



5a Reunión de Usuarios de Luz Sincrotrón

Wednesday 12 August 2015 - Friday 14 August 2015

Cuernavaca, Morelos

Book of abstracts

Table of contents

Inauguración	3
Evolution and future of light sources.	3
Theory and Interpretation of X-ray Spectra Spectroscopies*	3
X-ray Structural studies of triosephosphate isomerases	4
ID21 a synchrotron multi-modal platform for micro-spectroscopic analyses: applications in environmental science and cultural heritage	4
DINÁMICA DE MOLÉCULAS EN ESTADOS ELECTRÓNICAMENTE EXCITADOS. ESTUDIOS POR ESPECTROSCOPIA DE PULSOS LÁSER ULTRACORTOS	5
Synchrotron Radiation in the Universe	5
Identificación de arseniatos de calcio con luz sincrotrón.	6
Direct experiences with the operation of a beamline.	6
Structural crystallography of Mu-class glutathione S-transferase from shrimp <i>Litopenaeus vannamei</i>	7
Crystallographic Structural Determination of a Trigonal Laccase from <i>Coriopsis Gallica</i> (CgL) to 1.5 Å Resolution	7
Synchrotron radiation as a tool to determine chemical structure modification of wheat straw (<i>Triticum aestivum</i>) treated with an enzymatic extract obtained from Methylophilic Bacteria.	8
Estructura y función de quimotripsinas de camarón.	9
PROTECTIVE EFFECT IN VITRO PLANTS <i>CUCUMIS SATIVUS</i> L. (AMERICAN CUCUMBER) BY BACTERIA ENDOPHYTES TOLERANT Cd (II) ROOT ISOLATED <i>TYPHA LATIFOLIA</i> (ESPADANA)	9
Effect of phytohormone 2-6- δ -benzilaminopurine in the morphogenetic response of <i>Laelia anceps</i> Lindl. subsp. <i>anceps</i> (Orchidaceae)	10
EFFECTO DEL HONGO <i>Trichoderma harzianum</i> EN EL ENRAIZAMIENTO Y PREACLIAMATACIÓN DE LA ORQUÍDEA <i>Euchile mariae</i>	10
Análisis estructural de proteasas de organismos marinos, utilizando como modelo la catepsina D1 de langosta americana.	11
Crystallographic studies of DNA ligase from <i>Thermococcus gammatolerans</i>	12
CARACTERIZACIÓN DE FERRITINA EN SUERO SANGUÍNEO: ESTUDIO ESPECTROSCÓPICO	12
REDUCTION OF THE ACTIVE SITE OF BOVINE LIVER CATALASE WITH X-RAY	13
Crystallographic structure of Proliferating Cell Nuclear Antigen from radioresistant archaeon, <i>Thermococcus gammatolerans</i>	13
Crystal structure of pig kidney Fructose 1,6-biphosphatase with sulfate has a quaternary state between the canonical R- and T-states.	14

Análisis de exposición a benceno en población infantil de Salamanca, Guanajuato.	15
EVALUACIÓN DEL EFECTO GENOTÓXICO DURANTE LA FITOEXTRACCIÓN DE Pb POR <i>Typha latifolia</i> (Espadaña)”	16
Determinación de los biomarcadores de benceno, tolueno y xileno en niños residentes en Tula de Allende, Hidalgo	17
Determinación de Compuestos Orgánicos Persistentes en población infantil procedente del municipio de Salamanca, Gto.	18
Scavengers and pH: two approaches to reduce radiation damage on protein crystalline samples.	19
Momentum Resolved Resonant Inelastic X-Ray Scattering on Correlated Electron Materials	20
As and Cu speciation in mine tailings using synchrotron radiation	21
Synchrotron Radiation in Molecular Taphonomy and Paleobiology	22
X-ray absorption Near Edge spectroscopy applied to the study of local atomic structure of ions in solution, e.g., Arsenic.	22
The Upgrade of the ESRF: The next step in the development of storage ring based X-ray sources.	23
In-house X-ray single crystal diffraction as a tool for efficient synchrotron data collection	23
Theoretical Studies of the high-pressure ϵ and ζ phases of solid oxygen	24
Computing at the service of crystallography	24
Material Science, the industrial case in a synchrotron	25
PV solar cells performance using some synchrotron radiation characterization techniques	25
Things to consider before building a beamline at a light source.	26
Electronic structure of cathodes for Li-ion batteries, multi-ferroic materials and iridates investigated by soft X-ray spectroscopies.	26
Programación mezclada en el procesamiento de datos sincrotrónicos	27
RIXS calculations in $\text{FeTe}_{1-x}\text{Se}_x$ system.	27
Determination of impurities in the surface of giant crystals of Naica by Synchrotron Radiation.	28
Structural study of gypsum crystals at Naica by two-dimensional diffraction at Stanford Synchrotron.	29
COMPORTAMIENTO BIOGEOQUÍMICO DE PLOMO (Pb) Y CROMO (Cr) DE SUELOS DEL DISTRITO MINERO DE GUANAJUATO Y SU REMOCIÓN POR <i>Acacia farnesiana</i>	30
“Cuantificación de Elementos Potencialmente Tóxicos en especies vegetales de un sitio minero de Guanajuato: identificación de especies potencialmente fitorremediadoras”	31
DETERMINACIÓN DE LA ACUMULACIÓN DE ELEMENTOS POTENCIALMENTE TÓXICOS (EPTs) EN ESPECIES VEGETALES DE UN SITIO MINERO DE GUANAJUATO: IDENTIFICACIÓN DE ESPECIES CON POTENCIAL FITORREMIADOR.	32
COMPUTATIONAL CRYSTALLOGRAPHY: PROGRAMS FOR ANALYZING BIDIMENSIONAL DIFFRACTION PATTERNS	33
Elemental analysis of particulate matter PM10 by X-Ray Fluorescence	33
Estudio de las especies producto de la reacción de Cr VI y ácidos orgánicos	34
Determinación de la morfología lignocelulósica en el bagazo de caña de azúcar sometido a pretratamientos químicos y biológicos usando dispersión de rayos-x en ángulo pequeño (SAXS)	34

Dinámica de fotodisociación en fase gaseosa del éster Formiato de Etilo (HCOOCH ₂ CH ₃) por Espectroscopia Translacional de Fotofragmentación basada en radiación sincrotrón VUV a 193 nm	35
XANES study of Chromium-Rare-earth Zircons and Sheelites	36
Determinación Teórica y Experimental de las rutas de disociación de Metil Acrilato (CH ₂ =CHCOOCH ₃) a 193 nm	37
ARPES on High-Temperature Superconductors and Topological Materials	37
The evolution of ratite birds throughout biomineralization of carbonates followed by crystallographic methods using synchrotron radiation	38
Small Angle X-ray Scattering and VUV Photofragment Translational Spectroscopy for bioenergy purposes. ..	38
MLS: Status of the conceptual design.	39
Uses of ultra short wavelength x-rays in life science	39
The Mexican Morelos Synchrotron Light Project: Present Status	39
Perspectives on science communication about 'Mexican Synchrotron' during 2015, the International Year of Light.	40
RED TEMÁTICA USUARIOS DE LUZ SINCROTRÓN.	40
Asamblea de la Red Temática de Usuarios de Luz Sincrotrón (REDTULS).	40

Chairman

José Jiménez-Mier (ICN-UNAM)

Organizing Committee

Armando Antillón (ICF-UNAM)

Luis Brieba de Castro (LANGEBIO CINVESTAV Irapuato)

Mayra Cuéllar Cruz (Universidad de Guanajuato)

Daniel Hernández-Cruz (Universidad Autónoma de Chiapas)

Guillermo Hinojosa (ICF-UNAM)

Erick Juárez-Arellano (Universidad del Papaloapan)

Antonio Marcelo Juárez-Reyes (ICF-UNAM)

Alfredo Quinto Hernández (Instituto Tecnológico de Zacatepec)

Alejandro Ramírez Solís (Universidad Autónoma del Estado de Morelos)

Enrique Rudiño (IBT-UNAM)

Brenda Valderrama (Secretaría de Innovación, Ciencia y Tecnología del Estado de Morelos)

Academic Committee

Gustavo Cruz Jiménez (Universidad de Guanajuato)

Guadalupe de la Rosa (Universidad de Guanajuato)

Juan Carlos Fierro González (Instituto Tecnológico de Celaya)

Luis Fuentes Cobas (Centro de Investigación en Materiales Avanzados)

María Elena Montero Cabrera (Centro de Investigación en Materiales Avanzados)

Abel Moreno Cárcamo (IQ-UNAM)

Matías Moreno Yntriago (IF-UNAM)

José Mustre (CINVESTAV)

Mauro Napsuciale Mendivil (Universidad de Guanajuato)

Ibrahim Serroukh (Universidad Autónoma de Querétaro)

Tomás Viveros (Universidad Autónoma Metropolitana)

Red Temática de Usuarios de Luz Sincrotrón

Coordinador General de la Red

Dra. Guadalupe De la Rosa

Coordinador de Investigación Básica

Enrique Rudiño Piñera

Coordinador de Investigación aplicada y vinculación con la industria

Abel Moreno Cárcamo

Coordinador de Infraestructura

Erick A. Juárez-Arellano

Coordinador de Divulgación y Comunicación

Daniel Hernández Cruz

Coordinador de Ingreso a la Red

Gustavo Cruz Jiménez

Coordinador de Movilidad

Ma. Elena Montero

Coordinador de Propiedad Intelectual

Mayra Cuéllar Cruz

5ª Reunión de Usuarios de Luz Sincrotrón

En 2015, el Año Internacional de la Luz, los usuarios de luz de sincrotrón que trabajamos en México nos reunimos por quinto año consecutivo para exponer nuestros trabajos, intercambiar experiencias, iniciar colaboraciones y reforzar trabajos conjuntos.

Esta 5ª Reunión de Usuarios de Luz Sincrotrón tiene lugar en la ciudad de Cuernavaca, en el estado de Morelos. Este Estado ha declarado su interés en ser sede de la fuente de luz mexicana. Morelos cuenta con prestigiados usuarios de luz de sincrotrón y su participación en estas reuniones ha sido siempre destacada.

En esta ocasión contamos con la asistencia de cinco distinguidos investigadores, que han hecho importantes contribuciones al trabajo con luz de sincrotrón en el mundo. Tenemos también la participación de colegas con 20 presentaciones orales y 34 contribuciones que serán expuestas en carteles. Los expositores de estos trabajos son tanto investigadores establecidos como jóvenes estudiantes, y provienen de todas las latitudes del País. Tendremos además dos mesas redondas en las que se discutirán maneras de ampliar y fortalecer la participación de investigadores y estudiantes de México en el uso de la luz de sincrotrón. En particular, el tema a tratar en las dos mesas son mecanismos de participación en fuentes de luz existentes, con especial énfasis en los criterios y acciones que hay que considerar para construir una línea (beamline) en alguna fuente de luz.

Esta reunión fue posible gracias al apoyo de la Secretaría de Innovación, Ciencia y Tecnología del Estado de Morelos, por medio del proyecto FOMIX-Morelos, y también por el apoyo de la Red Temática de Luz Sincrotrón (REDTULS) de CONACyT.

Los organizadores agradecemos el apoyo de de Rodolfo Leo, Luciano Díaz González, Nataly Pacheco y Lourdes García Muñoz. También agradecemos el apoyo logístico proporcionado por el Instituto de Ciencias Físicas de la UNAM y la Sociedad Mexicana de Física.

El diseño del póster y del logo de la reunión fueron hechos por la Dra. Nasheli Jiménez Del Val.

¡Bienvenidos a Cuernavaca! José Jiménez-Mier

Presidente del Comité Organizador.

Inauguración / 74

Inauguración

Wednesday I / 104

Evolution and future of light sources.

Mr. JUAREZ-REYES, Antonio ¹

¹ Instituto de Ciencias Físicas UNAM

Corresponding Author: amjuarez@gmail.com

Light sources have enjoyed a spectacular evolution since the development of the MASER. This introductory talk will provide to a general audience a glimpse on the evolution of the light sources, with emphasis on synchrotron radiation. The evolution in brilliance, wavelength span and time structure of the light pulses will be revised with an emphasis on the science that these developments have allowed to foster. More than a rigorous history revision, the aim of the talk is to set out the context of the present and exciting future developments in light sources.

Wednesday I / 78

Theory and Interpretation of X-ray Spectra Spectroscopies*

Prof. REHR, John ¹

¹ Department of Physics, University of Washington

Corresponding Author: jjr@uw.edu

There has been dramatic progress in recent years in theories of x-ray spectra and other core-level spectroscopies. Here we discuss the two complementary approaches that build on theories of excited-state electronic structure and response functions. Both include several many-body effects that are crucial to a quantitative description. First is a real-space Green's function (RSGF) approach for calculations of x-ray absorption (XAS) and electron energy loss spectra (EELS). This theory is implemented in a relativistic, all-electron code FEFF9 [1], which is applicable to periodic and aperiodic materials alike, throughout the periodic table. The approach can now include ab initio treatments of many-body effects such as the screened core-hole interaction, extrinsic and intrinsic inelastic losses, Debye-Waller factors, and approximations for strong correlation effects. For example, FEFF9 uses a many-pole GW self-energy (MPSE) to treat final state broadening and self-energy shifts; the most recent release also treats Hubbard model corrections. We also discuss the interpretation of the spectra in terms of geometrical and excited state electronic structure. Second, is a more sophisticated GW/Bethe-Salpeter Equation (GW/BSE) approach, which is implemented in the hybrid package OCEAN [2]. This package use wavefunctions from plane-wave pseudopotential codes (ABINIT or QuantumESPRESSO), the NIST BSE solver, and the MPSE self-energy. We also discuss recent extensions for treating L-shell spectra and multiplet effects. Though OCEAN is computationally demanding, recent extensions have greatly improved its applicability. While OCEAN is limited to near edge spectra, FEFF9 loses accuracy close to an edge. However, the combination permits full-spectrum calculations over a broad spectrum from soft- to hard-x-ray energies. These approaches are illustrated with a number of applications.

References

[1] J J Rehr, J J Kas, M P Prange, A P Sorini, Y Takimoto, and F Vila, *Comptes Rendus Physique* 10, 548 (2009).

[2] J Vinson, J J Kas, F D Vila, J J Rehr, and E L Shirley, *Phys. Rev. B* 85, 045101 (2012).

[*]Supported by DOE Grant DE-FG03-97ER45623, and by the DOE CMCSN

Wednesday I / 66

X-ray Structural studies of triosephosphate isomerases

Dr. LUIS, Briebeba¹; Mr. PEDRO, Jimenez¹; Mrs. MARGARITA, Lopez¹

¹Langebio-Cinvestav

Corresponding Author: lgbriebeba@langebio.cinvestav.mx

Little is known of the molecular consequences in the oligomeric form in triosephosphate isomerase. Herein we present data that describes that specific point mutations in triosephosphate isomerase produce monomeric enzymes. We present the X-ray crystal structures of 4 monomeric triosephosphate isomerases and 4 dimeric enzymes. Our data highlights the idea that protein assemblies can be modulated by other molecules.

