

*Universidad de Puerto Rico  
Recinto Universitario de Mayagüez  
Decanato de Artes y Ciencias*

*Informe Anual 2020-2021*

*Sometido por:*

*Astrid J. Cruz Pol*

*01 de julio de 2021*

**Tabla de Contenido**

*Página*

**Información general del Decanato y Unidades Adscritas**

- A. *Misión y Visión*
- B. *Descripción y funciones*
- C. *Estructura de la unidad*
- D. *Perfil del Decanato*

**Informe de iniciativas, actividades y logros de acuerdo al Plan Estratégico**

- A. *Misión*
- B. *Institucionalizar una cultura de Planificación Estratégica y Avalúo*
- C. *Estar a la vanguardia de la educación superior en Puerto Rico garantizando que nuestros alumnos reciben la mejor educación*
- D. *Aumentar y Diversificar las Fuentes de Ingreso de la Institución*
- E. *Implementar Procesos Administrativos Ágiles y Eficientes*
- F. *Fortalecer la Investigación y Labor Creativa Competitiva*
- G. *Impactar a Nuestra Sociedad Puertorriqueña*
- H. *Fortalecer el Sentido de Pertenencia y “Orgullo Colegial”*

**Información General del Decanato y Unidades Adscritas**

*A. Misión y Visión*

- a. Misión y Visión del Decanato o CID*
- b. Misión y Visión de unidades adscritas al Decanato, CID o Rectoría*

*B. Descripción y Funciones*

- a. Descripción y Funciones del Decanato o CID*
- b. Descripción y Funciones de las unidades adscritas al Decanato, CID o Rectoría*

*C. Estructura Organizacional*

- a. Organigrama del Decanato o CID*
- b. Organigramas de las unidades adscritas al Decanato, CID o Rectoría*

*D. Perfil del Decanato y Departamentos*

- a. Programas académicos*
- b. Matrícula subgraduada y graduada por programa académico*
- c. Grados otorgados por programa académico*
- d. Personal docente y no docente*

**Informe de iniciativas, actividades y logros de acuerdo al Plan Estratégico**

A. Resumen Ejecutivo

*Durante el año académico 2020-2021, estuvimos laborando bajo las circunstancias especiales de una pandemia mundial. Los cursos del Departamento de Química fueron ofrecidos en modalidad asistida por tecnología durante el primer semestre. El segundo semestre algunos cursos fueron ofrecidos por primera vez en modalidad a Distancia o Híbrida. Esto constituyó un verdadero reto tanto para los profesores como para los estudiantes. A raíz de las circunstancias surgieron diversas situaciones que fueron atendidas administrativamente. En términos académicos, el ofrecimiento de los Laboratorios de Química en modalidad asistida por tecnología constituyó un gran reto. A tales efectos se escribieron propuestas para obtener fondos del CARES ACT para proporcionarle a los estudiantes licencias de la aplicación Beyond LabZ para realizar simulaciones de experimentos en los cursos de Química General y Química Orgánica. Además, se obtuvieron fondos para obtener programados para el acceso remoto a instrumentación de laboratorios de Química Analítica. Utilizando protocolos de seguridad, se ofreció en modalidad presencial el laboratorio de Química Física I y otros cursos. Durante este año académico prácticamente todos los profesores del Departamento de Química obtuvieron la Certificación de Educación a Distancia de CREAD.*

*El programa de seminario graduado continuó activo durante todo el año teniendo como presentadores a profesores invitados, profesores del departamento, representantes de industrias químicas y estudiantes graduados. En términos de servicio al estudiantado, se adoptaron con éxito las herramientas para atender la matrícula (tickets), se implementaron nuevos procesos de comunicación con los estudiantes y se recibieron visitas presenciales de estudiantes de primer año. En términos de los programas graduados, se realizó la evaluación quinquenal de los programas de MS y PhD. Nuestros investigadores sometieron alrededor de 14 propuestas de investigación a agencias federales. De estas propuestas dos fueron adjudicadas, una fue rechazada y las demás están en espera. Los estudiantes graduados han continuado con sus proyectos de investigación siguiendo los protocolos de seguridad establecidos. En el año académico 2020-2021 se aceptaron 11 nuevos estudiantes graduados. En términos curriculares, se crearon tres nuevos cursos; uno a nivel subgraduado (Laboratorio de Introducción a Química de Alimentos), dos a nivel graduado (Química de Alimentos Avanzada y Laboratorio de Química de Alimentos Avanzada). Por otro lado, 46 estudiantes completaron un grado BS en Química, 2 estudiantes completaron un grado MS en Química y 3 estudiantes completaron un grado Ph.D. en Química Aplicada.*

