



**FORMATO RESUMEN**  
**CONVOCATORIA 5º CONGRESO DE ESTUDIANTES-INVESTIGADORES/AS DE**  
**POSTGRADO**  
**UNIVERSIDAD DE SANTIAGO DE CHILE**

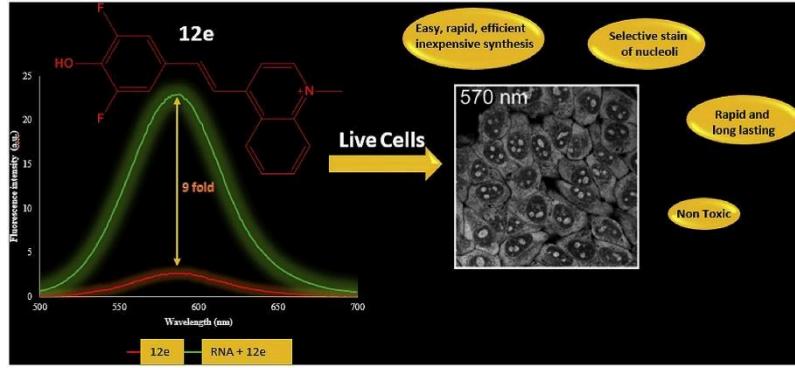
**Criterios generales:**

- Participantes:** La presente convocatoria está dirigida a estudiantes y graduados/as del postgrado USACH. Asimismo, previa evaluación y en casos excepcionales, también se aceptarán ponencias de egresados/as del pregrado USACH, que estén cursando el postgrado en otra Universidad; así como de otros/as investigadores/as del postgrado USACH.
- Temas:** Se recibirán temáticas diversas, de acuerdo a la realidad investigativa y disciplinar de cada uno/a de los/as ponentes. En particular para el presente año, se sugiere considerar temas emergentes en sus respectivas disciplinas.
- Lenguaje:** Resumen dirigido a toda la comunidad de postgrado, para lectoras/es de postgrado de múltiples disciplinas. Se sugiere revisar posibles adecuaciones a su texto, aclarar tecnicismos y/o agregar explicaciones didácticas y ejemplos.
- Proceso de revisión:** Luego de la recepción del texto, éste será revisado internamente, guardándose el derecho de realizar observaciones y solicitudes derivadas, que serán comunicadas al autor/a/es respectivo.

**Resumen:**

CRITERIOS	POR COMPLETAR
<b>TÍTULO:</b> Fuente: 14pt, Times New Roman.	Ajuste de la inversión solvatocrómica de los análogos de la merocianina de Brooker
<b>ÁREAS DE CONOCIMIENTO DE ESTE TRABAJO:</b> Fuente: 11pt, Times New Roman.	1. Síntesis de heterociclos orgánicos 2. Química Orgánica 3. Solvatocromismo
<b>AUTOR/A/ES:</b> Nombres y apellidos, afiliación (estudiante/graduado-a); programa de postgrado de pertenencia; facultad; USACH. Fuente: 11pt, Times New Roman.	Marcel Philipip Muñoz Vicencio, Estudiante de doctorado en química, Facultad de química y biología, Universidad de Santiago de Chile.  Pablo Andrés Rojas Olivares, Estudiante de doctorado en química, Facultad de química y biología, Universidad de Santiago de Chile.  Matías Sebastián Vidal Palomo, Graduado de doctorado en química, Facultad de química y biología, Universidad de Santiago de Chile.
<b>Ejemplo:</b> Dany Doel Santos, Graduado de Doctorado en Ciencias Artísticas, Facultad de Arte, Universidad de Santiago de Chile.	Moisés Elías Domínguez Caru, Graduado de Doctorado en química, Tutor, profesor asistente en la Facultad de química y biología, Universidad de Santiago de Chile.  Carolina Del Pilar Aliaga Vidal, Graduada de Doctorado en química, directora Dycit, Tutora, investigadora asociada de la Facultad de química y biología, Universidad de Santiago de Chile