Wednesday II / 86

ID21 a synchrotron multi-modal platform for micro-spectroscopic analyses: applications in environmental science and cultural heritage

Dr. CASTILLO-MICHEL, Hiram¹; Dr. COTTE, Marine¹; Dr. DE NOLF, Wout¹; Mr. BUGNAZET, David¹; Mr. GAGLIARDINI, Eric¹;

Mr. BERRUYER, Gilles¹; Mr. PAPILLON, Emmanuel¹; Dr. SUSINI, Jean¹; Dr. POUYET, Emeline¹; Dr. SALOME, Murielle¹; Dr.

FAYARD, Barbara¹; Dr. HESSE, Bernhard¹; Dr. RIVARD, Camille¹

¹ESRF

Corresponding Author: hiram.castillo_michel@esrf.fr

ID21 offers a multimodal set of state-of-the-art techniques for micro-spectroscopic analyses in the tender X-ray (2-9.2KeV) and mid-infrared domains.

The scanning X-ray microscope offers sub-micron resolution ($0.2 \times 0.7 \mu\text{m}^2$) and ppm detection limits for micro-X-ray fluorescence (μ -XRF) and micro X-ray absorption spectroscopy (μ -XANES). It operates in vacuum and samples can be studied under cryogenic conditions, allowing the study of frozen hydrated biological specimens (cryosectioned tissues) [1]. Typical applications are mapping and speciation of nanoparticles and metal pollutants in soils and organic matrices (e.g plants) [2-5]. The full-field XANES end-station is extremely powerful for elemental speciation in samples compatible with the transmission detection mode. It offers large field of view (up to 2mm^2) and lateral resolution between 1.5 - $0.7 \mu\text{m}^2$ resulting in millions of XANES spectra from one specimen [6,7]. In complement to the above techniques, the μ -XRD branch is now available to perform crystalline phase mapping ($1 \times 2 \mu\text{m}^2$ beam). The μ -Infrared end-station completes the tool box offering molecular group mapping (5 - $12 \mu\text{m}^2$ beam). The unique capabilities of ID21 will be illustrated with scientific examples in the fields of environmental science and cultural heritage.

[1] Salomé et al. (2013) J. Physics: Conf. Series, 425(18), 182004. [2] Larue et al. (2014) J. Hazard. Mat., 264, 98-106. [3] Servin et al. (2012) Env. Sci. Technol., 46(14), 7637-7643. [4] De la Rosa et al. (2014) Int. J. Phytorem. 16, 1073-1086. [5] Auffan et al. (2014) Nanotoxicol., 8, 167-176. [6] Fayard et al. (2013) J. Physics: Conf. Series, 425(19), 192001. [7] De Andrade et al. (2011) Analyt. Chem., 83, 4220-4227.

Wednesday II / 112

DINÁMICA DE MOLÉCULAS EN ESTADOS ELECTRÓNICAMENTE EXCITADOS. ESTUDIOS POR ESPECTROSCOPIA DE PULSOS LÁSER ULTRACORTOS

Dr. PEON PERALTA, JORGE ¹

¹ INSTITUTO DE QUÍMICA, UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

Corresponding Author: jpeon@unam.mx

Los fenómenos que resultan del cambio de la configuración electrónica de un compuesto ocurren en la escala de tiempo de los femtosegundos y los picosegundos. Estos procesos son centrales en campos como la fotoquímica y la opto-electrónica molecular. En esta presentación se darán a conocer resultados recientes de estudios sobre la dinámica de estados electrónicos superiores de diversos sistemas moleculares, mediante el seguimiento de la emisión molecular transitoria con resolución de femtosegundos.

Wednesday II / 70

Synchrotron Radiation in the Universe

Dr. TRINIDAD, Miguel Angel ¹

¹ Departamento de Astronomía, UG

Corresponding Author: trinidad@astro.ugto.mx

The mechanism of synchrotron radiation is an important astrophysical process. Synchrotron radiation is a type of non-thermal emission where relativistic electrons spiral around the magnetic field lines. Since electrons are being accelerated, this process produces strongly polarized radiation, which is beamed in the direction of motion of the electrons. Synchrotron radiation has a characteristic continuous spectrum, which is a power law and its shape depends on the energy distribution of the emitting electrons. Astronomical objects that emit synchrotron radiation are active galactic nucleus, pulsars, supernova remnants, planets with strong magnetic fields, among others. In astrophysical environments, synchrotron radiation is detected at wavelengths from radio to gamma rays. But unlike terrestrial synchrotron, where the magnetic fields are very intense and radiation is observed at the optical, in interstellar medium, magnetic fields are weak, so that radiation is mainly observed at radio wavelengths.

Wednesday II / 71

Identificación de arseniatos de calcio con luz sincrotrón.

Dr. MARTÍNEZ-VILLEGAS, Nadia ¹; Dr. CASTILLO, Francisco ²; Prof. AVALOS-BORJA, Miguel ¹; Prof. JAMIESON, Heather ³; Mr. HERNÁNDEZ-BARCENAS, Gerardo ¹

¹ IPICYT

² CONACyT

³ Queen's University

Corresponding Author: nadia.martinez@ipicyt.edu.mx

Resumen.

En este trabajo identificamos el tipo de arseniatos de calcio que se encuentran en muestras de sedimento de un acuífero altamente contaminado con arsénico ubicado en Matehuala, San Luis Potosí, México. Los sedimentos en contacto con hasta 158 mg/L de arsénico en agua a pH neutro se estudiaron por difracción convencional de rayos X, microscopía electrónica de barrido acoplado a análisis de dispersión de energía de rayos X (SEM-EDS) y micro difracción de rayos X en sincrotrón. La identificación de arseniatos de calcio por análisis convencionales de difracción de rayos X no fue posible debido a que los especímenes de interés son de tamaño micro y se encuentran en una matriz de calcita, yeso y cuarzo que comprende casi el 100 % de las muestras, lo que imposibilita separar la señal de los arseniatos de la señal de la de la matriz y/o el ruido. No obstante, especímenes aciculares compuestos de calcio, arsénico y oxígeno se observaron comúnmente en las muestras de sedimento durante los análisis SEM-EDS utilizando un detector de electrones retrodispersados. En contraste, los análisis de rayos X en sincrotrón permitieron revelar algunos picos característicos de guerinita, haidingerita y farmacolita, lo que sugiere que estos son los arseniatos de calcio presentes en los sedimentos, los arseniatos de calcio que controlan la solubilidad del arsénico en el acuífero contaminado en Matehuala y los arseniatos de calcio que prevalecen a largo plazo en el ambiente después de ciclos de disolución y precipitación. La identificación de estos arseniatos es consistente con las condiciones ambientales del sitio de estudio y las observaciones SEM-EDS, sin embargo, dicha identificación no es inequívoca debido a la comparación de patrones experimentales de difracción de rayos X tomados en monocristales contra tarjetas de difracción de polvos, lo que previene la identificación estrictamente apropiada de los especímenes analizados. En este sentido, también se identificó scorodita pero su presencia es cuestionable a pH 7 y en presencia de guerinita, haidingerita y farmacolita por lo que este último resultado debe tomarse con reserva y un estudio más profundo, con técnicas analíticas adicionales y/o mejoradas, debe llevarse a cabo para encontrarle una explicación ambientalmente consistente a los picos de difracción de rayos X asignados a la scorodita, mismos que podrían corresponder a algún mineral arcilloso que podría no contener arsénico.

Discussion Panel 1 / 30

Direct experiences with the operation of a beamline.

Dr. CASTILLO MICHELL, Hiram ¹; Dr. FUENTES-MONTERO, Luis ²; Dr. OLALDE-VELASCO, Paul ³

¹ ESRF

² Diamond Light Source

³ Instituto de Ciencias Nucleares UNAM

Corresponding Author: hiram.castillo_michel@esrf.fr

Moderator: Antonio Juárez

Posters I / 41

Structural crystallography of Mu-class glutathione S-transferase from shrimp *Litopenaeus vannamei*

Ms. JUÁREZ-MARTINEZ, Ariadna Berenice¹; Dr. SOTELO/MUNDO, Rogerio²; Dr. RUDIÑO-PIÑERA, Enrique³

¹ IBT-UAEM

² CIAD-Hermosillo

³ IBT

Corresponding Author: ariadnaj@ibt.unam.mx

Glutathione S-transferase is a widely distributed enzyme, found in diverse organisms like microbes, insects, plants, fish, birds and mammals. Currently, four types of GSTs has been described and characterized: class Pi, Mu, Alpha and Theta. These enzymes catalyze nucleophilic attack by reduced glutathione (GSH) on nopolar compounds (or xenobiotics) that contain an electrophilic carbon, nitrogen or sulphur atom. Experimental data suggest that sublethal concentration of certain metals may affect the capacity of several organisms to achieve detoxification against some pesticides or xenobiotics. It is crucial to remark that many of those xenobiotics are presents in the marine sediments. Our work is focused on the 3D structural description of a Mu class GST from *Litopenaeus vannamei*, leg white shrimp (LvGST). We have purified this protein and it was used to obtain crystals using different crystallization conditions. Crystals of LvGST were diffracted at the APS (Advanced Photon Source) in Chicago and the NSLS (National Synchrotron Light Source) in New York. At the moment we have the native structure at a resolution of 1.90 Å, being visible the interaction of the catalytic residue (tyrosine 7) with the sulfhydryl group of GSH. Currently we are growing crystals of LvGST in presence of diferrent metals in order to evaluate the possible structural effects over LvGST structure and function.

Posters I / 44

Crystallographic Structural Determination of a Trigonal Laccase from *Coriolopsis Gallica* (CgL) to 1.5 Å Resolution

Dr. RUIZ ARELLANO, rayana¹; Mr. DE LA MORA, Eugenio²; Dr. RUDIÑO PIÑERA, Enrique³

¹ unam

² Instituto de Biotecnología, Universidad Nacional Autonoma de Mexico

³ Instituto de Biotecnología UNAM

Corresponding Author: rayana@comunidad.unam.mx

Fungal Laccases are proteins secreted by filamentous fungi, which have the function of substrate oxidation of a wide range of compounds. Laccases have been of interest in the industry for its ability to transform various industrial dyes.

The laccase studied in this work is extracted from *Coriolopsis gallica* (CgL), the enzyme has a molecular mass of aproximately 60 kDa, has a pI of 4 and an optimal activity between 50 and 70 ° C. CgL is a glycosylated protein whose glycosylation has been proposed to be responsible for the structural stability, thereof is a monomeric protein which in order to be active needs four copper atoms coordinated by histidines attached to a redox site, each copper is classified according to their spectroscopic characteristics. CgL was extracted and purified from the natural source and then was crystallized. CgL 3D structure was determined by diffraction of X-rays and a different crystal system to those previously reported, by our group, and deposited in the pdb was found (pdb entry 4A2H, space group P212121). Analysis and study of this structure, as well as the structural differences due the different crystalline matrices are present.

Posters I / 51

Synchrotron radiation as a tool to determine chemical structure modification of wheat straw (*Triticum aestivum*) treated with an enzymatic extract obtained from Methylophilic Bacteria.

Dr. MOLINA GUERRERO, Carlos Eduardo ¹; Dr. GUADALUPE, de la Rosa ¹; Dr. CASTILLO MICHELL, Hiram ²

¹ Universidad de Guanajuato

² ESRF

Corresponding Author: cmolina@fisica.ugto.mx

Vegetal biomass, also called lignocellulose, is distinguished by being refractory to physicochemical and enzymatic treatments [1]. Several factors are the responsible of this recalcitrance behavior as the crystallinity and composition of biomass (Cellulose, hemicellulose and lignin). The efficient enzymatic saccharification of cellulose at low cellulase (protein) loadings continues to be a challenge for commercialization of a process for bioconversion of lignocellulose to ethanol [2]. Cellulases are enzymes that hydrolyze the β -(1 \rightarrow 4)-linkages in cellulose. Though cellulase research has been concentrated mostly in fungi, actinomycetes, and protozoa, there is an increasing interest in cellulose production by bacteria [3-5]. In this context, pink pigmented facultative methylotrophs (PPFMs) are a physiologically interesting group of bacteria that are capable of growing on single carbon such as methanol and methylamine, as well as on C2, C3, and C4 compounds [6]. These bacteria can be found in plant phyllosphere and are not considered to be passive passengers on plant leaves, and is known that can stimulate seed germination and plant development. Though earlier studies indicate cellulase production by PPFMs [7] that can be used for transform cellulose in glucose in a bioethanol process.

This work proposes the use μ -FTIR in order to understand the structural changes during enzymatic hydrolysis of lignocellulosic biomass that could lead to improved processes and cost reductions for bioethanol production.

1. Valdez-Vazquez I., Pérez-Rangel M., Tapia A., Buitrón G. Molina C., Hernández G., Amaya-Delgado L. 2015. Hydrogen and butanol production from native wheat straw by synthetic microbial consortia integrated by species of *Enterococcus* and *Clostridium*. *Fuel*, 159: 214-222. IN PRESS doi:10.1016/j.fuel.2015.06.052
2. Arantes V, Saddler JN. Access to cellulose limits the efficiency of enzymatic hydrolysis: the role of amorphogenesis. *Biotechnol Biofuels* 2010;3:4.
3. Nipa, M. N., Sultana, S., & Hakim, M. A. (2006). *Bangladesh Journal of Microbiology*, 23(2), 174–176.
4. Gosh, B. K., Gosh, A., & Salnar, A. (1987). In J. Chaloupka & V. Krumphanzl (Eds.), *Extracellular enzymes of microorganisms: Cellulase secretion from a hypercellulolytic mutant* (pp. 157–172). New York: Plenum.
5. Lynd, R. L., Weimer, J. P., Van Zyl, H. W., & Pretorius, S. I. (2002). *Microbiology and Molecular Biology Reviews*, 66, 506–577.
6. Chistoserdova, L., Chen, S. W., Lapidus, A., & Lidstrom, M. E. (2003). *Journal of Bacteriology*, 185 (10), 2980–2987.
7. Madhaiyan, M., Park, M. S., Lee, H. S., Kim, C. W., Lee, K. H., Seshadri, S., et al. (2004). *Korean Journal of Soil Science and Fertilizer*, 37(1), 46–53.

Posters I / 53

Estructura y función de quimotripsinas de camarón.

Dr. HERNANDEZ-CORTES, Patricia ¹; Dr. RIVERA-PEREZ, Crisalejandra ²; Mrs. MAGALLANES-DOMINGUEZ, Catalina ²

¹ CIBNOR

² Centro de Investigaciones Biológicas del Noroeste

Corresponding Author: pato@cibnor.mx

Las quimotripsinas de crustáceos tienen características estructurales diferentes a los de vertebrados tal como menor número de puentes disulfuro y no conservan el péptido de activación en la enzima madura. Una de las propiedades distintivas de estas enzimas es la capacidad de hidrolizar colágeno nativo que solo lo realizan metalo proteasas de vertebrados y bacterias. En camarón se han encontrado dos tipos de quimotripsinas. La quimotripsina BI tiene un sitio de reconocimiento similar a su contraparte de vertebrados: Ser189, Gly216 y Ala226. La quimotripsina BII tiene una inusual geometría en la que se encuentran sustituciones en dos de los tres residuos que forman el sitio de reconocimiento: Gly189, Gly216 y Asp226. A las quimotripsinas con esta combinación de aminoácidos algunos autores la denominan braquiurinas ya que se describieron por primera vez en un cangrejo, grupo que pertenecen al infraorden braquiura. Si bien el sitio de reconocimiento influye en la eficiencia catalítica, no es determinante en la capacidad de hidrólisis de colágeno, siendo necesarias otras subregiones de la enzima. Además de presentar evidencias experimentales que se han realizado con diversas quimotripsinas de crustáceos, también se mostrarán deducciones estructurales de las quimotripsinas de camarón y el potencial de colaboración con el grupo de usuarios del sincrotrón.