*En cuanto al personal docente, el Departamento de Química publicó dos convocatorias a plazas probatorias como Catedrático(a) Auxiliar y al momento se ha llenado una de ellas. Además, se le extendió un nombramiento de profesor adjunto al Dr. José Centeno por un periodo de tres años.*

**B. Misión**

*Preparar profesionales en la disciplina de la química ofreciendo programas de excelencia tanto a nivel graduado como subgraduado, y programas de investigación de alta calidad. Generar conocimiento que contribuya al desarrollo de la sociedad y a la solución de los problemas que aquejan. Contribuir a la cultura de la comunidad académica y de la sociedad en general.*

- Durante el año académico 2020-2021 se graduaron 46 estudiantes del programa de BS en Química, 2 del programa de MS en Química y 3 estudiantes del programa de Ph.D. en Química Aplicada. Durante este año académico, los estudiantes tuvieron la oportunidad de matricularse en los cursos de investigación subgraduada, a pesar de la pandemia, y se permitieron las actividades de investigación poniendo en práctica protocolos de seguridad ajustados a la situación. Alrededor de seis estudiantes del Departamento de Química están participando de internados de verano en universidades en EEUU. Mantuvimos comunicación con las asociaciones estudiantiles afiliadas al Departamento de Química, las cuales se mantuvieron muy activas a pesar de la pandemia.*
- XXIV Sigma Xi Poster Day– el 10 y 11 de mayo de 2021 se celebró esta actividad, la cual se celebra anualmente, pero que tuvo que ser cancelada en el año 2020. En esta actividad los estudiantes de ciencias, ingeniería y matemáticas presentan, en forma de afiches, sus trabajos de investigación. Esta actividad se realizó este año en una plataforma virtual y fue todo un éxito en términos de participación y de audiencia.*

**C. Institucionalizar una cultura de Planificación Estratégica y Avalúo**

*Durante el año académico 2020-2021 se nombró al Dr. Rodolfo Romanach como representante ante la facultad para el Comité de Planificación Estratégica.*

**D. Estar a la vanguardia de la educación superior en Puerto Rico garantizando que nuestros alumnos reciben la mejor educación**

- Durante el año académico 2020-2021 la mayoría de los profesores del Departamento de Química completaron la Certificación de Enseñanza a Distancia*

de CREAD. La facultad del Departamento de Química había aprobado en el verano del 2020 que los cursos de conferencias de Química pueden ser ofrecidos en modalidad híbrida o a distancia, siguiendo la Certificación 19-85 del Senado Académico del RUM. Esto permitió que en el segundo semestre del año académico 2020-2021 se ofrecieran varios cursos en modalidad a Distancia e Híbridos por profesores que poseen la certificación de CREAD.

- Continuamos con oferta de la Certificación en Bioquímica.
- Se ofrecieron varios seminarios/talleres a los estudiantes graduados relacionados a la preparación de publicaciones científicas.
- El programa de Seminario Graduado estuvo activo durante todo el año 2020-2021, utilizando modalidad virtual para ser ofrecidos. La Dra. Carmen Vega es la coordinadora del Seminario Doctoral.

Seminarios ofrecidos en el Departamento de Química durante el año académico 2020-2021

CONFERENCIANTE	FECHA	TITULO	AGENCIA
Dr. Juan López Garriga	28 de Agosto 2020	"Hydrogen Sulfide (H <sub>2</sub> S) in Humans: Physiology, Biochemistry and Relevance"	UPRM
Dr. Carlos D. García	4 de septiembre 2020	"It's just oxygen: taking advantage of chemical reactivity in analytical processes"	"Clemson University, Clemson "
Dra. Aikomari Guzmán	11 de septiembre 2020	"Prebiotic Chemistry, Thioester World Scenario: Formation of Thiodepsipeptides via Thioester-Amide exchange	Profesora, UPRM
MSc. Zuleika Sanoguet	25 de septiembre 2020	Evolution as a scientist: from a chemistry student to a bioanalytical technical sales representative	Bioanalytical Instruments. Co.
Dr. Joaquín A. Hernández	2 de octubre 2020	La Investigación en la Industria Petroquímica para una Sociedad Sostenible	Esentia, Cartagena, Colombia
MSc. Limaris Reyes Miranda	16 de octubre 2020	INVESTIGATING OUT-OF-SPECIFICATION (OOS) TEST RESULTS FOR PHARMACEUTICAL PRODUCTION	Bio/Pharmaceutical & Drug Substance Manufacturing
Dr. Carlos D. García	23 de octubre 2020	A practical approach to write and publish a scientific paper	(Wiley) & RSC Advances (Royal Society of Chemistry)
COMITÉ GRADUADO DEPT.	30 de octubre 2020	Submission of a Research Paper	UPRM

