:00 en el salón de actos del Centro de Química Orgánica "Lora Tamayo" (CENQUIOR-CSIC).