Posters I / 58

PROTECTIVE EFFECT IN VITRO PLANTS CUCUMIS SATIVUS L. (AMERICAN CUCUMBER) BY BACTERIA ENDOPHYTES TOLERANT Cd (II) ROOT ISOLATED TYPHA LATIFOLIA (ESPADAÑA)

Ms. MOCTEZUMA GRANADOS, CLAUDIA ESTHELA ¹; Dr. HERNÁNDEZ MORALES, ALEJANDRO ²; Dr. CARRANZA ÁLVAREZ, CANDY ²

¹ PROGRAMA MULTIDISCIPLINARIO DE POSGRADO EN CIENCIAS AMBIENTALES/UASLP

² UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE SAN LUIS POTOSÍ CAMPUS HUASTECA

Corresponding Author: claudia_020187@hotmail.com

Endophytic bacteria from the roots of *Typha latifolia* grown in soils contaminated with heavy metals were isolated. A total of 205 bacteria was obtained, which showed different levels of tolerance to Cd (II). 116 bacteria was observed that had one or more promotional features to solubilize phosphates plant, secrete siderophores, producing indole acetic acid (IAA) or possess the enzyme 1-aminocyclopropane-1-carboxylate (ACC) deaminase. 22 of these bacteria also showed a high tolerance to Cd (II) (MIC > 500 ppm). Isolated GRC065, GRC066, GRC093 and GRC140 were inoculated in seeds of *Cucumis sativus* L. (American cucumber) to observe its protective effect in plants exposed to 50 ppm of Cd (II). It was observed that the bacterial isolate to inoculate the plants tolerance to these metal was increased, so the elongation of the primary root and increase in the number of secondary roots evidenced. The presence of endophytic bacteria tolerant to Cd (II) inoculated in *C. sativus* plants could contribute in promoting plant growth, promote tolerance and improve metal phytoextraction processes in fitoacumuladoras plants. The use of techniques such as synchrotron light would assess whether or not this process is encouraging, demonstrating the availability of metal speciation, oxidation states, as well as display the section of the plant where the metal is hosting and how so endophytes isolated (GRC065, GRC066, GRC093 and GRC140) contribute to its degradation, assimilation or stabilization.

Posters I / 63

Effect of phytohormone 2-6- δ -benzilaminopurine in the morphogenetic response of *Laelia anceps* Lindl. subsp. *anceps* (Orchidaceae)

Mr. CASTILLO PÉREZ, Luis¹; Dr. CARRANZA ALVAREZ, Candy¹; Prof. HERNANDEZ BENAVIDES, Diego¹

¹ Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Corresponding Author: crystalandroid@hotmail.com

Laelia anceps Lindl. subsp. *anceps* is an endemic orchid of Mexico with a significant distribution in the Huasteca Potosina. In this region, anthropogenic activities such as fire forestfires, the change in land use and the illegal cutting of trees together with the removal of large numbers of plants for the illegal sale, this has caused serious damage in the number of wild orchid populations. A biotechnology alternative for the conservation of mexican orchids is the use of techniques such as Plant Tissue Culture as micropropagation. The aim was to analyze the effect of regulatory growth phytohormone 2-6- δ -benzilaminopurine (BAP) in the morphogenetic plant response. The effect of BAP in the formation of new shoots and roots was evaluated. Were used as explants seedlings of three months old germinated in vitro in the laboratory of Environmental Sciences at the U.A.S.L.P. – U.A.M.Z.H. which they were cultured in a new medium supplemented with BAP (0, 2.5, 5 y 10 mg L⁻¹) and coconut water (0.03 mL L⁻¹). Oxidation and contamination rate and the number of shoots, the height, the number and length of roots was evaluated for three periods of 90 days each. A low rate of oxidation was showed. The formation of 14.5 ± 1 new bunds in the media with 10 mg L⁻¹ BAP and 0.03 mL L⁻¹ of coconut water was observed, treatment was also effective in stimulating the formation of the root system. The synchrotron light allows observation of inaccessible spaces for visible light, so that could be taken into account to study the organic chemical process and determine the exact location of this hormone in the plant tissue *L. anceps* Lindl. subsp. *anceps* and obtain high resolution images of different morphogenetic stages, also locating the interaction of BAP at the cellular level.

Posters I / 64

EFFECTO DEL HONGO *Trichoderma harzianum* EN EL ENRAIZAMIENTO Y PREACLIAMACIÓN DE LA ORQUÍDEA *Euchile mariae*

Prof. VITE ORTA, RITZY GUADALUPE¹; Prof. SUSTAITA CERVANTES, Raquel¹

¹ Unidad Académica Multidisciplinaria Zona Huasteca; Universidad Autónoma de San Luis Potosí

Corresponding Author: ritzy3006@gmail.com

La orquídea *Euchile mariae* es una de las especies mexicanas más conocidas en horticultura y es una de las más apreciadas en el país. La dificultad que presentan las semillas para germinar, la necesidad de un polinizador, así como el saqueo ilegal han ocasionado que esta orquídea se encuentre en la lista de amenaza de extinción según la NOM-059-SEMARNAT-2010, esto indica la importancia y necesidad de establecer estrategias eficientes para la micropropagación y conservación de ésta especie. Una alternativa biotecnológica es el Cultivo de Tejidos Vegetales, ya que ofrece una serie de sistemas modelo ideales para la investigación fisiológica, genética y estructural, además de tener una aplicación práctica en la clonación, conservación y manipulación in vitro de cualquier material vegetal. El objetivo de este trabajo fue establecer las condiciones óptimas para la multiplicación y enraizamiento simbiótico con el hongo *Trichoderma harzianum* y con ello favorecer la sobrevivencia de las plántulas al medio ambiente. Este microorganismo por ser un hongo endófito brinda protección a la planta frente a ataques de patógenos, ya sea por metabolitos secundarios o por el mejoramiento en la nutrición a través de la disponibilidad de los nutrientes. Para ello fue necesario cultivar el hongo en caldo papa dextrosa durante 8 días en una agitación constante de 2000 rpm a una temperatura de 25° C, obteniendo el metabolito final del hongo, el cual se homogenizo con medio MS y sacarosa en una concentración de 1% y se agrego a distintos tratamientos con ácido indol-3-acético a diferentes concentraciones (0.5 y 1 mg L⁻¹). La aplicación de la luz sincrotrón en este trabajo radica en la necesidad de conocer la estructura del metabolito producido por el hongo *Trichoderma harzianum* así como la asimilación de nutrientes en la orquídea manifestada en cambios morfológicos de las raíces de la planta.

Posters I / 67

Análisis estructural de proteasas de organismos marinos, utilizando como modelo la catepsina D1 de langosta americana.

Mr. RODRÍGUEZ SIORDIA, Iván¹; Dr. ROJO ARREOLA, Liliana¹; Mr. GARCÍA CARREÑO, Fernando¹

¹ Centro de Investigaciones Biológicas del Noreste

Corresponding Author: ivars_919@hotmail.com

Debido a su relevancia biotecnológica, diversas proteasas de origen marino han sido descritas desde el punto de vista bioquímico y fisiológico, buscando explicar los procesos que catalizan, para asignarles una aplicación industrial. Las proteasas de organismos marinos se caracterizan por presentar adaptaciones estructurales que les permiten efectuar procesos proteolíticos en las diversas condiciones del medio marino, que pueden llegar a ser extremas en términos de temperatura y presión. La mayoría de los reportes tienen como objeto de estudio a proteasas de microorganismos, buscando entender los mecanismos bioquímicos y las propiedades estructurales que presentan estas proteasas. El medio marino es extremadamente diverso y organismos de otros taxa también presentan proteasas con características sobresalientes que sugieren una alta estabilidad conformacional. Actualmente nuestro grupo estudia enzimas digestivas de crustáceos, más específicamente las de langosta americana, *Homarus americanus*; en esta especie se ha demostrado que las proteasas digestivas presentan hasta 20 veces mayor eficiencia catalítica en comparación con enzimas homólogas de vertebrados. Una de ellas es la catepsina D1 (CD1), la cual ha sido estudiada desde un punto de vista bioquímico, termodinámico y de especificidad por sustrato, se sabe que esta enzima marina comparte especificidad (por residuos hidrofóbicos principalmente) con sus homólogos bovino y porcino, sin embargo, en su estructura primaria presenta menos de 50% de identidad, lo que podría explicar las diferencias en las características bioquímicas y termodinámicas, pues la CD1 presenta una mayor eficiencia catalítica que sus homólogos en un amplio rango de temperaturas (5 - 50 °C), por lo que se ha catalogado como una enzima adaptada al frío. Actualmente se estudia la estabilidad conformacional de la CD1 expuesta a diferentes condiciones de temperatura, pH, concentración de agentes caotrópicos y solventes, utilizando fluorescencia intrínseca y espectro de dicroísmo circular, con el fin de explorar una posible aplicación en la industria. Expresado lo anterior, nuestra participación conjunta con usuarios del Sincrotrón, nos ayudaría a explorar la posibilidad y condiciones experimentales para obtener la estructura de la CD1 por medios cristalográficos y así expandir el conocimiento de enzimas marinas, así como, los mecanismos estructurales que le permiten mantener su actividad catalítica, aún en ambientes extremos.

Posters I / 68

Crystallographic studies of DNA ligase from *Thermococcus gammatolerans*.

Ms. FLORES HERNÁNDEZ, Edith ¹

¹ IBT-UAEM

Corresponding Author: eflores@ibt.unam.mx

DNA ligases are ubiquitous proteins involved in cellular processes such as replication, repair and recombination of DNA. These enzymes catalyze the formation of a phosphodiester bond between adjacent 5'-phosphate and 3'-hydroxyl termini at single-stranded breaks in double-stranded DNA. DNA ligases from thermophilic and hyperthermophilic archaea have been used as model systems in structural and mechanistic studies of DNA ligation. In this project we worked with the radioresistant archaeon, *Thermococcus gammatolerans*, which was isolated after an exposure to a gamma irradiation dose of 30 kGy from enriched culture of microorganisms collected at the Guaymas, Sonora basin. As its name suggests, this organism can withstand a dose of 3000 Gy without apparent lethality and an exposure to higher doses only slightly reduces its viability. These data indicate that *T. gammatolerans* is the most radioresistant archeon isolated thus far, offering the chance to determine how archaeal species recover from extensive DNA damage after exposure to a massive radiation dose. The most widely used technique to elucidate the structure of a protein is X-ray diffraction. Therefore experiments of purification, crystallization and structural determination of *T. gammatolerans* is an appropriate strategy for atomically describe this enzyme. This project is framed in the search of DNA repair factors that must exist in *T. gammatolerans*. DNA ligase from the archeon *T. gammatolerans* was overexpressed, purified and crystallized.

Posters I / 72

CARACTERIZACIÓN DE FERRITINA EN SUERO SANGUÍNEO: ESTUDIO ESPECTROSCÓPICO

Mr. RUVACABA, Juan Manuel ¹; Dr. CÓRDOVA, Teodoro ¹; Dr. DE LA ROSA, María Guadalupe ¹

¹ Universidad de Guanajuato

Corresponding Author: ruvalcabalj2011@licifug.ugto.mx

La ferritina es una proteína de almacenamiento de hierro, presenta una forma movilizable como ferritina y hemosiderina como una fracción insoluble, importante para diferentes procesos bioquímicos en el cuerpo humano. Este trabajo se centra en la identificación y caracterización de esta biomolécula por medio de espectroscopia Raman en suero sanguíneo. Se extrajo sangre de pacientes sanos y se centrifugó para generar el suero sanguíneo, posteriormente se realizó el análisis por espectroscopia Raman. Los resultados obtenidos mediante microscopia se adquirieron explorando 9 espectros de una sección de la muestra realizando un mapeo, primero encontrando el espectro del suero sanguíneo para después buscar la presencia de ferritina localizando las bandas características situados en el rango de 200-1000 cm⁻¹. Así, existiendo una estrecha relación entre el tamaño de los depósitos de hierro en el cuerpo y la concentración de ferritina en el plasma, se puede relacionar los niveles de ferritina con diferentes padecimientos hematológicos. Por la mayor precisión que presenta la radiación sincrotrón sobre la información estructural se puede usar esta técnica en la caracterización de la ferritina en suero sanguíneo ya que la concentración de esta proteína es muy baja y así realizar un estudio más completo.

Posters I / 81

REDUCTION OF THE ACTIVE SITE OF BOVINE LIVER CATALASE WITH X-RAY

Dr. RUDIÑO, Enrique¹; Mr. GÓMEZ, Osvaldo²

¹ IBT. UNAM

² IBT.UNAM

Corresponding Author: ogs@ibt.unam.mx

Bovine liver catalase (BLC) is an homotetrameric enzyme that catalyzes the dismutation of hydrogen peroxide, producing two water molecules and one oxygen molecule. This enzyme belongs to clade 3 monofunctional catalases that depends on an heme group per subunit (small subunit catalases). The objective of this project is getting the crystallographic structure of compound I and analyze the reduction of the active site with increasing X ray doses. Because BLC is a tetrameric enzyme, it can be compared the susceptibility of reduction among the four active sites. We can compare this process of the active site reduction with a large subunit catalase. For this purpose, the BLC crystals were soaking on peracetic acid, producing the compound I. The crystals of compound I were collected at synchrotron. The four monomerers do not show the same behavior with increasing X ray doses.

Posters I / 87

Crystallographic structure of Proliferating Cell Nuclear Antigen from radioresistant archaeon, *Thermococcus gammatolerans*

Mr. VENANCIO-LANDEROS, Alberto-Antony¹; Dr. RUDINO-PINERA, Enrique¹; Dr. CARDONA-FELIX, Cesar-Salvador²

¹ IBt-UNAM

² CICIMAR

Corresponding Author: antony@ibt.unam.mx

Thermococcus gammatolerans is a strictly anaerobic; hyperthermophilic archaeon belongs to the order Thermococcales in the phylum Euryarchaeota. It was extracted from a hydrothermal vent from the Guaymas Basin (Gulf of California, Mexico). Different studies show that *T. gammatolerans* is one of the most radioresistant organisms known amongst the archaea. This makes it a unique model to study adaptations to the environment and to study DNA repair mechanisms in an organism able to tolerate harsh conditions. A key protein in these mechanisms is the Proliferation Cell Nuclear Antigen (PCNA). Its function is focused on their ability to slide along the DNA duplex and coordinating the activities of proteins mainly related to DNA edition and processing. Analysis of archaeal proteins have proven to be enormously fruitful, because much of the information obtained from them can be extrapolated to eukaryotic systems, and PCNA is no exception. Here we report the cloning, recombinant expression, crystallization and structure determination of PCNA from *T. gammatolerans* (TgPCNA).

Posters I / 93

Crystal structure of pig kidney Fructose 1,6-biphosphatase with sulfate has a quaternary state between the canonical R- and T-states.