Dr. José g. García	13 de noviembre 2020	Leveraging Technology to Enable Rapid/Reliable Testing in Pharmaceutical Laboratories	MERCK/ Pharmaceutical
Dr. Rodolfo Romañach	20 de noviembre 2020	Real Time Writing of a Research Paper Not Waiting until all the Data is Collected	Profesor UPRM
MSc. Myrna Reyes	4 de diciembre 2020	Single-Step Processing of Cu And Ag Nanocrystals And Nanocomposites For Antimicrobial Applications.	Candidata Doctoral-UPRM
MSc. Vladimir Villanueva	11 de diciembre 2020	Quantum Cascade Laser Spectroscopy and Microelectromechanical System for development of sensitive analytical methods	Candidato Doctoral-UPRM
Sol Rosado Arrollo, MSc	22 de enero de 2021	Biotecnología: Herramienta en la Sostenibilidad Alimentaria	PRABIA
José Centen, PhD	29 enero de 2021	Assessing the Effect of Metals in Human Health:	University of Maryland School of Medicine
Dr. Diego A. Alvarez Días	5 de febrero de 2021	La secuenciación como una herramienta de alarma temprana ante epidemias en Colombia	Instituto Nacional de Salud de Colombia, S.A.
Jesús M. Velázquez, PhD	12 de feb. 2021	Towards Remediating Water and Decarbonizing Energy Infrastructure Through Design of Multidimensional Materials	Unv. Of California, Davis
Ing. Mayra Guzmán Kaslow	19 de feb. 2021	The Uncomfortable Road to Success & How to set your Goals for your Success	GK Pharmaceutical, Inc
Dr. Sandro Da Rocha	26 de feb. 2021	Dendrimer Nanomedicines for the Treatment of Local Lung and Systemic Diseases upon Pulmonary Administration	Virginia Commonwealth Univ.
Dr. Federico Rabuffetti	5 de marzo de 2021	Thermosensitive Phosphors: Luminescent Materials as Optical Temperature Sensors	Wayne State University
Frances Heredia	19 de marzo de 2021	Aptamers: Roadmap for Studying Protein Complexes And Machine Learning Applications	Candidata Doctoral UPRM

		Calibration Model Development for The Process Analytical Technology Analysis of Pharmaceutical Powder Mixtures Using Near Infrared Spectroscopy	Cadidato Doctoral UPRM
Pedro Martínez	23 de abril de 2021		
Dr. Rodolfo Romañach	30 de abril de 2021	Preparando una publicación científica	Profesor - UPRM

- *Para poder continuar con el ofrecimiento de los laboratorios de Química General y Orgánica, se obtuvieron los fondos necesarios para adquirir las licencias del programado Beyond LabZ para todos los estudiantes. Se reconoce a la Dra. Wanda Pérez por esta labor. Utilizando este programado se diseñaron experimentos virtuales para los cursos mencionados (Dra. Wanda Pérez, Dra. Dámaris Suazo, Dra. Aikomari Guzmán) y se adiestró a los Ayudantes de Cátedra en el uso de los mismos.*
- *Recientemente se asignaron fondos CRRSAA a la institución para atender la transición a la actividad presencial y para fortalecer la enseñanza de laboratorios virtuales. A tales efectos se volvió a someter una propuesta para obtener las licencias para ofrecer los laboratorios de Química General y Orgánica durante el verano 2021 (Dra. Wanda Pérez) y la misma fue aprobada. Además, el Departamento de Química sometió siete (7) propuestas para atender, por medio de talleres, las deficiencias debido a la pandemia en destrezas de laboratorio en los cursos de Química General, Orgánica y Analítica, y para adquirir equipo para ofrecer laboratorios de forma virtual.*

### **Propuestas sometidas por el Departamento de Química para los Fondos CRRSAA**

1- Laboratorio Virtual de Química General y Química Orgánica, Dra. Wanda Pérez

2- Taller de destrezas de Laboratorio de Química General- Dra. Wanda I. Pérez Mercado, Prof. Sara Delgado, Prof. Verónica Sánchez y Dra. Damaris Suazo

3- Taller Remedial de Destrezas de Laboratorio Fundamentales de Química Orgánica- Dra. Aikomari Guzmán y Dra. Wildeliz Torres



4- Workshops for the “Fortalecimiento de Destrezas” in the Analytical Chemistry Laboratory, Aidalú Joubert

5- Habilitación de Salón de Seminario y Centro de Cómputos con Recursos de Enseñanza Virtual-Astrid J. Cruz Pol, Ángel Matos

6- Hyphenating cyberinfrastructure and instrumental capabilities for an integral STEM laboratory experience - Marco De Jesús, Aidalú Joubert

7- Improving Cyberinfrastructure and Instrumental Capabilities of Undergraduate Research Laboratory for remote access operations – Marco De Jesús

**E. Aumentar y Diversificar las Fuentes de Ingreso de la Institución**

Durante el año académico 2020-2021 investigadores del Departamento de Química sometieron 14 propuestas de investigación para obtener fondos de agencias locales e internacionales.

