VOLUMEN 48
XXXI Verano De la Ciencia
ISSN 2395-9797
www.jovenesenlaciencia.ugto.mx

Computational study of optical fiber functionalization with up-conversion nanoparticles (UCNPs)

Estudio computacional de la funcionalización de fibras ópticas con nanopartículas de conversión ascendente (UCNP)

Dulce María Zarazúa Sánchez[1], María Guadalupe Suarez Pichardo[1], Lizbeth González Calderon[1], Erik Díaz Cervantes[1*]
[1]Departamento de Alimentos, Centro Interdisciplinario del Noreste (CINUG), Universidad de Guanajuato, Tierra Blanca, Guanajuato 37975, México
e.diaz@ugto.mx*

Resumen

El proyecto evalúa la selectividad de sensores basados en fibras ópticas (OF) funcionalizadas con nanopartículas de conversión ascendente (UCNP) para la detección de bioactivos de fresa (*Fragaria ananassa*) con potencial aplicación en diabetes mellitus, bioactivos de comino (*Cuminum cyminum*) relacionados con el trabajo de parto y contaminantes organofosforados, mediante *Molecular docking*. Los resultados mostraron que la fisetina presentó una mejor interacción entre los bioactivos de fresa (LE= -3.31 kcal/mol), el alcohol anísico fue el bioactivo de comino con la interacción más favorable (LE= -5.44 kcal/mol) y el metamidofos fue el organofosforado que mejor interactúo con la OF funcionalizada (LE= -5.23 kcal/mol). Se concluye que este tipo de sensores son una herramienta clave con aplicaciones en la protección de la salud, la seguridad alimentaria y el monitoreo ambiental.

Palabras clave: fibra óptica; UCNP; *Molecular Docking*.

Introducción

Las fibras ópticas (OF acrónimo en inglés) son instrumentos de transmisión de luz sumamente pequeños hechos de plástico o sílice (Elsherif et al., 2020). El uso de sensores basados en OF se ha extendido debido a su eficacia en la detección, tamaño pequeño y resistencia a factores extremos como altas temperaturas o electricidad de alto voltaje pues no se ven afectadas por interferencias electromagnéticas (Pendão et al., 2022).

Por otra parte, las nanopartículas de conversión ascendente (UCNP por sus siglas en inglés) son nanomateriales luminiscentes dopados con iones de tierras raras (lantánidos), que convierten la luz del infrarrojo cercano (NIR) en luz visible mediante un proceso denominado conversión ascendente (Wang et al., 2011).

En los últimos años se han publicado diversos trabajos acerca de sensores basados en OF, sin embargo, en este proyecto se plantea mediante métodos computacionales la detección a través de OF funcionalizadas con UCNP dentro del contexto agroalimentario y de la salud.

Molecular Docking es una técnica computacional utilizada para predecir la interacción entre dos moléculas, usualmente un receptor (blanco) y un ligando (Prieto-Martínez et al., 2018).

La Diabetes mellitus es uno de los principales problemas en el área de la salud. Se trata de un trastorno metabólico caracterizado por una concentración elevada de glucosa en la sangre (hiperglucemia), debido a problemas en la secreción de insulina o en su actividad biológica (Banday et al., 2020). En este sentido, los compuestos fenólicos de la fresa (*Fragaria ananassa*), como la fisetina y la quercetina han generado interés por su potencial en ayudar a la regulación en la glucosa (Pukalskienė et al., 2021).

Por otro lado, el comino (*Cuminum cyminum*) es una planta herbácea perteneciente a la familia Apiaceae, originaria de Egipto. Desde la antigüedad ha sido utilizado como condimento y planta medicinal debido a su aroma característico y a la presencia de compuestos bioactivos que le confieren importantes propiedades terapéuticas (Mohammed et al., 2024). Entre sus principales metabolitos se encuentran el alcohol anísico, anetol, cuminaldehído, limoneno, timol y vainillina, los cuales han sido relacionados con actividades antioxidantes, antiinflamatorias y espasmolíticas (Priya & Garg, 2023). Principalmente hemos planteado su potencial para favorecer el trabajo de parto y mejorar la salud materna.

Los organofosforados son compuestos químicos utilizados como pesticidas para el control de plagas agrícolas. Sin embargo, estos químicos representan un problema ambiental debido a su persistencia en el ambiente, contaminación del agua, el suelo y los alimentos. El paratión, metil paratión, paraoxón, metamidofos y clorpirifós son organofosforados altamente tóxicos para el medio ambiente y la salud humana (Saad et al., 2025).

Por ello, la importancia de trabajar en el desarrollo de métodos de detección para bioactivos relacionados con la diabetes mellitus y el trabajo de parto, así como para contaminantes como los organofosforados.

Metodología

Para llevar a cabo la interacción entre el blanco (OF funcionalizada) y ligandos (bioactivos y contaminantes) se eligió el método de acoplamiento molecular *in silico* (*Docking molecular*).

Como blanco se utilizó una OF a base de sílice y funcionalizada con nanopartículas de conversión ascendente (UCNP).