Dr. DÍAZ, Adelaida¹; Dr. RUDIÑO-PIÑERA, Enrique¹

¹ Instituto de Biotecnología, UNAM

Corresponding Author: adelaida@ibt.unam.mx

Fructose 1,6-biphosphatase (FBPase) governs a key step in gluconeogenesis. Catalyzes the hydrolysis of fructose 1,6-biphosphate to fructose 6-phosphate and inorganic phosphate in presence of divalent cations such as Mg²⁺ or Mn²⁺. In mammals, AMP and fructose 2,6-biphosphate (Fru-2,6-P₂) synergistically inhibit FBPase. Fru-2,6-P₂, the concentration of which is subject to hormonal control, directly inhibits FBPase by binding to its active site, whereas AMP binds to an allosteric site and induces a conformational change, converting the enzyme from an active quaternary conformation (R-state) to an inactive form (T-state).

FBPase has been a target for potential drugs in the treatment of Type II diabetes. Novel inhibitors have been developed, and in one case, knowledge of structure and mechanism contributed to the rational design of a new inhibitor.

Here, we report the crystal structure of pig kidney FBPase in complex with sulfate ions. The three-dimensional structure has been determined by molecular replacement method. Pig kidney FBPase crystallized in the cubic space group I23 with two subunits of the tetramer in the asymmetric unit. The structure contains several sulfate ions. In the active site of each subunit there are three sulfates, one of them found at the position normally occupied by the 6-phosphate group of the substrate. Other sulfate is present at the phosphate place of the allosteric inhibitor AMP. The fifth sulfate is on the crystallographic 2-fold axis that relates subunits C1 and C2 (and subunits C3 and C4). Although a sulfate bound at the C1-C4 interface was not found, a difference with respect *Escherichia coli* FBPase-SO₄ complex. However, the binding of sulfate anions to porcine FBPase generates a conformational change in quaternary state of the enzyme, a rotation of C1-C2 subunit pair respect to the C3-C4 subunit pair about the vertical 2-fold axis. FBPase rotates about 6 degrees from the R-state, then the enzyme is in an intermediate quaternary state relative to the canonical R- and T-state. This results suggest a role of sulfate in FBPase activation.

Posters I / 98

Análisis de exposición a benceno en población infantil de Salamanca, Guanajuato.

Mr. FERNÁNDEZ HERNÁNDEZ, Ricardo Omar ¹; Mr. ENCISO DONIS, Israel ¹; Ms. MEDEL BARAJAS, Marisol ¹; Ms. DURAN MENDOZA, Fatima del Carmen ¹; Dr. CRUZ JIMÉNEZ, Gustavo ¹; Dr. COSTILLA SALAZAR, Rogelio ¹; Dr. ROCHA AMADOR, Diana Olivia ¹

¹Universidad de Guanajuato

Corresponding Author: ricardoofh@gmail.com

El municipio de Salamanca, Guanajuato y sus alrededores, han sido uno de los ejes de desarrollo industrial más importantes del país en los últimos cincuenta años. La instalación de industrias, el aumento del parque vehicular y de las zonas deforestadas han propiciado diversos problemas de contaminación, siendo el atmosférico uno de los de mayor relevancia. En el municipio existen industrias que por sus procesos liberan una cantidad considerable de contaminantes al ambiente, entre estos contaminantes se encuentra el benceno. El benceno, es un compuesto que puede ser utilizado en la producción de lubricantes, detergentes, drogas y pesticidas, así como un aditivo en la gasolina sin plomo. Se ha demostrado que la exposición al benceno por largos periodos de tiempo puede causar daño al tejido hematopoyético, especialmente en la médula ósea, además, está relacionada con el desarrollo de un particular tipo de leucemia llamada, leucemia mieloide aguda (LMA). En este trabajo, se realizó la evaluación de la exposición a benceno en población infantil de entre 6 y 12 años en cuatro primarias del municipio de Salamanca, por medio de la determinación de la concentración de ácido trans, trans-mucónico en muestras de orina por HPLC-UV. Se analizaron 66 muestras manteniendo el mismo porcentaje entre niños y niñas, y los resultados obtenidos arrojan que el 72.73 % de las muestras analizadas se encuentran dentro de los rangos de concentración esperados para zonas rurales y zonas urbanas según la categorización usada por Pelallo Martínez et. al. en el 2014, mientras que el 16.67 % corresponde a los límites máximos permitidos para exposición ocupacional en México y el 10.60 % se encuentran por encima de los límites permisibles, lo cual representa un foco de alerta ya que se esperaría que el 100 % de la población se encontrara en la primeras dos categorías mencionadas.

Posters I / 59

EVALUACIÓN DEL EFECTO GENOTÓXICO DURANTE LA FITOEXTRACCIÓN DE Pb POR *Typha latifolia* (Espadaña)”

Ms. PONCE ALONSO, Julieta¹; Dr. CARRANZA ALVAREZ, Candy¹; Prof. HERNÁNDEZ BENAVIDES, Diego Manuel²

¹ Universidad Autónoma de San Luis Potosí-Unidad Académica Multidisciplinaria Zona Huasteca

² Universidad Autónoma de San Luis Potosí-Unidad Académica Multidisciplinaria Zona Huasteca

Corresponding Author: julieta.ponce94@hotmail.com

The aquatic macrophyte *Typha latifolia* (cattail) has the required characteristics to be used in phytoremediation because of its rapid growth, easy spreading and harvesting. Previous studies indicated *T. latifolia* has the ability to remove (in situ and ex situ) and accumulate Cd, Pb, Cr, As, Mn y Fe. However, although the information reported phytoremediation capacity of this plant species, still unknown the possible adverse effects associated with exposure to toxic elements and level of possible damage at the molecular level in this species. Therefore, a study was developed for the isolation of nuclei from young root of *Typha latifolia* for their subsequent evaluation at the molecular level. Plants of *T. latifolia* were collected from ponds not previously contaminated with metals (Valles, S.L.P. and San Luis Potosí, S.L.P). To the isolation of nuclei it was used principals roots (rhizomes) and secondary roots of plants, and three solutions, (PBS phosphate buffered saline, PBS phosphate buffered saline 1:1 and Tris-MgCl₂). The most efficient solution to the isolation of nuclei was Tris-MgCl₂ buffer, because by observing in a bright-field microscope using this buffer solution, it was found that the isolated nuclei were more abundant than those obtained with other buffer solutions used. Subsequently, preliminary tests of alkaline comet assay to assess DNA fragmentation were performed. It was subsequently implemented the alkaline comet assay technique to evaluate the DNA fragmentation. The results showed that the best tissue for isolation of nuclei were apical *Typha latifolia* roots. Although still genotoxic damage was not evaluated in this plant species, it was possible to standardize the technique to the isolation of nuclei. Considering that synchrotron light permits detailed observation of nature complicated spaces that are inaccessible to observe with the visible light, there is interest in using the synchrotron light as in the scope of microscopy, this type of light provides high resolution images of cells into more detailed conditions than those offered by conventional techniques. This would help to further the study of the composition of the root cells of *T. latifolia*. Furthermore, the use of synchrotron light could know the exact location of the heavy metals in the tissues (root and aerial) of plant. With the results of this research was generated new scientific knowledge to continue with the evaluation of genotoxic damage from exposure to lead from this plant species.

Posters I / 94

Determinación de los biomarcadores de benceno, tolueno y xileno en niños residentes en Tula de Allende, Hidalgo

Ms. DURÁN MENDOZA, Fátima del Carmen¹; Mr. ENCISO DONIS, Israel²; Dr. ROCHA-AMADOR, Diana Olivia³; Dr. CRUZ-JIMENEZ, Gustavo³; Dr. PELALLO-MARTÍNEZ, Nadia Azenet⁴

¹ 0109

² 0046

³ Universidad de Guanajuato

⁴ Universidad del Centro de México

Corresponding Author: fatimaepl87@hotmail.com

El municipio de Tula de Allende, Hidalgo, es de gran relevancia para su estado así como para los alrededores debido a las empresas que se han instalado en él. Dentro de estas empresas se encuentran la Refinería Miguel Hidalgo, las Cementeras Cooperativa La Cruz Azul y CEMEX, así como la Termoeléctrica Francisco Pérez Ríos. En conjunto, estas empresas coinciden en la emisión de benceno y tolueno, compuestos que se encuentran de manera natural en el petróleo, y son liberados al ambiente durante su proceso de manufactura causando efectos adversos en las poblaciones aledañas.

El benceno es un compuesto químico incoloro que posee un olor dulce y es muy volátil. La generación de este compuesto puede darse de manera natural, así como de manera industrial al ser utilizado en la manufactura de otros compuestos o de manera involuntaria en algunos procesos como: la transformación del petróleo, en escapes de automóviles, fugas de gas, en el humo del cigarro, al igual que por combustión incompleta de materia orgánica. Por otro lado, las afectaciones a la salud a causa de este compuesto varían dependiendo de los niveles y el tiempo de exposición, encontrándose problemas desde mareos, náuseas, dolores de cabeza, convulsiones hasta casos más graves con alteraciones en la sangre y cáncer (ATSDR, 2007, IARC, 2012).

El tolueno, es un compuesto incoloro con olor característico que se encuentra de manera natural en el petróleo crudo. Este compuesto se produce durante el proceso de manufactura de gasolina y otros combustibles, en la elaboración de coque a partir de carbón, así como subproducto del estireno, humo del cigarro y al igual que el benceno es generado en la combustión incompleta de materia orgánica. Las afectaciones a la salud que trae consigo este compuesto por la exposición a él, pueden ir desde mareos, confusión, depresión, dolor de cabeza, hasta llegar a afectaciones en el sistema nervioso central (ATSDR, 2000).

Por otra parte, el xileno es un compuesto incoloro, de olor dulce y muy inflamable. El xileno se encuentra de manera natural en el petróleo crudo y se produce durante los incendios forestales. Es principalmente usado como solvente y en pinturas, se encuentra en pequeñas cantidades en los combustibles como la gasolina. El xileno afecta a la salud presentando irritación de ojos, piel y garganta, dificultad para respirar y afecciones en el hígado y los riñones. (ATSDR, 2007)

En este estudio se realizó un monitoreo de los metabolitos del benceno, el ácido trans, trans-mucónico (AttM), tolueno, el ácido hipúrico (AH) y xileno, el ácido 3-metil-hipúrico (A3MH), en orina como biomarcadores de exposición. Se evaluaron niños de edades entre 6-12 años de zonas aledañas. La determinación de los metabolitos se realizó mediante la técnica de HPLC-UV utilizando modificaciones a las metodologías de Ducos et al. para AttM y NIOSH para AH y A3MH. Para el control de calidad de dichas metodologías se utilizó un Clin-Check RECIPÉ® obteniendo un 85.13%, 92.3% y de 102.6% de recobro para AttM, AH y A3MH respectivamente.

Como resultado para el AttM la población analizada presentó un porcentaje de 20.63% de los niños con niveles superiores a los marcados en la NOM-047-SSA-2011 (500 µg/g de creatinina, exposición ocupacional) para benceno lo que resulta de relevancia. Además el 69.84% de ésta población se encuentra por encima de los niveles encontrados en zonas urbanas (170 µg/g de creatinina). Por otro lado, para el análisis del AH y el A3MH, se obtuvieron en todas las muestras niveles bajos correspondientes a individuos no fumadores y no expuestos. Todos los resultados se compararon con una población control del municipio de Irapuato, Gto., la cual, no se encuentra expuesta a ninguna de las fuentes de estos compuestos.

Posters I / 97

Determinación de Compuestos Orgánicos Persistentes en población infantil procedente del municipio de Salamanca, Gto.

Dr. CRUZ JIMÉNEZ, Gustavo ¹; Dr. ROCHA AMADOR, Diana Olivia ¹; Mr. ENCISO DONIS, Israel ¹; Mr. FERNÁNDEZ HERNÁNDEZ, Ricardo ¹; Ms. LÓPEZ RIVERA, Carolina ²; Dr. COSTILLA SALAZAR, Rogelio ¹

¹ Universidad de Guanajuato

² Universida Juarez del Estado de Durango

Corresponding Author: nata3434@hotmail.com

Los Contaminantes Orgánicos Persistentes (COPs), en su mayoría son productos químicos a base de carbono y cloro, provenientes principalmente de origen sintético o como subproductos no intencionados resultantes de la combustión y de algunos procesos industriales. Los COPs son conocidos por: 1) presentar un alto grado de toxicidad, 2) permanecer en el ambiente años o décadas sin alterarse o degradarse, 3) viajar grandes distancias a través de aire y agua, llegando a encontrándose en lugares donde nunca han sido utilizados y 4) acumularse en los tejidos grasos de los organismos vivos incluyendo al ser humano. Los efectos de los COPs pueden ser muy sutiles y desencadenarse a bajas concentraciones, presentándose después de varios años de la exposición y llegando en ocasiones a presentarse en las subsecuentes generaciones. Entre los potenciales efectos nocivos de estos contaminantes para la salud se encuentran: cáncer, alteraciones en el comportamiento neuronal, alteraciones en el sistema inmune y deficiencias reproductivas, entre otros. Los problemas generados por los COPs han ocasionado su prohibición y/o restricción en muchos países además de la implementación de acciones internacionales como es el caso del Convenio de Estocolmo. En este estudio se realizó una evaluación del nivel de exposición en niños procedentes del municipio de Salamanca, Guanajuato, a este tipo de contaminantes, debido a que en dicho municipio existe como pasivo ambiental una industria dedicada a la fabricación y distribución de estos compuestos. En el estudio se realizó un análisis de 13 COPs en 27 niños del municipio de Salamanca, en el cual, se encontró que el único compuesto que no presentaron fue el 4,4-DDE (metabolito del 4,4-DDT), sin embargo, las concentraciones para los demás compuestos evaluados van desde el más mínimo 66.50 ng.g-1 de grasa para el Dieldrín, mientras que la máxima concentración encontrada fue de 5012.72 ng.g-1 para el Heptacloro, concentraciones de gran preocupación por los efectos adversos que traen consigo a largo plazo, por lo que se realizará un análisis completo de los datos obtenidos posteriormente así como un estudio más amplio.

Posters I / 73

Scavengers and pH: two approaches to reduce radiation damage on protein crystalline samples.

MURPHY PEREZ, Francisco¹; Dr. ENRIQUE, Rudiño-Piñera²

¹UNAM

²Instituto de Biotecnología, UNAM

Corresponding Author: murphy@ibt.unam.mx

Macromolecular X-ray crystallography is the experimental technique which allows to obtain atomic-detailed structural models of macromolecules in crystalline state. Radiation damage is an inherent problem in this technique. The consequences of radiation damage can be from obtaining models with altered atoms, incomplete amino acid residues, or even no model at all. In this work we analyzed two strategies to deal with radiation damage, specifically in the breaking of disulfide bonds, using hen egg white lysozyme (HEWL) crystals as a model. Both strategies attempt to eliminate the effects of the solvated electrons, one of the first free radicals generated within the macromolecular crystal. The first strategy was the use of complex molecules with heavy atoms as electron scavengers and the second strategy was the change in the pH of the crystallization solution, allowing hydrated electrons to react with protons. Our results suggest that the molecules evaluated here do not protect HEWL crystals from radiation damage. On the other hand the change in pH shows some preliminary positive results which need to be further analysed.