CRITERIOS	POR COMPLETAR
<p><b>CORRESPONDENCIA:</b> correo electrónico de contacto.</p> <p>Fuente: 11pt, Times New Roman.</p>	<p><a href="mailto:marcel.munoz@usach.cl">marcel.munoz@usach.cl</a></p>
<p><b>RESUMEN:</b></p> <p>Debe incluir:</p> <ul style="list-style-type: none"><li>▪ Presentación del problema.</li><li>▪ Fundamentos conceptuales.</li><li>▪ Objetivos.</li><li>▪ Metodología.</li><li>▪ Resultados preliminares, discusiones y/o conclusiones.</li><li>▪ Referencias.</li></ul> <p>Expresado en no más de 500 palabras (sin considerar referencias).</p> <p>Formato: Espacio sencillo, fuente: Times New Roman 11 pt.</p>	<p>El término polaridad hasta hoy en día sigue siendo ambiguo, esto debido principalmente a la poca claridad de los parámetros que lo definen, razón por la cual existen diferentes investigaciones que lo correlacionan a múltiples propiedades físicas [1,2], las cuales, no son generales para todos los estudios, a causa de esto en la actualidad está presente la generación de nuevos sensores que puedan esclarecer dichas propiedades. El tipo de sensor en el cual se enfoca nuestro grupo son los compuestos solvatochromicos, ya que, gracias a sus propiedades espectroscópicas, son empleados en el estudio de sistemas biológicos y químicos [3,4]</p>  <p>Figura 1 Ejemplo de aplicación en sistema biológico [4]</p> <p>El solvatochromismo es un fenómeno que da cuenta a la influencia que ejerce el solvente sobre un soluto a nivel molecular en la posición, intensidad y la forma de las bandas de absorción del espectro UV-visible [5]. En la literatura los compuestos solvatochromicos se categorizan en tres tipos. El solvatochromismo positivo, el cual al ir aumentando la polaridad del medio presenta un desplazamiento hacia mayores longitudes de onda, el negativo hacia menores longitudes de onda, y por último el inverso el cual al ir aumentando la polaridad del medio pasa de un comportamiento positivo a negativo.</p>

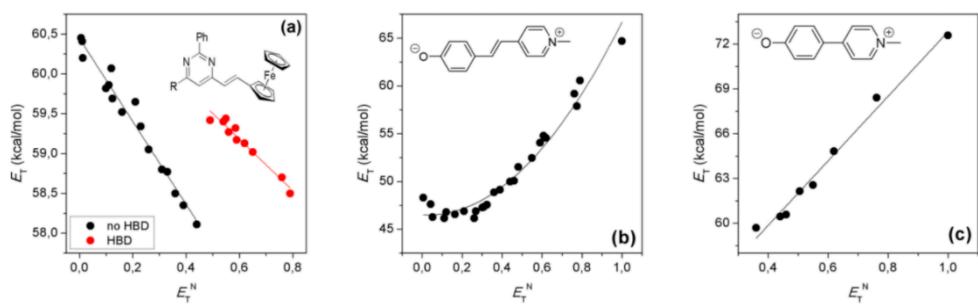


Figura 2 Ejemplos de los distintos tipos de solvatochromismo (positivo, reversible y negativo)

El principal motivo de nuestra investigación es comprender las razones fundamentales que dan cuenta a estos diversos comportamientos, siendo de interés investigar el solvatochromismo inverso a causa de la poca información existente de este y sus posibles interacciones soluto-solvente que presenta.

El colorante reversible de mayor relevancia reportado en literatura es la merocianina de Brooker [6] en el cual basamos nuestra investigación sintetizando tres compuestos análogos a este, es decir, compuestos que presenten una estructura similar, pero con ciertas modificaciones que las diferencian, pudiendo dar información relevante acerca de cómo están interactuando con el medio.