Para los bioactivos de fresa se modelaron los ligandos fisetina y quercetina; para los bioactivos de comino se modelaron alcohol anísico, anetol, cuminaldehído, limoneno, timol y vainillina; mientras tanto, como organofosforados se modelaron paratión, metil paratión, paraoxón, metamidofos y clorpirifós por medio del software *Avogrado* (Hanwell et al., 2012).

Finalmente, los acoplamientos moleculares se realizaron a través del software *Molegro Virtual Docker* (MVD) (Thomsen et al., 2006) empleando la función de evaluación MoldockScore (Yang et al 2014).

Resultados y discusión

Se llevaron a cabo los acoplamientos moleculares entre la OF funcionalizada con los bioactivos y contaminantes. En la ***tabla 1*** se observan los valores de energía (E), puentes de hidrógeno (Hbond), eficiencia del ligando (LE) y fuerzas de Van der Waals (VdW) entre la OF funcionalizada y los ligandos seleccionados.

Tabla 1. *Resultados de la interacción entre la OF funcionalizada y los ligandos seleccionados.*

	Molécula	***E (kcal/mol)***	***Hbond (kcal/mol)***	***LE (kcal/mol)***	***VdW (kcal/mol)***
Diabetes mellitus	Fisetina	-69.52	-15.13	-3.31	-11.17
	Quercetina	-71.89	-16.08	-3.27	-10.96
Trabajo de parto	Alcohol anísico	-54.35	-10.00	-5.44	-8.63
	Anetol	-30.79	0.00	-5.13	-5.28
	Cuminaldehído	-46.78	0.00	-4.25	-7.22
	Limoneno	-37.05	0.00	-3.70	-5.91
	Timol	-49.97	-8.80	-4.54	-3.60
	Vainillina	-56.65	-4.87	-4.72	-8.08
Organofosforados	Metilparatión	-61.45	-10.45	-4.01	-9.43

Paraoxón	-66.40	-12.22	-4.04	-13.84
Paratión	-78.75	-11.26	-4.44	-11.43
Metamidofos	-36.60	-9.62	-5.23	-4.49
Clorpirifós	-69.76	0.00	-3.50	-10.09

De acuerdo con las energías de interacción, se determinó que, para el caso de los bioactivos de fresa, la fisetina con una LE de **-3.31 kcal/mol** fue el ligando que mejor interactuó con la OF funcionalizada. Respecto a los bioactivos de comino, el alcohol anísico con una LE de **-5.44 kcal/mol** fue el mejor ligando. Por último, el organofosforado que obtuvo la mejor interacción con la OF funcionalizada fue el metamidofos con una LE de **-5.23 kcal/mol**.

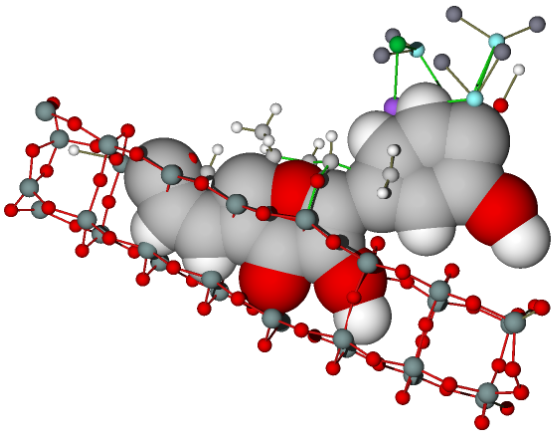


Figura 1. Acoplamiento molecular entre la OF funcionalizada y la fisetina.

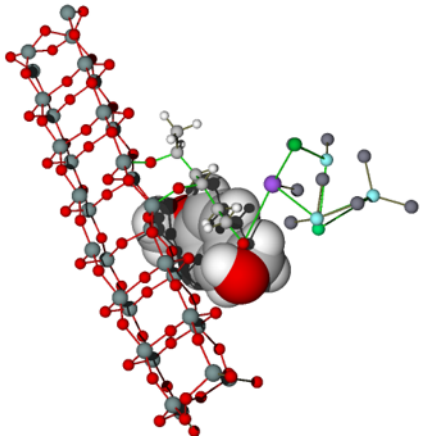


Figura 2. Acoplamiento molecular entre la OF funcionalizada y el alcohol anísico.

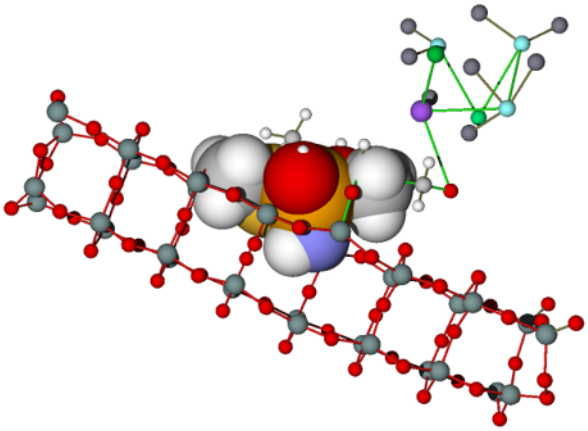


Figura 3. Acoplamiento molecular entre la OF funcionalizada y el metamidofos.