Wednesday III / 99

Momentum Resolved Resonant Inelastic X-Ray Scattering on Correlated Electron Materials

Dr. SCHMITT, Thorsten¹

¹ Paul Scherrer Institute

Corresponding Author: thorsten.schmitt@psi.ch

Resonant Inelastic X-ray Scattering (RIXS) is a powerful probe of excitations from the electronic ground state of correlated materials involving lattice, charge, orbital and spin degrees of freedom. The experimental development of the RIXS technique in the soft X-ray energy range has been tremendous during the last years. Several instruments at synchrotron radiation sources world-wide have recently boosted the scientific capabilities with soft X-ray RIXS. The ADRESS beamline of the Swiss Light Source at the Paul Scherrer Institut and its RIXS spectrometer SAXES have increased the resolving power for the incident and the outgoing X-ray beam to above 10'000. Such an extremely high spectral resolution and the possibility to rotate the spectrometer to different scattering geometries allows for analysing the collective behavior of charge, orbital and spin excitations by assessing their momentum dependence.

In this talk we illustrate the scientific capabilities of momentum resolved soft X-ray RIXS on correlated electron materials in investigations on quasi-one dimensional cuprates, cuprate- and iron pnictide superconductors as well as oxide heterostructures. We observed dispersive orbital excitations, „orbitons“, in the spin chain compound Sr₂CuO₃, which are related to the separation of the spin and orbital degree of freedom [1]. In hole and electron doped cuprate superconductors (para)-magnon excitations persist across the whole phase diagram. Novel collective modes in Nd_{2-x}Ce_xCuO₄ are indicative for the presence of a symmetry-broken state and the occurrence of a quantum critical point in the superconducting dome of this cuprate [2]. Persistence of dispersing high-energy spin excitations throughout the whole phase diagram in hole- and electron doped BaFe₂As₂ reveals the presence of doping-independent fluctuating magnetic moments in iron pnictides [3]. RIXS on LaAlO₃ / SrTiO₃ superlattices is probing the localized and delocalized Ti 3d electrons as well as the orbital reconstruction at the interface of these oxide heterostructures. [4]

References:

- [1] Spin-orbital separation in the quasi-one-dimensional Mott insulator Sr₂CuO₃, J. Schlappa, K. Wohlfeld, K. J. Zhou, M. Mourigal, M. W. Haverkort, V. N. Strocov, L. Hozoi, C. Monney, S. Nishimoto, S. Singh, A. Revcolevschi, J.-S. Caux, L. Patthey, H. M. Rønnow, J. van den Brink, and T. Schmitt, *Nature* 485, 82–85 (2012), doi:10.1038/nature10974.
- [2] Asymmetry of collective excitations in electron and hole doped cuprate superconductors, W. S. Lee, J. J. Lee, E. A. Nowadnick, W. Tabis, S. W. Huang, V.N. Strocov, E. M. Motoyama, G. Yu, B. Moritz, M. Greven, T. Schmitt, Z. X. Shen, T. P. Devereaux, *Nature Physics* 10, 883–889 (2014); DOI: 10.1038/nphys3117.
- [3] Persistent high-energy spin excitations in iron pnictide superconductors, Ke-Jin Zhou, Yao-Bo Huang, Claude Monney, Xi Dai, Vladimir N. Strocov, Nan-Lin Wang, Zhi-Guo Chen, Chenglin Zhang, Pengcheng Dai, Luc Patthey, Jeroen van den Brink, Hong Ding, Thorsten Schmitt, *Nature Communications* 4, Article number 1470 (2013), doi: 10.1038/ncomms2428.
- [4] Localized and delocalized Ti 3d carriers in LaAlO₃/SrTiO₃ superlattices revealed by resonant inelastic x-ray scattering, Kejin Zhou, Milan Radovic, Justine Schlappa, Vladimir Strocov, Ruggero Frison, Joel Mesot, Luc Patthey, and Thorsten Schmitt, *Phys. Rev. B* 83, 201402(R) (2011).

Wednesday III / 39

As and Cu speciation in mine tailings using synchrotron radiation

Prof. LOREDO-PORTALES, Rene ¹; Dr. CRUZ-JIMÉNEZ, Rene ¹; Dr. CASTILLO-MICHEL, Rene ²; Dr. AQUILANTI, Giuliana ³; Dr. DE LA ROSA-ALVAREZ, Guadalupe ¹

¹ Universidad de Guanajuato

² European Synchrotron Radiation Facility

³ Elettra Sincrotrone Trieste

Corresponding Author: r.loredoportales@outlook.com

Potentially toxic elements are usually present in mine tailings in concentrations that may threaten environmental and human health. In this research, mine tailings and soils from “La Aurora”, an abandoned mine, were studied in order to determine As and Cu speciation and understand its mobility in the environment. For this purpose, a combination of sequential chemical extractions (SEP), Flame Atomic Absorption Spectroscopy (FAAS), and X-ray synchrotron techniques (XAS) was used. This mining site is located in Xichu, Mexico and resides in a natural protected area that is recognized for its high biodiversity, biological resources and the existence of some endangered species. This site was exploited principally for Ag, Cu, Zn and Pb until the last cycle in 1957. Our results showed that mine tailings contains As, Pb, Cu and Zn up to 12485, 8760, 1400 and 6668 mg·kg⁻¹, respectively.

We established 13 sampling points in mine tailings and 7 in soils nearby. Surface samples as well as 30 cm depth composites were taken at each point. Samples were dried at 500C and sieved to obtain particle sizes <0.25 mm and <0.85 mm. Elemental content analysis were performed by FAAS and X-ray Fluorescence (XRF) for validation purposes. Both methods yield similar results for Cu and As content. Cu is present in mine tailings and soils in a range between 142±19 and 1400±92 mg·kg⁻¹ and 22±2 and 88±5 mg·kg⁻¹, respectively. Repartition of Cu in mine tailings determined by SEP followed this general trend Water soluble > Residual > Organic Bound > Exchangeable > Fe-Mn-Oxides > Carbonate; and in soils as Residual > Organic Bound > Fe-Mn oxides > Carbonate > Water > Exchangeable. X-ray Absorption Near Edge Spectroscopy (XANES) linear combinations fits (LCF), showed Cu is present as Cu 2+ highly mobile species and in minor proportion as Cu+ species as oxides and sulphides. Cu content in mine tailings is available for plants and bioaccessible with percentages around 90% in almost all the points tested.

Arsenic was detected in mine tailings and soils in a range between 3140±302 and 12485±398 mg·kg⁻¹ and 209±10 and 327±10 mg·kg⁻¹, respectively. Repartition of As determined by SEP followed this general trend in mine tailings Crystalline Fe-Oxides > Residual > Exchangeable > Amorphous Fe-Oxides > Specifically sorbed; and in soil as Crystalline Fe-Oxides > Amorphous Fe-Oxides > Exchangeable > Residual > Specifically sorbed. XANES LCFs showed that As is present as a secondary arsenate mineral of similar structure to kankite (FeAsO₄·3.5H₂O) and beudantite (PbFe₃(AsO₄)(OH)₆). These results suggest that As is forming low soluble species and just a minor fraction is susceptible of mobilization. As fitoaccessible in mine tailings showed percentages between 3-22% and bioaccessible between 4-14%, in soils As fito and bioaccessible showed values around 20%. Extended X-ray Absorption Fine Structure (EXAFS) confirmed the structure of iron arsenate compounds as kankite and beudantite that share the tetrahedral structure AsO₄, corresponding to a single scattering of four oxygen atoms at 1.679 Å and a contribution of three Fe atoms at 3.389 Å.

Our results provide evidence of natural attenuation of As but the fraction available is still enough to generate a negative impact in the local environment. Cu is present in high soluble species and almost all Cu content is available for plants in addition in soils only insoluble species are retained, this support its high mobility in the surrounding environment.

Thursday I / 82

Synchrotron Radiation in Molecular Taphonomy and Paleobiology

Dr. RIQUELME, Francisco ¹

¹ Universidad Autonoma del Estado de Morelos

Corresponding Author: francisco.riquelme@uaem.mx

The fossilization of organic inclusions –animals, plants and microorganisms- in amber is one of the most complex selective preservation processes from geological deposits. Amber fossils show complete morphologies and structurally almost intact tissues. Amber is a fossilized plant resin with a polymeric microfabric and indeterminate semicrystalline phases associated with the fossilization mechanism. In this contribution, a combined high-resolution microscopy and spectroscopies using Synchrotron-based techniques have been adapted to the ultrastructural and compositional study of amber, as was the morphologies and tissues of terrestrial arthropods trapped within it. To address questions regarding the botanical source of amber and taxonomic identity and biology of ancient organic inclusions, Infrared and X-ray micro-spectroscopies have been applied, such as μ -FTIR, μ -XRF, PIXE and XANES.

Thursday I / 88

X-ray absorption Near Edge spectroscopy applied to the study of local atomic structure of ions in solution, e.g., Arsenic.

Prof. MUSTRE, José ¹; Dr. CANCHE-TELLO, Jesús ¹; Dr. VARGAS, María Cristina ¹; Dr. DEN AUWER, Christophe ²; Dr. ORTEGA BLAKE, Iván ³; Dr. HERNÁNDEZ COBOS, Jorge ³

¹ CINVESTAV

² Nice Chemistry Institute, Universite Nice-Sofia Antipolis

³ Instituto de Ciencias Físicas, UNAM

Corresponding Author: mustre@cinvestav.mx

We performed x-ray absorption spectroscopy measurements on the Arsenic K-edge of As(III) in solution under acidic conditions. X-ray near edge structure (XANES) spectra were compared with theoretical calculations which use local atomic structure configurations, derived from either density functional theory (DFT) energy minimization (EM) calculations, or based on classical Monte Carlo (MC) simulations, for a As(OH)₃ cluster surrounded by water molecules. Calculations of XANES using either DFT-EM or the average configuration obtained from MC simulations do not reproduce the XANES spectra in the vicinity of the absorption edge. However, specific local atomic structural configurations of the As(OH)₃ and water molecules, obtained from MC simulations, which show ordering of water molecules up to 5 Å from the arsenic, reproduce qualitatively the experimental spectra. These results highlight the capability of XANES to yield information about hydration of ions in solution.

Thursday I / 83

The Upgrade of the ESRF: The next step in the development of storage ring based X-ray sources.

Dr. REICHERT, Harald ¹

¹ ESRF

Corresponding Author: reichert@esrf.fr

The European Synchrotron Radiation Facility is Europe's premier hard X-ray synchrotron radiation source providing 45 experimental stations for scientists from its member and associate countries. The facility is currently engaged in an ambitious upgrade program (2009-2022) covering all aspects of the facility: photon production, experimental facilities for users, user service, and X-ray technology development.

The upgrade benefits all areas of X-ray applications: Imaging, Spectroscopy, and Diffraction. By the end of 2015 19 new or upgraded beamlines (Phase I of the upgrade program) provide new opportunities for the study of materials with probing beams down to the nanometer scale. Selected examples will be used to demonstrate first results from the ongoing upgrade.

In parallel we have started work on Phase II of the upgrade program focusing on a major upgrade of the storage ring with the goal to reduce the horizontal emittance by at least a factor of 40. This will create the first low emittance, high energy storage ring with unprecedented performance. The associated linear increase in brilliance and coherence caters for new applications of X-rays for the study of soft and hard condensed matter. Current planning aims for a start of operations of the new storage ring in 2020.

Thursday I / 48

In-house X-ray single crystal diffraction as a tool for efficient synchrotron data collection

Prof. SOTELO-MUNDO, Rogério ¹; Dr. ENRIQUE, Rudiño-Piñera ²; Prof. BRIEBA, Luis G. ³; Dr. HERNANDEZ-PAREDES, Javier ⁴; Dr. LOPEZ-ZAVALA, Alonso A. ⁴; Dr. STOJANOFF, Vivian ⁵

¹ CIAD

² Instituto de Biotecnología, UNAM

³ CINVESTAV-Langebio

⁴ Universidad de Sonora

⁵ NSLS-BNL

Corresponding Author: rrs@ciad.mx

The benefits of synchrotron X-ray diffraction experiments are many, but involve traveling and many logistic issues. For macromolecule crystallographers there is a significant risk that the samples taken to the beamline are salts or low-resolution diffracting crystals. Several technologies are available to screen crystals, from simple such as dye exclusion, smashing the crystal, X-ray equipment to diffract directly over the crystal plate, etc. However, availability of a single crystal diffractometer makes a difference in terms of the learning experience and opportunity to collaborate with chemists and biologists as well. CIAD has been awarded a diffractometer with a high-intensity microsource Cu-K α , goniometer with kappa geometry, low temperature system and a CMOS detector. After several months of continuous operation, protein crystals have been diffracted up to 1.6 Å and more than a dozen small molecule structures have been determined. Graduate courses in structural biology (CIAD) and supramolecular chemistry (Universidad de Sonora) will benefit as practical session will be possible. In the near future, the throughput of new macromolecule structures will increase, either from in-house data collection or from optimized crystallization conditions proved to produce good diffracting crystals to be taken to the beamline. Moreover, the area of small molecule and crystal engineering will start as chemists and material scientists have the opportunity to characterize their materials. Therefore, availability of in-house diffraction does not compete with synchrotron data collection, but makes more focused and efficient the scarce beamline time available

Support is acknowledged from an infrastructure grant from CONACYT (México).

Thursday II / 80

Theoretical Studies of the high-pressure ϵ and ζ phases of solid oxygen

Prof. RAMÍREZ SOLÍS, Alejandro ¹

¹ Departamento de Física, Centro de Investigación en Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos

Corresponding Author: alex@uaem.mx

We report systematic periodic DFT studies of the ϵ and ζ phases of solid oxygen between 10 and 140 GPa using several types of exchange-correlation functionals (LDA, GGA, hybrid, and meta-GGA). Enthalpy-driven geometry optimizations with spin-unpolarized periodic DFT are done to study the pressure evolution of the (O₂)₄ unit cell within the experimental C/2m crystal group. At variance with previous studies using GGA functionals and plane wave basis sets, our pressure-dependent structural and energetic results are in excellent agreement with the most refined experimental data when hybrid functionals are used in conjunction with optimized atomic basis sets. The purely enthalpic description is not enough to explain the relative stability of the phases, therefore phononic calculations for both phases are done at 100 GPa. We show that inclusion of entropic and ZPE vibrational effects are crucial to correctly predict the 95-100 GPa phase coexistence region at 298 K. Our results reproduce the discontinuous behavior of the unit cell parameters around the phase transition as well as the evolution of the Raman and Infra-red spectra.