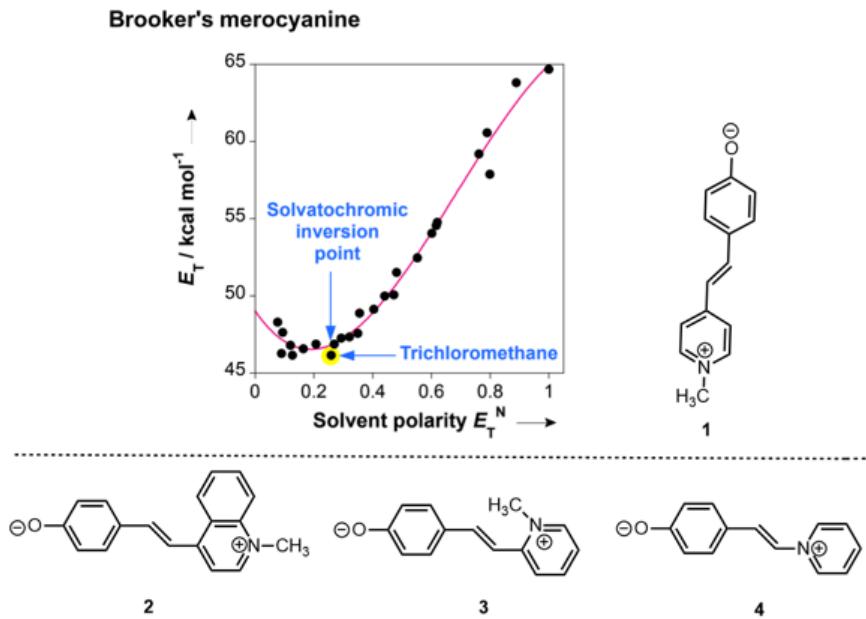


Figura 3 Merocianina de Brooker 1 y los tres análogos sintetizados en la presente investigación

Para la obtención de estos compuestos se diseñaron distintas rutas sintéticas, en las cuales se pudieron obtener exitosamente los 3 colorantes con buenos rendimientos y además caracterizándolos vía  $^1\text{H}$ -RMN,  $^{13}\text{C}$ -RMN e infrarrojo.

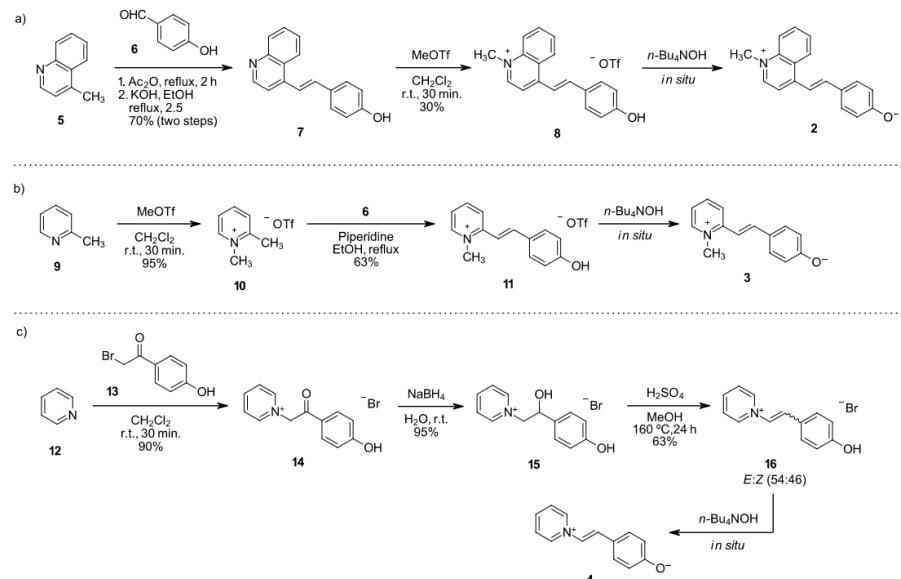


Figura 4 Rutas sintéticas empleada para la síntesis de los 3 colorantes de interés

Respecto a las medidas en solución, se midió la absorbancia de los colorantes en una extensa variedad de solventes en un espectrofotómetro, donde al valor obtenido de absorbancia se le realizó una conversión a energía de transición, con la finalidad de graficar la energía de transición versus polaridad del medio. Donde en el comportamiento espectral se pudo apreciar que los tres colorantes presentaron solvatochromismo reversible, sin embargo, estos tenían comportamientos muy diferentes entre ellos, como distinta sensibilidad al medio y diferente desplazamiento del punto de inversión en comparación a la merocianina de Brooker.