**Propuestas Sometidas por el Departamento de Química durante el año académico 2020-2021**

<b>Proposal Title</b>	<b>Principal Investigator</b>	<b>Total Cost</b>	<b>Proposal Status</b>	<b>Sponsor Name</b>
Rapid Diagnosis Test for Breath Samples Based on Mid-Infrared Laser Spectroscopy coupled with Multivariate Analysis	SAMUEL HERNANDEZ RIVERA	999,915.00	Pending	Department of Homeland Security
Quantum Cascade Laser-Grazing Angle Reflectance Assisted by Multivariate Analysis for the Rapid Diagnosis of SARS-CoV-2 in Breath Samples	SAMUEL HERNANDEZ RIVERA	947,014.00	Pending	Department of Homeland Security
Chemometrics for Process Accuracy	RODOLFO J ROMANACH	41,000.00	Funded	Avara Pharmaceutical Services
Intermittent/Continuous Monitoring of SARS-CoV-2 in Air and Wastewaters, and on Surfaces using Mid Infrared Lasers coupled with Multivariate Analysis	SAMUEL HERNANDEZ RIVERA	999,652.00	Pending	Department of Homeland Security
Strengthening STEM Education at The University of Puerto Rico, Mayaguez Campus (UPRM) with Research Activities Based on DoD Objectives and Goals	SAMUEL HERNANDEZ RIVERA	310,904.00	Not Funded	Department of Defense
Ferrocene-Hormone Conjugates as Target Specific Drugs for Breast Cancer	ENRIQUE MELENDEZ MARTINEZ	435,792.00	Pending	HHS - National Institutes of Health

Detection of High Explosives using Transmission Raman and Quantum Cascade Laser Spectroscopies: A Sensor Fusion Modality Approach	SAMUEL HERNANDEZ RIVERA	453,317.00	Pending	Department of Defense
Center for Sustainable Water Remediation (CSWR) using Novel Green Magnetic Bio-Nanocomposites: Phase 1- Alginate-based composites for remediation and alternative uses of wastewaters from nuclear plant	FELIXR ROMAN VELAZQUEZ	300,000.00	Pending	Savannah River Nuclear Solutions, LLC
Synchrotron Light in Environmental Sciences: Increasing Knowledge on ENMs Fate and Transport	MARTHA LOPEZ MORENO	149,097.00	Pending	Puerto Rico Science and Technology Trust
Mid-scale RI-1 (M1:IP): Design of the UPRM Center for Composite Nanomaterials (UPR-CCN)	MARCO DE JESUS RUIZ	19,226,030.00	Pending	National Science Foundation
Soft Target Engineering to Neutralize the Threat Reality (SENTRY)	SAMUEL HERNANDEZ RIVERA	250,000.00	Pending	Northwestern University
Renovation of the Nuclear Magnetic Resonance Facility	ENRIQUE MELENDEZ MARTINEZ	460,125.00	Pending	USDA - National Institute of Food and Agriculture
WIDELY TUNABLE QCL (WT-QCL) SYSTEM FOR STRENGTHENING MATERIALS RESEARCH AND EDUCATION AT UPRM WITH DoD GOALS AND OBJECTIVES	SAMUEL HERNANDEZ RIVERA	300,969.00	Pending	Department of Defense
CaS nanostructures to limit the proliferation of cancer tumors: in vivo and ex vivo evaluation of CaS in CDX lung cancer animal models.	MIGUEL CASTRO ROSARIO	75,000.00	Pending	Puerto Rico Science and Technology Trust

- *Se sometió un “Letter of Intention” a:*  
*Institución: Sloan Foundation*  
*STEM without Frontiers: A Coalition to Support MS/PhD Education*  
*Participantes (del RUM): Martha L. López, Joselyn Albaladejo, Jessica Torres, Rodolfo Romanach*  
*Participantes (fuera del RUM): CienciaPR Giovanna Guerrero Medina*
  