Thursday II / 85

Computing at the service of crystallography

Dr. FUENTES-MONTERO, Luis ¹; PARKHURST, James ¹; Dr. WATERMAN, David ²; Dr. GILDEA, Richard ¹; Dr. GERSTEL, Markus ¹; Dr. WINTER, Graeme ¹; Dr. GWYNDAF, Evans ¹

¹ Diamond Light Source

² STFC Rutherford Appleton Laboratory

Corresponding Author: luis.fuentes-montero@diamond.ac.uk

Diamond Light Source (DLS) is a synchrotron facility conceived for macromolecular crystallography (MX) and biopharmaceutical research as its main purpose. Modern MX experiments are generally implemented as variants of the crystal rotation method, using 2D detectors. 2D diffraction images corresponding to several angular positions are collected at a rate of one scan every five seconds. Each scan contains 180 to 720 images of 2463 x 2527 pixels. Before the next shoot, all these images need to be processed nearly in real time. To achieve this DLS has servers with automated parallelized software that are launched automatically with the experiment. When the user launches one diffraction scan, as soon as the experiment finishes the computer connected to the instrument sends a signal and transmits the data to the servers. The servers process the data in a few seconds and return the solved structure to the instrument's computer. In DLS, several software packages are developed to be used in combination with other third party programs to achieve a high level of automation. All software packages developed at DLS with scientific purpose are open source, as it is the best way to produce software by collaboration between academic institutions. The most remarkable software packages developed at DLS are: DAWN - to be used in the instrument as a front end to the user and as a visualization GUI tool; GDA - to connect DAWN with the instrument's firmware or prepackaged program coming with the instruments; DIALS - to process 2D diffraction images, among other third party integration software. Particularly, the DIALS project is a collaborative effort aimed to be "future proof", extensible and reusable package. DIALS is based and depends on the well known CCTBX package. DIALS is being packaged as a large module which is part of CCTBX and also as part of the CCP4 package. The aim of DIALS is not only to be an integration program, but also to be a framework and a toolkit useful for both, users and programmers for developing new algorithms for integrating 2D diffraction images.

Thursday II / 90

Material Science, the industrial case in a synchrotron

Dr. HERNÁNDEZ CRUZ, Daniel ¹

¹Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Chiapas

Corresponding Author: daniel.hernandez@unach.mx

The use of synchrotron light can be extended from basic science to applied science. The high spectral and spatial resolution obtained from the different synchrotron based techniques is the advantage when studying materials, compared to conventional techniques. Therefore, industry can be benefited when applying them to study their products and improve processes, since molecular and atomic interaction can be observed and give insight into how a material is behaving. Here metals, alloys, glass, ceramics, composites, polymers, textiles, proteins, plants, can be studied at a nanoscale level, and observe their morphology, structure and composition. This can complement the results obtained by conventional instrumentation, which will turn into better understanding of the system under study and, its possible improvement. An overview of industrial applications of synchrotron techniques and two practical cases are given

Thursday II / 84

PV solar cells performance using some synchrotron radiation characterization techniques

Dr. SERROUKH, Ibrahim ¹

¹Center for Advanced Diffusion-Wave Technologies, Mechanical and Industrial Engineering, University of Toronto. M5S3GM

Corresponding Author: jimenez@nucleares.unam.mx

Solar Cells, particularly Photovoltaic (PV) based on thin film, monocrystal, polycrystal still dominating the market and attract attentions from the scientific researchers. Making some new areas to grow; such electronics, sensors, biology and so forth. Since the cost of these research become cost effective, it starts to impact in the interested parties from the industry.

The key activities of such research is to improve the energy conversion of solar cells understanding the nanoscale properties of the material, especially in catalysis, storage, and solar cells, such Silicon and Carbon based materials. The physical, mechanical and chemical properties of the material are involved for performance of semiconductor device material.

In this work we focus our approach on three following points:

- First, we would like to show the potential of the state of the art of the Synchrotron Radiation beamline techniques and some knowledge and experience that could help to provide a better solution to the problem.
- Secondly, using this competitive and capacity research, the reliable results could be complementary or reference to validate some conventional laboratories measurement techniques considering the consistency. Lately, such concern try to contribute in solving the lack of reproducible scientific results.
- Thirdly, the work the Synchrotron Radiation techniques will contribute to reveal an insight structural and an electronics view of the PV solar cells device energy conversion. The technique shows the chemical bond and chemical state too in nanoscale structure, its element impurities identification and distribution related to electrical macroscopic scale characteristics of device behaviour, is a unique to solve the complexities of the problem.

Discussion Panel 2 / 34

Things to consider before building a beamline at a light source.

Dr. REICHERT, Harald¹; Dr. SCHMITT, Thorsten²; Dr. STOJANOFF, Vivian³

¹ ESRF

² Paul Scherrer Institute

³ Brookhaven National Laboratory

Corresponding Author: reichert@esrf.fr

Moderator: Guadalupe de la Rosa

Posters II / 42

Electronic structure of cathodes for Li-ion batteries, multi-ferroic materials and iridates investigated by soft X-ray spectroscopies.

Dr. OLALDE - VELASCO, PAUL¹

¹ INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES - UNAM

Corresponding Author: paulolalde@gmail.com

Soft X-ray spectroscopies are nowadays established as primal tools for investigating the electronic and magnetic properties of all kind of materials. In this opportunity I will present three examples where X-ray absorption (XAS), emission (XES) and Resonant Inelastic X-ray Scattering (RIXS) in the soft X-ray regime helped to clarify and understand the electronic structure of $\text{Li}_2\text{Mn}_2\text{O}_4$ (a cathode material for Li batteries), the family of $\text{YbFexMn}(1-x)\text{O}_3$ (a possible multiferroic material) and iridates with (Sr_2IrO_4 and $\text{Bi}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$). In the case of $\text{Li}_2\text{Mn}_2\text{O}_4$, the evolution of the oxidation states of Mn (2p-3d transitions) are followed and correlated with changes in the O K edge (1s-2p transitions) XAS spectra for different stages along the charge/discharge cycle of the Li battery. For $\text{YbFexMn}(1-x)\text{O}_3$, changes in the electronic structure of the system as Mn content is varied are tracked for Fe, Mn and O in the L_{2,3} and K edges, respectively. Finally, similitudes and differences as reflected in the O K edge spectra for Sr_2IrO_4 and $\text{Bi}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ iridates are presented.

Posters II / 54

Programación mezclada en el procesamiento de datos sincrotrónicos

Mr. MARÍN ROMERO, Jose ¹; Dr. FUENTES-MONTERO, Luis ²

¹ Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politecnico Nacional, Unidad Mérida

² Diamond Light Source

Corresponding Author: jamrkraft@gmail.com

Los lenguajes de programación Python y Fortran están siendo ampliamente utilizados en el campo de la Cristalografía. Python tiene un gran auge en el área debido a que es dinámico y de fácil entendimiento, mientras que Fortran ha sido por excelencia el lenguaje más utilizado en Cristalografía. Es un lenguaje estable y eficiente para cálculos numéricos. Resulta complicado para quienes se inician en computación.

Por lo anterior, se buscan alternativas para que los programas sean mas flexibles con el usuario, sin sacrificar el rendimiento y eficacia en lenguajes de programación. Una opción es la combinación de ambos lenguajes.

En este trabajo desarrollamos una metodología utilizando la interfaz F2PY para combinar Python y Fortran convirtiéndolos en una herramienta flexible, potente y eficaz que permita la optimización de tiempo y recursos computacionales.

Se comparó el lenguaje de programación Python con la mezcla creada por F2PY de Python y Fortran, realizando operaciones matriciales simples a una matriz cuadrada de 1 millón de datos. Se graficó la función $Z:R \times R \times R$. Posteriormente se realizó un corte que se graficó (Figura 1). Se obtuvo una eficiencia significativamente mayor en la velocidad de procesamientos de datos con la combinación de los dos lenguajes de programación. Se trabaja en la implementación de la programación mezclada Python-Fortran en el Proyecto de actualización y ampliación del programa ANAELU, orientado a la manipulación y simulación de datos de difracción bidimensional obtenidos en un Sincrotrón.

Posters II / 89

RIXS calculations in $\text{FeTe}_{1-x}\text{Se}_x$ system.

Mr. MULATO GÓMEZ, Diego Fernando ¹; Dr. MUSTRE DE LEÓN, José ¹

¹ Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional

Corresponding Author: difemugo@gmail.com

We present calculations for resonant inelastic x-ray scattering RIXS in $\text{FeTe}_{1-x}\text{Se}_x$. We performed these calculations using a real space multiple scattering approach, which allows us to consider explicit compositional disorder. We approximate the RIXS spectra as a convolution between X-ray absorption (XAS) and X-ray emission (XES), using the ab-initio FEFF code. We can reproduce an experimentally observed change of hybridization, in the area of the pre-edge (XANES), between states d-Fe and p-Chalcogen (p-Se, p-Te).

Posters II / 55

Determination of impurities in the surface of giant crystals of Naica by Synchrotron Radiation.

Mr. CASTILLO SANDOVAL, Isai¹; Dr. FUENTES-COBAS, Luis E.²; Dr. MONTERO-CABRERA, Maria Elena²; Dr. ESPARZA, Hilda³; Dr. FUENTES-MONTERO, Maria Elena⁴; Dr. REYES-CORTEZ, Manuel⁵

¹ Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C.

² Centro de Investigación en Materiales Avanzados

³ CIMAV

⁴ Facultad de Ciencias Químicas, UACH

⁵ Facultad de Ingeniería, UACH

Corresponding Author: elena.montero@cimav.edu.mx

Naica mine is located in the semi-desert region at the central-south of Chihuahua State, Mexico. The Giant Crystals Cave was discovered by accident in 2000 at Naica. This gallery has become world famous because of the size and purity of its selenite crystals [1]. This paper presents the use of synchrotron radiation phases identification in the crystal surface. All experiments were performed at Stanford Synchrotron Radiation Lightsource (SSRL). The X-ray absorption techniques of micro X-ray fluorescence (μ -XRF) and micro near edge absorption (μ -XANES) were measured at the beamline (BL) 2-3. Grazing incidence X-ray diffraction (GIXRD) experiments were performed at beamline 11-3. The μ -XRF and μ -XANES spectra and distribution maps were analyzed and processed with the "SMAK" [2] and "SIXpack" [3] programs, respectively. The interpretation of 2-D patterns was performed with programs ANAELU [4] and Wxdiff [5]. The phases found in the impurities on the surface of selenite crystals are summarized as follows: a) selenite, galena, sphalerite, hematite and cuprite. b) Elemental distributions and correlations (0.6-0.9) for Cu, K, Fe, Mn, Pb, Zn, Ca and S were identified by μ -XRF. The correlations among elemental contents confirmed the phase identification, with the exception of manganese and potassium due to the amorphous nature of some impurity compounds in these samples. c) Amorphous compounds were suggested by the μ -XANES results. Plausibly, the manganese and lead elements form their respective non-crystalline oxides.

[1] J.M. García-Ruiz et al., Chem. Soc. Rev., 2014, 43, (2013).

[2] S. M. Webb, AIP Conference Proceedings, 1365, 196-199 (2011)

[3] S. M. Webb, SixPACK software, Physica Scripta T115, 1011-1014 (2005)

[4] L. Fuentes-Montero et al., J. Applied Crystallography, 44, 241-246 (2011)

[5] S.C. Mannsfeld, WxDiff version 1.11 (<http://code.google.com/p/wxdiff>) SSRL, (2009)

Posters II / 56

Structural study of gypsum crystals at Naica by two-dimensional diffraction at Stanford Synchrotron.

Mr. CASTILLO SANDOVAL, Isai¹; Dr. MONTERO-CABRERA, Maria Elena²; Dr. ESPARZA, Hilda³; Dr. FUENTES-MONTERO, Maria Elena⁴; Dr. REYES-CORTEZ, Manuel⁵; Dr. FUENTES-COBAS, Luis E.²

¹ Centro de Investigación en Materiales Avanzados S.C.

² Centro de Investigación en Materiales Avanzados

³ CIMAV

⁴ Facultad de Ciencias Químicas, UACH

⁵ Facultad de Ingeniería, UACH

Corresponding Author: luis.fuentes@cimav.edu.mx

Naica Mine is located 112 km southeast of the capital of Chihuahua, Mexico. The gypsum crystals of Naica are the most striking and motivating worldwide. This paper presents the use of synchrotron radiation for the structural study of gypsum crystals. The experiments were performed at the Stanford Synchrotron Radiation Lightsource (SSRL). X-ray diffraction was used in reflection geometry with grazing incidence angle (GIXRD) and supported by X-ray transmission (TXR), both at beamline 11-3. Spectra processing was carried out by simulation with ANAELU [1, 2] program. 2D diffraction patterns obtained by GIXRD show a mosaic structure in the gypsum crystals. 2D diffraction patterns, obtained by TXR (Figure 1), show that gypsum has single crystal structure, and it is modified to a polycrystalline structure when approaching the impurities. Several phases were identified; however, the main one is hematite.

[1] L. Fuentes-Montero et al., *Journal of Applied Crystallography*, 44, 241-246. (2011)

[2] ANAELU software: <http://cimav.edu.mx/investigacion/software/anaelu> (2010)

Posters II / 60

COMPORTAMIENTO BIOGEOQUÍMICO DE PLOMO (Pb) Y CROMO (Cr) DE SUELOS DEL DISTRITO MINERO DE GUANAJUATO Y SU REMOCIÓN POR *Acacia farnesiana*

Dr. CANDY, Carranza Álvarez ¹; Dr. RENÉ, Loredó Portales ²; Mr. OCTAVIO, Rojas Páramo ¹

¹ UASLP-UAMZH

² Universidad de Guanajuato- Campus Guanajuato

Corresponding Author: rpo_bq@outlook.com

México es un país con abundantes recursos minerales, lo que ha marcado su tradición minera. Sin embargo, los residuos mineros o jales representan un riesgo potencial al medio, debido a que contienen elementos potencialmente tóxicos (EPT's) en altas concentraciones. El objetivo de este trabajo es estudiar el comportamiento biogeoquímico del Pb y Cr en suelos y jales del distrito minero de Guanajuato y la remoción de estos elementos por *Acacia farnesiana*. Las muestras de suelo y jales fueron colectadas de la mina "Mineral La Aurora" en el municipio de Xichú. Se empleó un proceso de digestión ácida mediante un sistema de digestión de microondas (Multiwave ECO; Anton Paar), para realizar un análisis elemental por Espectroscopía de absorción atómica de flama (FAAS; Thermo Scientific ICE 3000 SERIES). Los resultados muestran un contenido de Cr y Pb respectivamente de 426 y 3258.6 mg·kg⁻¹, valores por encima de la normativa mexicana (NOM-147-SEMARNAT/SSA1-2004). Los análisis fisicoquímicos muestran que el suelo del sitio es ligeramente ácido y en una vivienda cercana al sitio ligeramente alcalino; parámetros como el pH se relacionan directamente con la movilización de los metales, debido a las reacciones de hidrólisis de los cationes, provocando un aumento de la solubilidad y por tanto de la movilidad de los metales en condiciones ácidas y un deceso de la solubilidad en condiciones alcalinas. Además, se estudió el papel de una especie vegetal que crece en la zona afectada (*Acacia farnesiana*), con la finalidad de estudiar su posible uso en la fitorremediación del sitio de estudio. Para ello, se estableció un método para su cultivo in vitro que permitirá estudiar la fitotoxicidad así como su capacidad para la bioacumulación de Cr y Pb en los tejidos de la planta. Sin embargo, es necesario realizar estudios de especiación para determinar las formas químicas de estos elementos en las muestras ambientales. La movilización de estos elementos en el suelo y su interacción con las plantas depende de la forma química de los mismos. En este sentido proponemos el uso de las técnicas de Espectroscopía de Rayos X, que han sido empleadas para determinar la especiación de elementos en muestras ambientales, dilucidar los mecanismos de captación de estos elementos por las especies vegetales así como su distribución en los distintos tejidos de las plantas [1]. El Cr se encuentra en el ambiente generalmente como Cr (III) y Cr (VI), el primero posee menor movilidad y se encuentra formando precipitados, además de que es un micronutriente esencial para algunos organismos. Se ha demostrado por estas técnicas que algunas plantas son capaces de reducir el Cr (VI) a Cr (III) una vez que este penetra en los tejidos. El Cr (VI) es muy móvil y entra rápidamente en el cuerpo humano a través de la piel, inhalación e ingestión y es considerado como agente carcinogénico y mutagénico [2,3]. Es por ello que es de importancia determinar la especiación en las diferentes matrices ambientales, así como su interacción con organismos como las especies vegetales a fin de proponer estrategias de remediación adecuadas.