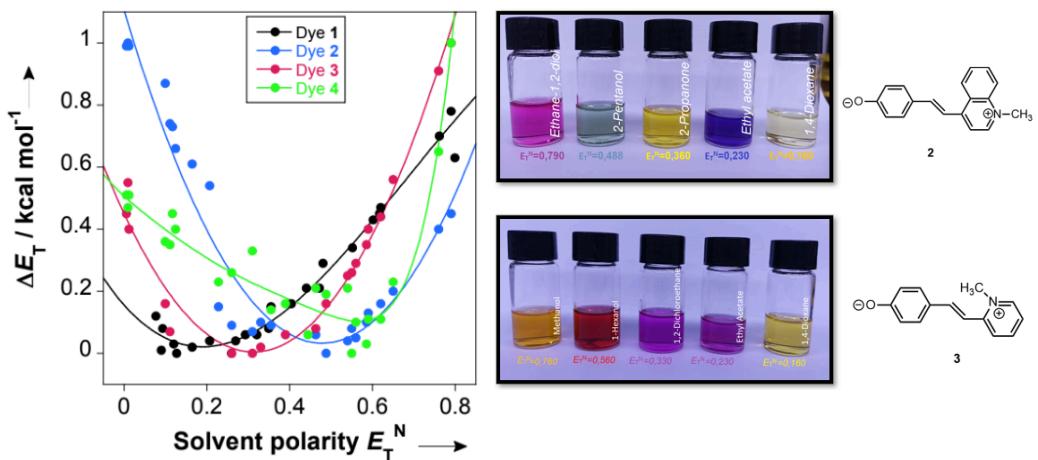


Figura 5 Variaciones de la energía de transición  $E_T$  de la merocianina de Brooker 1 y sus análogos en función de los valores normalizados de polaridad del disolvente  $E_T^N$

A modo de conclusión del trabajo se pudo obtener que el variar la posición del grupo acceptor de carga como la anulación, presenta un importante impacto en la interacción del soluto-solvente, ya que se observó una distinta sensibilidad en medios poco polares y además que el punto de inversión es distinto entre ellos. Lo que permite que nuestro



	<p>esquema pueda seguir siendo modificado para la comprensión estructural de estas sondas encontrando nuevas características que podrían ser de interés a futuro.</p> <p>Referencias:</p> <ol style="list-style-type: none"><li>1. Berthelot, M.; péan de Saint-Gilles, L. Ueber die Einwirkung des Ammoniaks auf Kupfer bei Zutritt der Luft. Justus Liebigs Annalen der Chemie, 1864, vol. 129, no 3, p. 376-376.</li><li>2. Grunwald, Ernest; Winstein, S. The correlation of solvolysis rates. Journal of the American Chemical Society, 1948, vol. 70, no 2, p. 846-854.</li><li>3. Soda Y, Robinson KJ, Nussbaum R, Bakker E. Protamine/heparin optical nanosensors based on solvatochromism. Chem Sci 2021; 12:15596–602. <a href="https://doi.org/10.1039/d1sc04930e">https://doi.org/10.1039/d1sc04930e</a>.</li><li>4. Saady, A., Varon, E., Jacob, A., Shav-Tal, Y., &amp; Fischer, B. (2019). Applying styryl quinolinium fluorescent probes for imaging of ribosomal RNA in living cells. Dyes and Pigments, 107986. doi:10.1016/j.dyepig.2019.107986</li><li>5. Hantzsch, A. Über die Halochromie und» Solvatochromie «des Dibenzal-acetons und einfacherer Ketone, sowie ihrer Ketochloride. Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft (A and B Series), 1922, vol. 55, no 4, p. 953-979.</li><li>6. Brooker, L. G. S.; Keyes, G. H.; Heseltine, D. W. Color and constitution. XI. Anhydronium bases of p-hydroxystyryl dyes as solvent polarity indicators. Journal of the American Chemical Society, 1951, vol. 73, no 11, p. 5350-5356.</li></ol>
<b>PALABRAS CLAVE:</b>  Fuente: Times New Roman 11 pt.	Solvatochromismo; merocianina de Brooker; polarizabilidad del disolvente; colorantes fenolados; solvatochromismo invertido.
<b>ENLACE A PUBLICACIÓN Y/O SITIO RELACIONADO CON SU RESUMEN:</b>  Fuente: Times New Roman 11 pt.	<ul style="list-style-type: none"><li>• <a href="https://www.researchgate.net/profile/Moises-Dominguez">https://www.researchgate.net/profile/Moises-Dominguez</a></li><li>• <a href="https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0167732222023236?via%3Dihub">https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0167732222023236?via%3Dihub</a></li></ul>
<b>ESTADO DE SU TRABAJO:</b>  <ul style="list-style-type: none"><li>▪ En desarrollo.</li><li>▪ Concluido.</li><li>▪ Publicado.</li></ul> Fuente: 11pt, Times New Roman.	Concluido