- *Se sometieron 7 propuestas CRRSAA para obtener fondos para: (1) ofrecer talleres de destrezas de laboratorio para aquellos estudiantes que tomaron laboratorios virtuales (2) obtener equipo y aplicaciones que permitan la realización de experimentos virtuales (3) equipar salón de seminario con tecnología que permita transmitir clases y conferencias “live streaming”(4) obtener tecnología que permita el control remoto de instrumentación de laboratorio.*

**F. Implementar Procesos Administrativos Ágiles y Eficientes**

- *El personal administrativo del Departamento de Química se adiestró en el uso de tecnología para realizar trámites administrativos, para realizar reuniones, y dar servicio a los estudiantes de forma virtual.*
- *Se establecieron hojas de rutas para los trámites administrativos.*
- *En la semana del personal administrativo se realizó una actividad de reconocimiento a todo el personal con las aportaciones de los docentes. La actividad consistió de un almuerzo y un obsequio a nuestro personal administrativo.*
- *Las reuniones departamentales y de los diferentes comités se realizaron de forma virtual y podemos concluir que esa modalidad de reuniones agiliza los procesos y permite mayor eficiencia.*
- *El personal directivo del Departamento de Química participó de los Talleres de Gerencia Administrativa ofrecidos por la oficina del Rector.*

#### G. Fortalecer la Investigación y Labor Creativa Competitiva

- *Durante el año académico 2020-2021, los investigadores del Departamento de Química, en su mayoría, continuaron con el desarrollo de sus proyectos de investigación y la mentoría de estudiantes graduados y subgraduados.*

#### Artículos Científicos del Departamento de Química publicados durante el año académico 2020-2021.

1. *Martínez-Cartagena, P. A.; Sierra-Vega, N. O.; Alvarado-Hernández, B. B.; Méndez, R.; **Romañach, R. J.**, An innovative sampling interface for monitoring flowing pharmaceutical powder mixtures. *J. Pharm. Biomed. Anal.* 2021, 194, 113785.*
2. *Aldama, J.; Shi, Z.; Ortega-Zúñiga, C.; **Romañach, R.J.**; Lysenko, S., Fractal and Polarization Properties of Light Scattering Using Microcrystalline Pharmaceutical Aggregates. *Appl. Spectrosc.* 2021, 75 (1), 94-106.*
3. *Reyes-Blas, M, Maldonado-Luna, N., Rivera-Quiñones, C., Vega-Avila, A. , **Roman-Velázquez, F.** and Perales-Perez, O. (2020) Single Step Microwave Assisted Synthesis and Antimicrobial Activity of Silver, Copper and Silver-Copper Nanoparticles. *Journal of Materials Science and Chemical Engineering*, 8, 13-29.*
4. *Acevedo Rivera, Y. M.; Meléndez, M.; **Pastrana-Ríos, B.**, Real-time monitoring of trehalose crystallization using quantum cascade laser microscopy and 2D-COS. *Journal of Molecular Structure* 2020, 1212, 128136.*
5. *Galán-Freyte, N.J., Pacheco-Londoño, L.C., Figueroa-Navedo, A.M. Ortiz-Rivera, W., Castro-Suarez, J.R., and **Hernández-Rivera, S.P.** “Modulated-laser source induction system for remote detection of infrared emissions of high explosives using laser-induced thermal emission,” *Opt. Eng.*, 2020, 59(9): 092008-1-10.*
6. *Colón-Mercado A.M. Vázquez-Vélez, K.M., Caballero-Agosto, E., Villanueva-López, V., Infante-Castillo, R., **Hernández-Rivera, S.P.** “Detection and classification of high explosives*