1. Sarret G., Pilon Smits E.A.H., Castillo M. H., Isaure M.P., Zhao F.J., Tappero R. 2013. Use of synchrotron-based techniques to elucidate metal uptake and metabolism in plants: *Advances in agronomy*, 119, 1st Edition, 1-86.

2. Wei Yu-Ling, Hsieh Huei-Fang, Yang Yao-Wen, Lee Jhy-Fu, Liang Wei-Shun, 2005, *Molecular study of thermal immobilization of chromium (VI) with clay: Air & waste manage*, 55, 411-414.

3. Agency for Toxic substances and Disease Registry, 2012, *Toxicological profile for chromium*, ATSDR. <http://atsdr.crdc.gov/toxprofiles/tp7.pdf>

Posters II / 61

“Cuantificación de Elementos Potencialmente Tóxicos en especies vegetales de un sitio minero de Guanajuato: identificación de especies potencialmente fitorremediadoras”

Mrs. PONCE GIL, Elba Alejandra ¹; Dr. CRUZ-JIMENEZ, Gustavo ²

¹ Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Unidad Académica Multidisciplinaria Zona Huasteca

² Universidad de Guanajuato

Corresponding Author: elba_fulanita@hotmail.com

Las zonas de jales mineros son sitios impactados por Elementos Potencialmente Tóxicos (PTE) en donde comúnmente sucede la bioacumulación de metales por especies animales y vegetales. En este estudio se determinó el efecto del arsénico en el sistema radicular e hipocótilo (tallo) de plántulas de *Acacia farnesiana* L. Willd, comúnmente llamada huizache yóndiro, que crece en lugares cercanos de jales mineros localizados en Xichú, Guanajuato. Las semillas se recolectaron del sitio y fueron pretratadas para escarificación utilizando H₂SO₄ concentrado a 60 °C durante 12 min, luego fueron lavadas con NaOH (0.1 M) y agua desionizada. Se colocaron 20 semillas de *A. farnesiana* en cajas de petri por triplicado sobre un papel filtro con 15 mL de As (V) a diferentes concentraciones: 0, 20, 40 y 80 ppm durante 7 días con 12 horas luz/oscuridad, 60 - 80% de humedad y 28 ± 2 °C. Posterior a los 7 días a la exposición de As (V) como NaH₂AsO₄, se midió con un vernier la longitud de la raíz principal, desde el ápice de la radícula hasta el cuello de las plántulas, y se midió el hipocótilo desde el cuello hasta la salida de los cotiledones. Se realizó un análisis de varianza de una vía (ANOVA) y el método Tukey-Kramer HSD (Honestly Significant Difference) para determinar las diferencias entre los tratamientos (p <0.05). Los resultados muestran que la germinación en todos los tratamientos fue superior al 90% y que a mayor concentración de As, menor es el crecimiento de raíz e hipocótilo. Este porcentaje elevado de germinación se le atribuye al proceso de escarificación que se utilizó, debido a la dureza de la semilla que le dificulta la absorción de agua. A su vez, se observa efecto estadísticamente significativo en el crecimiento de la raíz a partir de la concentración de 20 ppm de As con respecto al control, y diferencias significativas entre el control y la concentración de 40 ppm de As en la elongación del hipocótilo (p <0.05). La disminución en el porcentaje de germinación, longitud de raíz y longitud de hipocótilo conforme aumentaban las concentraciones de As (V), se atribuye al aumento del estrés oxidativo de la planta y EROs (especies reactivas de oxígeno) en la célula vegetal produciendo apoptosis, daño al ADN, peroxidación lipídica, etc. provocando una disminución en la mitosis y posterior disminución en la elongación de raíz y tallo, así como un retardamiento en la germinación de las plántulas. A pesar de la serie de consecuencias fitotóxicas del As en *A. farnesiana* observadas durante este estudio, es reportada por diversos autores como una planta tolerante a metales, incluyendo el As. Con las técnicas de luz sincrotrón, se podría analizar esa interacción planta-metal desde la germinación en *A. farnesiana* a nivel de raíz y tallo, para posteriormente tener una estrategia adecuada en la fitorremediación de sitios contaminados con As.

Posters II / 62

DETERMINACIÓN DE LA ACUMULACIÓN DE ELEMENTOS POTENCIALMENTE TÓXICOS (EPTs) EN ESPECIES VEGETALES DE UN SITIO MINERO DE GUANAJUATO: IDENTIFICACIÓN DE ESPECIES CON POTENCIAL FITORREMIADOR.

Ms. MAGDALENA YURIXHI, González¹; Dr. CRUZ, Gustavo¹; Dr. LOREDO, René¹

¹Universidad de Guanajuato

Corresponding Author: yuriykeane_9@hotmail.com

En México en el Estado de Guanajuato una actividad económica de alto impacto es la minería, dando como resultado que en este estado se encuentren varios sitios en los que hay depósitos de residuos de minas mejor conocido como “jales”. De entre estos sitios se encuentran los jales de la mina “La Aurora” localizada en Xichú (figura 1), en este Municipio de Xichú al noreste de Guanajuato, las minas fueron abandonadas.

La mina La Aurora se utilizó para extraer principalmente Oro, Cobre y Plata, posteriormente Zinc y Plomo desde el siglo XVIII.

Previos Estudios en este sitio muestran la presencia de Especies Vegetales como la Acacia farnesiana L. Willd que se ha reportado tener tolerancia al arsénico y que acumula altas concentraciones de As y Zn.

Por lo anterior en esta zona se encuentran Elementos Potencialmente Tóxicos (EPTs) que pueden tener efectos nocivos para la flora, fauna y salud humana.

Por ello se realizó un muestreo en cuatro puntos representativos, además de la recolección manual de semillas del árbol de A. farnesiana mejor conocido como Huizache yóndiro, además de un estudio del efecto fitotóxico del Cr (VI) en la germinación y crecimiento del Huizache ya que el Cr lo podemos encontrar en la naturaleza en tres formas como lo es Cr metálico, Cr (III) y Cr (VI), que este último es tóxico para la mayoría de los organismos, siendo el Cr (VI) altamente tóxico para las plantas, provoca clorosis generalizada, disminuye la síntesis de clorofila y como resultado afecta la fijación del CO₂ y el metabolismo de carbohidratos (0.011 mg Cr(VI)1), causando un daño directo a nivel del ADN, que puede provocar daños genotóxicos e incluso la muerte celular en la planta. Por ello la finalidad del presente estudio al utilizar la especie vegetal de A. farnesiana es el de evaluar su posible utilización para fines de fitorremediación de Cr (VI), el cual también es un EPT que se encuentra en sitios contaminados del estado de Guanajuato, debido a la actividad curtidora, por lo cual las semillas fueron sometidas a diferentes tratamientos de Cr (VI) para evaluar cuál es su efecto sobre la germinación y determinar si es posible usarla como planta fitorremediadora. Se emplearon los siguientes tratamientos: 0, 20, 40 y 80 ppm de Cr (VI) como Na₂Cr₂O₇·2H₂O en un periodo de siete días de germinación, respetando ese tiempo se midió la longitud de la raíz y el tallo. Apoyados de un Software Estadístico se analizaron los resultados, observando que el Cr (VI) no inhibió el crecimiento y desarrollo de la planta en las concentraciones utilizadas en el estudio.

Posters II / 69

COMPUTATIONAL CRYSTALLOGRAPHY: PROGRAMS FOR ANALYZING BIDIMENSIONAL DIFFRACTION PATTERNS

Mrs. BURCIAGA-VALENCIA, Diana¹; Mr. VILLALOBOS PORTILLO, Edgar Eduardo²; Dr. FUENTES-COBAS, Luis E.³; Dr. FUENTES-MONTERO, Luis⁴

¹ estudiante doctorado

² Centro de Investigación de Materiales Avanzados S.C (CIMAV)

³ Centro de Investigación en Materiales Avanzados

⁴ Diamond Light Source

Corresponding Author: diana.burciaga@cimav.edu.mx

Bi-dimensional diffraction is a promising technique for structural analysis and so it shows its recent use growth. The obtained data is analyzed through computational tools like the program ANAELU (ANALytical Emulator Laue Utility) to assist with the interpretation of X-ray diffraction patterns produced by textured samples. This program includes: structure representation, experimental bi-dimensional diffractogram analysis and diffraction patterns simulation. The project for the ANAELU program improvement includes: background modelling, experiment-model comparison and parameters manipulation; all the previous in order to upgrade it towards a Rietveld type quantitative bi-dimensional analysis. To deliver a better experience for the user, the new ANAELU has a complete new GUI (graphic user interface) programmed in wxPython, which is friendlier and more intuitive than before. This GUI born from the previous experience, making it more compatible with the current and future platforms, like Windows and the UNIX-like family. The present project is feasible through the use of mixed programming among compiled (FORTRAN 95/2003) and interpreted (wxPython) languages. Improvements in this matter have been achieved; regarding calculations, we can ensure greater portability, long term support and enhanced execution velocity (from 7 hours to 25 minutes in a specific example) with the use of the CrysFML library which allows us to take advantage of a highly efficient calculation process. Up to now the new GUI is able to read and compare two diffraction patterns, one calculated (like said before) and one experimental. The two images are linked to each other to improve the experience, allowing easier and faster comparison. The GUI also has the most common menus to open and save the files in several formats.

Posters II / 92

Elemental analysis of particulate matter PM10 by X-Ray Fluorescence

Prof. MORALES-LÓPEZ, Gladys¹; Dr. GUSTAVO, Cruz Jiménez¹; Dr. MA. GUADALUPE, de la Rosa Álvarez¹; Dr. J. MERCED, Martínez Rosales¹; Dr. DIANA O, Rocha Amador¹; Dr. MARCOS, Delgado Rios²; Dr. HIRAM, Castillo Michel³; Dr. JORGE L., Gardea Torresdey⁴

¹ Universidad de Guanajuato

² Universidad Autónoma de Ciudad Juárez

³ European Synchrotron Radiation Facility

⁴ Universidad de Texas en El Paso

Corresponding Author: gladysml7@hotmail.com

This study aimed to perform elemental analysis of filter samples the cities of Salamanca and Leon by X-Ray Fluorescence. In a previous study by Delgado [1], in which he characterized PST and PM10 from manual monitoring high volume of municipalities Villagran, Cortazar, Salamanca and Irapuato found elements such as C, O, Si, Na, S, K, Ni, Fe, Cu, Pb and Zn. The elemental analysis in samples of interest from manual monitoring of PM10 from the cities of Leon and Salamanca by X-Ray Fluorescence presence found V, Cr, Fe, Cu, As, Al, K, Ca, and Zn.

Posters II / 96

Estudio de las especies producto de la reacción de Cr VI y ácidos orgánicosDr. CHAVEZ-FLORES, David¹; Dr. CASTILLO-MICHEL, Hiram A.²; JESUS R., Ogaz-Parada¹¹ Universidad Autónoma de Chihuahua² ESRF

Corresponding Author: dabidcha@gmail.com

Las concentraciones elevadas de metales tóxicos en la dieta humana constituyen un peligro potencial para la salud a largo plazo. En general, las plantas representan una vía importante para el movimiento de elementos traza potencialmente tóxicos del suelo y agua a los seres humanos y animales en general. Los metales contaminantes a menudo se pueden acumular en cantidades considerables en los tejidos vegetales y en humanos hasta superar los niveles deseables. El cromo entre los metales pasados se encuentra principalmente en dos estados de oxidación: trivalente (Cr III) y hexavalente (Cr VI). Actualmente existen reportes indicando que el Cr III forma complejos orgánicos solubles en agua principalmente materiales orgánicos de fuentes naturales, provenientes del medio ambiente. En Japón, se estima que existe un 60% del cromo total disuelto en el mar como complejos orgánicos. En este trabajo de investigación se estudia la interacción estructural y el efecto reductor entre los ácidos acético, propanoico, butanoico, oxalico, cítrico, ascórbico y succínico, además de glutatión. Utilizando UVviz como técnica de análisis hemos encontrado una fuerte capacidad de reducción de Cr VI a Cr III con glutatión y ácido cítrico. Actualmente y con la finalidad de determinar la cinéticas de reacción hemos desarrollado una metodología de HPLC de par iónico para evaluar la conversión de Cr VI a Cr III en las interacciones mencionadas y para coleccionar los productos de reducción con la finalidad de determinar su estructura química utilizando luz sincrotrón y así comprender los complejos metálicos acido-metal.

Posters II / 100

Determinación de la morfología lignocelulósica en el bagazo de caña de azúcar sometido a pretratamientos químicos y biológicos usando dispersión de rayos-x en ángulo pequeño (SAXS)Mr. SANTANA-HERNÁNDEZ, Uriel¹; Mr. QUIROZ-CARDOSO, Oscar¹; Mr. DOMÍNGUEZ-FLORES, Orlando¹; Dr. JENG, U-Ser²; Dr. QUINTO-HERNÁNDEZ, Alfredo¹¹ Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica, Instituto Tecnológico de Zacatepec.² National Synchrotron Radiation Research Center.

Corresponding Author: alfredo.qh@itzacatepec.edu.mx

Cambios morfológicos en la biomasa lignocelulósica producida de bagazo de caña de azúcar fueron estudiados mediante dispersión de rayos-X en ángulo pequeño (SAXS) basada en radiación sincrotrón. Estos se determinaron después de que las fibras fueron sometidas a pretratamientos químicos de ácidos y bases fuertes, así como con el microorganismo *Trametes versicolor*. Perfiles 1D SAXS fueron obtenidos, ajustados y analizados a través del muy conocido Modelo Unificado,

$$I(q) = G_i e^{(((-q^2 R_{gi}^2)/3))} + B_i e^{(((-q^2 R_{(g(i-1))}^2)/3))}$$

donde i representa los niveles estructurales de una región de Guinier, G_i es el prefactor exponencial, R_g es el radio de giro, B_i es un prefactor constante específico al tipo de dispersión de ley de potencia P_i ; y q es el vector de dispersión.

Los parámetros estructurales arriba indicados R_g y P_i , así como el parámetro fractal d_s , fueron determinados para monitorear la degradación de la celulosa y de la estructura lignocelulósica. A nuestro conocimiento, este es uno de los primeros estudio que revela la pérdida de cristalinidad asociada a los tratamientos ya indicados por esta técnica. Estos resultados pueden ser relacionados con la producción de bioetanol a partir de este desecho agroindustrial, pues la reducción de la cristalinidad en la celulosa es clave para su producción.