En la ***figura 1*** se observa una interacción favorable entre la fisetina y la OF funcionalizada. La interacción blanco-ligando para el caso del alcohol anísico se presenta en la ***figura 2***. Por su parte, el acoplamiento molecular entre la OF funcionalizada y el organofosforado metamidofos se observa en la ***figura 3***.

Conclusiones

Mediante métodos computacionales se determinó la selectividad de sensores basados en OF funcionalizadas para la detección de bioactivos de fresa, bioactivos de comino y contaminantes organofosforados. Los resultados mostraron que, para diabetes mellitus, el bioactivo de fresa que mejor interactuó con la OF funcionalizada fue la fisetina. Para el caso de trabajo de parto, el alcohol anísico fue el bioactivo del comino con la mejor interacción. Asimismo, el organofosforado con mejor interacción con la OF funcionalizada fue el metamidofos. Estos resultados demuestran el potencial de las OF funcionalizadas como una alternativa para el desarrollo de sensores. En los ámbitos de la salud y agroalimentario es esencial contar con métodos de detección para la protección de la salud humana, la seguridad alimentaria y el monitoreo ambiental.

Referencias

Banday, M. Z., Sameer, A. S., & Nissar, S. (2020). *Pathophysiology of diabetes: An overview*. *Avicenna Journal of Medicine, 10*(4), 174–188. https://doi.org/10.4103/ajm.ajm_53_20

Elsherif, M., Salih, A. E., Muñoz, M. G., Alam, F., AlQattan, B., Antonysamy, D. S., Zaki, M. F., Yetisen, A. K., Park, S., Wilkinson, T. D., & Butt, H. (2022). *Optical fiber sensors: Working principle, applications, and limitations*. *Advanced Photonics Research, 3*, 2100371. https://doi.org/10.1002/adpr.202100371

Hanwell, M. D., Curtis, D. E., Lonie, D. C., Vandermeersch, T., Zurek, E., & Hutchison, G. R. (2012). *Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform*. *Journal of Cheminformatics, 4*, 17. https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17

Mohammed, F. S., Sevindik, M., Uysal, İ., Çesko, C., & Koraqi, H. (2024). *Chemical composition, biological activities, uses, nutritional and mineral contents of cumin (Cuminum cyminum). Measurement: Food, 14*, 100157. https://doi.org/10.1016/j.meafoo.2024.100157

Pendão, C., & Silva, I. (2022). *Sensores de fibra óptica y redes de detección: descripción general de los principios principales y aplicaciones*. *Sensors, 22*(19), 7554. https://doi.org/10.3390/s22197554

Prieto-Martínez, F. D., Arciniega, M., & Medina-Franco, J. (2018). *Molecular docking: Current advances and challenges*. *TIP. Revista Especializada en Ciencias Químico-Biológicas, 21*(Supl. 1), e20180143. https://doi.org/10.22201/fesz.23958723e.2018.0.143

Priya, & Garg, A. P. (2023). *Health benefits of cumin in foods: A review*. *Journal of Biomedical Research & Environmental Sciences, 4*(8), 1253–1262. https://doi.org/10.37871/jbres1792

Pukalskienė, M., Pukalskas, A., Dienaitė, L., Revinytė, S., Pereira, C. V., Matias, A. A., & Venskutonis, P. R. (2021). *Recovery of bioactive compounds from strawberry (Fragaria × ananassa) pomace by conventional and pressurized liquid extraction and assessment their bioactivity in human cell cultures*. *Foods, 10*(8), 1780. https://doi.org/10.3390/foods10081780

Saad, H., Elfeky, S. A., El-Gamel, N. E. A., & Abo Dena, A. S. (2025). *Organophosphate pesticides: A review on classification, synthesis, toxicity, remediation and analysis. RSC Advances, 15*, 40802–40822. https://doi.org/10.1039/D5RA05552K

Thomsen, R., & Christensen, M. H. (2006). *MolDock: A new technique for high-accuracy molecular docking*. *Journal of Medicinal Chemistry, 49*(11), 3315–3321. https://doi.org/10.1021/JM051197E

Vinson, J. A., Proch, J., & Bose, P. (2001). *Determination of quantity and quality of polyphenol antioxidants in foods and beverages* (pp. 103–114). https://doi.org/10.1016/S0076-6879(01)35235-7

Wang, M., Abbineni, G., Clevenger, A., Mao, C., & Xu, S. (2011). *Upconversion nanoparticles: Synthesis, surface modification and biological applications. Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine, 7*(6), 710–729. https://doi.org/10.1016/j.nano.2011.02.013

Yang, J. M., & Chen, C. C. (2004). *GEMDOCK: A generic evolutionary method for molecular docking*. *Proteins, 55*(2), 288–304. https://doi.org/10.1002/prot.20035