- samples deposited on various substrates types using a mid-infrared laser grazing angle probe assisted by multivariate analysis,” *Opt. Eng.*, 2020, 59(9), 092011-1-14.
7. Velázquez-Aponte, R.A; **Cassé C.**, Antiproliferative Properties of Ethanolic and Aqueous Graviola Leaf Extracts on Tongue Squamous Cell Carcinoma Cell line-25. *Journal of Medical Case Reports and Reviews*. 2020, 3(08). <https://doi.org/10.15520/jmcr.v3i08.201>
  8. Güette-Fernández, J. R.; Narvaez Pita, X.; **Melendez, E.**; **Pares-Matos, E.I.**, Interaction of metallocene dichlorides with apohuman transferrin: A spectroscopic study and cytotoxic activity against human cancer cell lines. *International Journal of Molecular Biology: Open Access* 2020, 5 (3), 79-109.
  9. Heredia, F. L.; Resto, P. J.; **Parés-Matos, E. I.**, Fast Adhesion of Gold Nanoparticles (AuNPs) to a Surface Using Starch Hydrogels for Characterization of Biomolecules in Biosensor Applications. *Biosensors* 2020, 10 (8).
  6. Marchany-Rivera, D.; Smith, C. A.; Rodriguez-Perez, J. D.; **López-Garriga, J.**, Lucina pectinata oxyhemoglobin (II-III) heterodimer pH susceptibility. *Journal of Inorganic Biochemistry* 2020, 207, 111055.
  7. *Rodriguez-Mackenzie, A. D.*; *Arbelo-Lopez, H. D.*; *Wymore, T.*; **Lopez-Garriga, J.**, A reaction pathway to compound 0 intermediates in oxy-myoglobin through interactions with hydrogen sulfide and His64. *J. Mol. Graphics Model*. 2020, 94, 107465.
  8. *Carmona-Negrón, J. A.*; *Liboy-Lugo, J. M.*; *Santana, A.*; **Meléndez, E.**, Synthesis and structural studies of 16-ferrocenemethyl-estra-1,3,5(10)-triene-3,17 $\beta$ -diol and its interaction with human serum albumin by fluorescence spectroscopy and in silico docking approaches. *Applied Organometallic Chemistry* 2020, 34 (4), e5483.
  9. *Galán-Freyte, N.J.*; *Ospina-Castro, M.L.*; *Medina-González, A.R.*; *Villarreal-González, R.*; **Hernández-Rivera, S.P.**; *Pacheco-Londoño, L.C.* Artificial Intelligence Assisted Mid-Infrared Laser Spectroscopy In Situ Detection of Petroleum in Soils. *Appl. Sci.* 2020, 10, 1319.
  10. *Riascos-Rodríguez, K.*; *Marks, S.*; *Evans, P. G.*; **Hernández-Rivera, S. P.**; *Ruiz-Caballero, J. L.*; *Piñero, D.*; *Hernández-Maldonado, A. J.*, Lithium Functionalization Promoted by Amide-Containing Ligands of a Cu(pzdc)(pia) Porous Coordination Polymer for CO<sub>2</sub> Adsorption Enhancement. *Crystal Growth & Design* 2020, 20 (6), 3898-3912.
  11. *Sierra-Vega, N. O.*; **Romañach, R. J.**; *Méndez, R.*, Real-time quantification of low-dose cohesive formulations within a sampling interface for flowing powders. *Int. J. Pharm.* 2020, 588, 119726.
  12. *Cárdenas, V.*; *Rosas, J. G.*; *Pinzón, C.*; **Romañach, R. J.**, Statistical Methods in Quality by Design and Process Analytical Technologies for Continuous Processes to Enable Real-Time Release. In *Continuous Pharmaceutical Processing*, Nagy, Z. K.; El Hagrasy, A.; Litster, J., Eds. Springer International Publishing: Cham, 2020; pp 361-393.
  13. *Sierra-Vega, N. O.*; *Martínez-Cartagena, P. A.*; *Alvarado-Hernández, B. B.*; **Romañach, R. J.**; *Méndez, R.*, In-line monitoring of low drug concentration of flowing powders in a new sampler device. *Int. J. Pharm.* 2020, 583, 119358.
  14. *Alvarado-Hernández, B. B.*; *Sierra-Vega, N. O.*; *Martínez-Cartagena, P.*; *Hormaza, M.*; *Méndez, R.*; **Romañach, R. J.**, A sampling system for flowing powders based on the theory of sampling. *Int. J. Pharm.* 2020, 574, 118874.
  15. *Alvarado-Hernández, B. B.*; *Scicolone, J. V.*; *Ortega-Zuniga, C.*; *Román-Ospino, A. D.*; *Colón-Lugo, Y. M.*; *Aymat, E.*; *Sánchez, E.*; *Muzzio, F. J.*; **Romañach, R. J.**, Method transfer of a near-infrared spectroscopic method for blend uniformity in a poorly flowing and hygroscopic blend. *J. Pharm. Biomed. Anal.* 2020, 180, 113054

16. Fontalvo-Lascano, M. A.; Méndez-Piñero, M.; **Romañach, R. J.**, *The Business Case for Process Analytical Technology (PAT)-A Starting Point. American Pharmaceutical Review* **2020**, 23 (1), 54-56.
17. **Román Velazquez FR**, Fernandez Alos V, Perales Perez OJ, inventors; University of Puerto Rico, assignee. *Synthesis of biocomposite alginate-chitosan-magnetite nanoparticle beads for removal of organic persistent contaminants from water systems*, patent 10569253. 2020 February 25, 2020.
18. Vega-Cartagena, M., Flores-Vélez, E.M., Colón-Quintana, G.S., Blasini Pérez, D.A., **De Jesús, M.A.**, Cabrera, C.R., **2019**. *Silver-Palladium Electrodeposition on Unsupported Vulcan XC-72R for Oxygen Reduction Reaction in Alkaline Media. ACS Applied Energy Materials* 2, 4664-4673.