Posters II / 102

Dinámica de fotodisociación en fase gaseosa del éster Formiato de Etilo (HCOOCH₂CH₃) por Espectroscopia Translacional de Fotofragmentación basada en radiación sincrotrón VUV a 193 nm

Mr. DOMÍNGUEZ-FLORES, Orlando¹; Mr. QUIROZ-CARDOSO, Oscar¹; Mr. SANTANA-HERNÁNDEZ, Uriel¹; Dr. LEE, Shih-Huang²; Dr. QUINTO-HERNÁNDEZ, Alfredo¹; Dr. RODRÍGUEZ-HERNÁNDEZ, Annia³

¹ Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica, Instituto Tecnológico de Zacatepec.

² National Synchrotron Radiation Research Center.

³ Laboratorio Nacional de Genómica para la Biodiversidad – CINVESTAV

Corresponding Author: alfredo.qh@itzacatepec.edu.mx

En este estudio de dinámica de fotodisociación del éster Formiato de Etilo (HCOOCH₂CH₃) a 193 nm, se detectaron 10 fotofragmentos usando Espectroscopia Translacional de Fotofragmentación basada en radiación sincrotrón (VUV-PTS), en condiciones libre de colisiones. Estos fragmentos incluyen m/z=+45 (CH₃CH₂O y HCO₂), m/z=+44 (CH₃CHO, CH₂CH₂O y CO₂), m/z=+30 (HCOH y CH₂O), m/z=+29 (HCOH y CH₃CH₂) y m/z=+15 (CH₃), asociados con cuatro canales de disociación primaria; así como también los productos m/z=+45 (CH₃CH₂O y HCO₂) y m/z=+44 (CH₃CHO) que se asocian a tres canales de disociación secundaria. Con VUV-PTS se colectaron espectrogramas de masas de Tiempo-de-Vuelo (TOF) para cada uno de los fragmentos presentes en las diversas rutas de disociación en ángulos de laboratorio de un rango θ_{lab} = 20° a 40°. Estos datos se simularon usando los programas PHOTRAN y ANALMAX, considerando las condiciones experimentales. Como resultado, se generaron distribuciones de probabilidad de liberación de energía translacional (o) para cada uno de los canales de disociación. Estos resultados permitieron determinar la presencia de diversos canales y especies, así como derivar datos termodinámicos relevantes a los sistemas de reacción bajo estudio, tales como calores de formación () y energías de disociación (). Finalmente, se identificaron plenamente las disociaciones primarias CH₃CH₂O+HCO, CH₃CHO+HCOH y HCO₂+CH₂CH₃, así como las descomposiciones secundarias secuenciales CH₃CH₂O→CH₃+CH₂O, CH₃CHO→CH₃+HCO y HCO₂→H+CO₂. Estas descomposiciones han sido predichas en diversos trabajos teóricos y este trabajo provee la evidencia experimental necesaria para confirmarlas.

Posters II / 57

XANES study of Chromium-Rare-earth Zircons and Scheelites

SÁEZ PUCHE, Regino ¹; CLIMENT-PASCUAL, Esteban ²; Dr. MONTERO-CABRERA, Maria Elena ³; Dr. FUENTES-COBAS, Luis E. ³; FUENTES-MONTERO, María Elena ⁴; MORÁN, Emilio ⁵

¹ Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid

² Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid

³ Centro de Investigación en Materiales Avanzados

⁴ Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Chihuahua

⁵ Facultad e Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid

Corresponding Author: elena.montero@cimav.edu.mx

The mixed oxide RCrO₄ (R³⁺= Er and Y) crystallizes into a tetragonal zircon-type structure at ambient conditions. It is built from edges-sharing RO₈ dodecahedra chains which are connected each other by CrO₄ tetrahedra. Under high pressure conditions (50 kbar), scheelite polymorphs (S.G. I41/a) [1, 2] of RCrO₄ were prepared from the corresponding zircon forms of RCrO₄ (S.G. I41/amd). Chromium in these materials shows relative rare Cr⁵⁺ oxidation state. Bulk magnetic and specific heat measurements indicate the presence of antiferromagnetism with estimated Néel temperatures of 23 and 21 K respectively. However, the RCrO₄-zircon type polymorphs show ferromagnetic behavior with Curie temperatures of 15 and 9 K. The differences in the magnetic behavior of both forms have been attributed to the changes found in the Cr-O-R superexchange pathway through which the magnetic interactions take place.

To contribute clarifying the mentioned behavior, XAFS measurements on Cr K-absorption edge were performed at Stanford Synchrotron Radiation Lightsource, at beamlines 2-3 and 4-3. The pre-edge feature in the XANES zone is markedly detected. The shift in the energy position between the pre-edge peak and the “shoulder” of the XANES region is about 5.5-6 eV, in agreement with reported data for Cr(V) oxidation state [3]. From the crystal structure reported by XRD, an ab initio modeling with FEFF8.4 code of XANES spectra has been performed and the density of states of ions was also obtained. The modeled spectra qualitatively reproduce the main features of the experimental ones.

Posters II / 113

Determinación Teórica y Experimental de las rutas de disociación de Metil Acrilato (CH₂=CHCOOCH₃) a 193 nm

Mr. QUIROZ-CARDOSO, Oscar¹; Mr. DOMÍNGUEZ-FLORES, Orlando¹; Mr. SANTANA-HERNÁNDEZ, Uriel¹; Dr. LEE, Shih-Huang²; Dr. RODRÍGUEZ-HERNÁNDEZ, Annia³; Dr. HERNÁNDEZ-LAMONEDA, Ramón⁴; Dr. QUINTO-HERNANDEZ, Alfredo¹

¹ Departamento de Ingeniería Química y Bioquímica, Instituto Tecnológico de Zacatepec

² National Synchrotron Radiation Research Center

³ Laboratorio Nacional de Genómica para la Biodiversidad – CINVESTAV

⁴ Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos

Corresponding Author: alfredo.qh@itzacatepec.edu.mx

Reportamos las rutas de disociación originadas durante la fotólisis a 193 nm de Metil Acrilato (CH₂=CHCOOCH₃, MA) usando VUV Espectroscopia Translacional de Fotofragmentación basada en radiación sincrotrón, y se ha iniciado su validación mediante cálculos perturbacionales MP2 y Hartree-Fock. Para esto, recolectamos Espectros de Masa de Tiempo de Vuelo (TOF-MS) de los fragmentos producidos a partir de la disociación del MA, en un intervalo de masa/carga (m/z)= +14 a +86, y en ángulos de laboratorio $\theta_{lab} = 20^\circ$ a 50° . Los datos obtenidos TOF-MS se ajustaron por simulación con programas de convolución ad hoc, permitiendo así que se originaran diagramas de distribución de probabilidad de liberación de energía translacional. A través de estos diagramas se ha logrado el establecimiento de las principales rutas de disociación primarias y secundarias. Se identificó la presencia de los canales de disociación primaria (CH₂CHCHO + HCOH, CH₂CHCHO + CH₂O, CH₂CHCO + CH₂OH/CH₃O), secundaria (CH₂CHCHO → CH₂CH + HCO, CH₂CHCHO → CH₂CHCO + H) y de tres cuerpos (CH₂O + CH₂CH₂ + CO, CH₂CH₂ + CO₂ + CH₂, CO₂ + CH₃ + CH₂CH), así como datos termoquímicos relevantes a este sistema. Se ha iniciado la confirmación de los resultados experimentales con la proyección de una superficie de energía potencial para esta fotodisociación, y a la fecha se ha logrado obtener energías correlacionales, las energías del Punto Cero (ZPE) y la optimización geométrica de toda las especies detectadas.

Thursday III / 79

ARPES on High-Temperature Superconductors and Topological Materials

Dr. SHI, Ming¹

¹ Paul Scherrer Institut, PSI, 5232 Villigen PSI, Switzerland

Corresponding Author: ming.shi@psi.ch

Synchrotron-based angle-resolved photoemission spectroscopy (ARPES) has been proven to be a powerful tool for the investigation of electronic structure and excitations in solids. It probes the electronic states and single-particle spectral function in momentum-resolved manner. In this talk, after a brief introduction of ARPES facilities at Swiss Light Source in PSI, I will present some of our recent ARPES results on cuprate and iron-based high-temperature superconductors and on topological materials. For cuprates, I shall show how the underlying Fermi surface, the superconducting and pseudogaps evolve from a highly underdoped samples to overdoped ones. For pnictides, I will focus on the Fermi surface, the mass enhancement and high-resolution measurements of the superconducting gap, as a function of crystal momentum. For the topological materials, I will show the experimental realizations of the novel quantum phases, i.e. topological Kondo insulator and Weyl semimetal.

Thursday III / 95

The evolution of ratite birds throughout biomineralization of carbonates followed by crystallographic methods using synchrotron radiation

Prof. MORENO-CARCAMO, ABEL¹; Dr. RUIZ-ARELLANO, RAYANA, R.²

¹ INSTITUTE OF CHEMISTRY, UNAM

² INSTITUTE OF BIOTECHNOLOGY, UNAM

Corresponding Author: carcamo@unam.mx

The biomineralization is the study of the formation, structure and properties of inorganic solids deposited in biological systems. Biomineralization is the process by which living organisms produce minerals. The processes of biomineralización have important consequences for evolution and environment. Their impact is recorded on the global scale and stretches far back in the history of life. One remarkable example is the formation of eggshells in birds. It is demonstrated that struthiocalcins present in the ostrich (*Struthio camelus*), dromaiocalcins (in Emu) or rheacalcins (in *Rhea americana*) eggshells matrix act as biosensors of calcite growth during eggshell formation.

In this talk, the crystal structures of struthiocalcin-1 (SCA-1) in two different crystal forms, as well as the structure of ovocleidin-17 (obtained by means of using synchrotron radiation) are shown. Scanning electron microscopy combined with Raman spectroscopy indicates that these intramineral proteins induce calcium carbonate precipitation, leading to the formation of a stable form of calcite in the mature eggshell. Additionally, it is shown how these intramineral proteins affected the growth of calcite crystals and how they induced their spherical-shape growing.

Finally, the implications of these intramineral proteins in the nucleation of calcite during the formation of eggshells in ratite birds are also discussed.

Friday I / 107

Small Angle X-ray Scattering and VUV Photofragment Translational Spectroscopy for bioenergy purposes.

Dr. QUINTO-HERNÁNDEZ, Alfredo¹

¹ Tecnológico Nacional de México - Instituto Tecnológico de Zacatepec Calzada Tecnológico No. 27, Zacatepec, Morelos, México, 62780

Corresponding Author: alfredo.qh@itzacatepec.edu.mx

Bioenergy research is an active area recently incorporated to synchrotron technologies. In this talk we discuss for a general audience the capabilities of Small Angle X-rays Scattering (SAXS) and Photofragment Translational Spectroscopy (PTS) techniques, providing one example in each technique to illustrate some of their applications, with emphasis on bioenergy research. SAXS technique has been used to study the morphological changes of Cellulose I in the lignocellulosic biomass produced from sugarcane bagasse after treatments based on *Trametes versicolor*, and is compared to those using traditional strong acids and bases. Typically, chemical or biological treatments on byproducts of the agroindustry have been introduced for bioethanol production. On our second work, we detail VUV photoionization experiments of biodiesel fatty acid esters using Yuan T. Lee style photofragment translational machine and will provide new aspects of their chemical reaction dynamics, which is supported through MP2 and Hartree-Fock calculations. SAXS and PTS experiments both were carried out at the National Synchrotron Radiation Research Center (NSRRC) in Hsinchu, Taiwan – Republic of China.

Friday I / 106

MLS: Status of the conceptual design.

Dr. MORENO, Matías¹; MUSTRE, Jose²; Prof. JIMENEZ-MIER, Jose³; Prof. NAPSUCIALE, Mauro⁴; Prof. VIVEROS, Tomás⁵; ANTILLÓN, Armando⁶; Dr. FLORES TLALPA, Alain⁷

¹ Instituto de Física, UNAM

² Cinvestav-Merida

³ ICN-UNAM

⁴ Guanajuato University

⁵ UAM Iztapalapa

⁶ ICF, UNAM

⁷ IF-UNAM

Corresponding Author: armando.antillon@gmail.com

In this talk we make a brief review of new Synchrotron Light Sources as well as current planned upgrades to some of them. These trends are considered for the Mexican Light Source for making the initial conceptual design from where we can move on. Some details on the design are presented.

Friday I / 103

Uses of ultra short wavelength x-rays in life science

Dr. STOJANOFF, Vivian¹

¹ Brookhaven National Laboratory

Corresponding Author: stojanof@bnl.gov

Ultra short X-ray wavelengths have been applied in the study of powder diffraction and medical imaging. Here we will discuss applications of high energy x-rays in the structure determination of macromolecules, and other synchrotron applications in life sciences.

Friday I / 110

The Mexican Morelos Synchrotron Light Project: Present Status

Dr. MORENO, Matías¹

¹ Instituto de Física, UNAM

Corresponding Author: matias@fisica.unam.mx

Synchrotron Light Sources (SLS) are medium to large size facilities that foster the modern development of multiple areas of knowledge, they also promote the scientific, technological and innovation development. The physical properties that make this possible are brilliance, broad spectrum, polarization, temporal pulsed structure and coherence. Among the fifteen largest world economies Mexico is the only one that lack a SLS.

In the last year a project that studies the characteristics and viability of a Mexican Light Source has been developed with the support of Conacyt and the Secretary of Innovation, Science and Technology of Morelos through a FOMIX project. Several federal and state institutions are involved UNAM (IFUNAM and ICFUNAM), UAM, CINVESTAV and the University of Guanajuato.

The main results of the work done until now are presented.

Friday II / 91

Perspectives on science communication about 'Mexican Synchrotron' during 2015, the International Year of Light.

Mr. QUIT, Ricardo ¹

¹ Consejo Nacional para el Entendimiento Público de la Ciencia

Corresponding Author: daniel.hernandez@unach.mx

An overview about how we have prepared public understanding of science in Mexico since 2005 (international year of physics) through 2011 (international year of chemistry) and 2014 (international year of crystallography) until actual International Year of Light to achieve a better comprehension what about synchrotron as an Light Source and its capabilities on science research over many interests on industry and its common life applications. Includes a Social Media proposal for standardization of hashtags and keywords to reinforce named interests.

Friday II / 108

RED TEMÁTICA USUARIOS DE LUZ SINCROTRÓN.

Dr. DE LA ROSA, Guadalupe ¹

¹ Universidad de Guanajuato

Corresponding Author: gdelarosa@fisica.ugto.mx

La Red Temática Usuarios de Luz Sincrotrón (RedTULS) pretende extender y difundir el uso de técnicas basadas en radiación sincrotrón para que la comunidad de usuarios en México crezca, y con ello se incremente la generación de productos de investigación y de desarrollo tecnológico que nos permita ser más competitivos a nivel mundial. REDTULS tendrá como objetivos promover el uso compartido de infraestructura propia de los usuarios, crear proyectos conjuntos que promuevan el uso de diversos sincrotrones en el mundo, apoyar y promover el proyecto de creación de un sincrotrón mexicano, fortalecer programas educativos que propicien el fortalecimiento de recursos humanos especializados en el área, promover el intercambio de conocimientos entre los usuarios, así como generar una fuerte vinculación con la industria. Presentamos datos estadísticos sobre esta comunidad de usuarios.

Asamblea / 77

Asamblea de la Red Temática de Usuarios de Luz Sincrotrón (REDTULS).

Dr. GUADALUPE, de la Rosa ¹

¹ Universidad de Guanajuato