- Con la debida autorización del presidente de la UPR y el rector de la UPRM, se publicaron dos convocatorias para plazas docentes de Catedrático(a) Auxiliar. Se llevó a cabo un proceso de ascenso inicial por un comité Adhoc y más adelante el Comité de Personal realizó el proceso de evaluación de todos los solicitantes e hizo sus recomendaciones. Al momento, una de las plazas ha sido ocupada y la segunda continua vacante. Se ha solicitado autorización al rector para reabrir la convocatoria nuevamente.

#### H. Impactar a Nuestra Sociedad Puertorriqueña

- El 10 y 11 de mayo se celebró el Sigma Xi Poster Day, actividad abierta a toda la comunidad universitaria y a la comunidad en general. A continuación, los abstracts: de los estudiantes de Química que participaron en esta actividad:

**CHEMISTRY ABSTRACTS**  
**SIGMA XI POSTER DAY, MAY 10<sup>TH</sup>, 2021**

**P24**

**DETECTING OPIOIDS HIDDEN INSIDE MAIL FLATS USING PORTABLE RAMAN SPECTROMETERS AND CHEMOMETRICS**

Caballero, E. and Hernández Rivera, Samuel P.  
Department of Chemistry, UPR-Mayagüez

Deaths by opioid overdose have persists as one of the great problems in our country. The U.S. Customs and Border Protection (CBP) agency currently needs better technology for detecting opioids on IMFs. Our work is focused on detecting an opioid simulant inside four different types of mail flats using portable Raman spectroscopy. The developed SIMCA model was able to classify 94% of the test samples correctly.

**P25**

**DRUGS UPTAKE BY LEUCAENA LEUCOCEPHALA IN AN ELECTROCHEMICAL ANALYSIS**

Crespo-Medina, Marielys MS<sup>1</sup>; Crespo-Morales, Karla N.<sup>1</sup>; Nieves-Cortés, Yadeiris L.<sup>2</sup>; Torres-Rodríguez, Alejandra P.<sup>2</sup>; Arroyo-Hernández, Andrea N.<sup>1</sup>; Chango-Acevedo, Andrea G.<sup>3</sup>; Gómez-Sánchez, Alexandra M.<sup>2</sup>;

*Orraca-Albino, Stephanie<sup>2</sup>; Saldaña-López, Danelyn<sup>1</sup>; Valentín-Acevedo, Adrián G.<sup>1</sup>; Vega, Carmen A. PhD<sup>1</sup>  
Department of Chemistry-UPR-Mayagüez<sup>1</sup>; Department of Chemical Engineering, UPR-Mayagüez<sup>2</sup>; Department of  
Biology, UPR-Mayagüez<sup>3</sup>*

*A study was conducted to determine the potential to uptake of four different medications by *Leucaena Leucocephala*: Duloxetine, Acetaminophen, Gabapentin, and Naproxen. Procedures for treating the seeds were carried out and kept them in a controlled environment of growing up, then they were transferred to a hydroponic system with the necessary nutrients, UV light and oxygenation to improve their growth. For each drug, an electrochemical calibration curve was constructed that allows measure and comparing the concentration of each observation during experimentation. A determined amount of medicine was placed in each hydroponic planting and the variation of its concentration over time was measured. Finally, the decrease in the concentration of the drugs was determined on the third day, however, there were increases in the concentration of said drugs in all the samples on the fifth day; In this way, it is concluded that there are factors that influence the measurement results of the electric current in the process, requiring the refining of the method to establish coherent and statistically significant results.*

**P26**

**ZINC SULFUR-BASED QUANTUM DOTS: SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION BY HRTEM**

*Cruz-Romero, S.A.; Luciano-Velázquez, J.; Quiles-Vélez, C.I.; Nash-Montes, V.I.; López-Moreno, M.L. Ph.D.;  
Bailón-Ruiz, S.J. Ph.D.*

*Department of Chemistry, UPR-Mayagüez*

*Nanostructures are materials characterized by their nanoscale size and dimensions between 1 to 100 nm. These materials have distinct properties such as optical, magnetic, and electrical which define their application in technology, industry, and medicine. Moreover, nanostructures are found in daily or household products including cosmetics, clothing, electronic devices, and even in medical procedures. Due to their broad applications, researchers are focused to synthesize these nanostructures in a cost effective an environment friendly manner. Zinc-based nanomaterials have been used in diagnosis of plant diseases, photocatalytic degradation of pharmaceuticals, and dye waste removal. This research is focused on the synthesis and characterization of ZnS quantum dots using High-Resolution Transmission Electron Spectroscopy which allows to nanoparticles characterization. The main research goals of this project are: 1) to synthesize ZnS quantum dots of different nanometric sizes, 2) to stabilize quantum dots in water with thioglycolic acid, and 3) to characterize quantum dots using High-Resolution Transmission Electron Microscopy, Electron Dispersion X-ray analysis, Fluorescence Spectroscopy, Absorbance Spectroscopy, and Infrared.*

**P27**

**STIMULATION OF ZnS AND Mn-DOPED ZnS QUANTUM DOTS ON GERMINATION PERCENTAGE OF *Lactuca sativa***

*Quiles-Vélez, C.I.; Luciano-Velázquez J.; Cruz-Romero, S.A.; Nash-Montes, V.I.; López-Moreno, M.L. Ph.D.;  
Bailón-Ruiz, S. J. Ph.D.*

*Department of Chemistry, UPR-Mayagüez*

*Nanoparticles have the potential to be used in broad applications nowadays. Improving plant production safely is of great importance because of population growth and climate change; semiconductor quantum dots may be able to achieve this successfully for the producers, environment, and consumers. Quantum dots might be used in plants as nanofertilizers. They are seen as an alternate route from contaminating fertilizers. Nanoparticles are, likewise, able to expand crop production and biomass in plants. Nonetheless, in large amounts, these can be harmful and toxic. *Lactuca sativa*, a horticulture consumed globally, will be exposed to pure ZnS and Mn-doped quantum dots synthesized with a reflux system. Our work's objectives are the following: 1) Compare the percentage of germination*

in *Lactuca sativa* between ZnS and Mn-doped ZnS stabilized; and 2) Evaluate the growth of hypocotyl and radicle of *Lactuca sativa* in the concentration of 0 ppm and 250 ppm.

**P28**

**HIGH EXPLOSIVES DETECTION IN INTERNATIONAL MAIL USING SEE-THROUGH RAMAN SPECTROSCOPY ASSISTED BY MULTIVARIATE ANALYSIS**

Muñiz López, Wilmaris; Rivera Cruz, Yasmín M.; Hernández Rivera, Samuel P.  
Department of Chemistry, UPR-Mayagüez

See-Through Raman Spectroscopy (STRS) was used for the non-invasive, non-destructive sample analysis of high explosives (HEs) in mail envelopes or flats. The method resulted in a safe and rapid analysis of HEs: ammonium nitrate (AN), urea nitrate (UN), and pentaerythritol tetranitrate (PETN). The analysis was carried on under normal conditions without sample preparation to simulate a scenario similar to the ones found at an International Mail Facility (IMF). The ST-RS system operates under high photon scattering conditions enables a deeper penetration by the incident laser beam. It is a portable, rapid, high throughput technology that enables the characterization of chemical and biological threats (CBTs) by exciting their vibrational modes. Multivariate analysis (MVA) was applied due to the vast amount of data generated in the experiments, and the spectral interferences presented by the envelopes (flats). Under these conditions, it was complicated to obtain robust results in a short time. Exploratory Data Analysis (EDA) was applied to separate HEs signals from mail flats spectral data. Principal Component Analysis (PCA) was capable of classifying each variable, explaining most of the experimental variance using the first two principal components: PC-1 and PC-2. The PCA-based models were efficient in classifying HEs' vibrational markers even when contained within several flats layers and classifying HEs into different clusters. PC loadings were used to determine each variable's contribution to the PCA models, which resulted in correlation coefficients ( $R^2$  values) of 0.99 and 0.92 for the first PC for UN and PETN, respectively.

**P29**

**BIO-THREATS DETECTION IN INTERNATIONAL MAIL USING RAMAN SPECTROSCOPY**

Serrano-Zayas, T., Colón-González, F., and Hernández-Rivera, S.  
Center for Chemical Sensors Development / ALERT-II-DHS Center of Excellence  
Department of Chemistry, UPR-Mayagüez

Bacteria, viruses, and toxins are the main groups considered as biological threats (BTs). Unlike chemical hazards, BTs detection tends to be more complicated due to organisms having less than 5  $\mu\text{m}$  in diameter, leading to delays in identification. The evidence produced by these BTs can delay identifying targets for hours, days, and even weeks until a pattern can be recognized. This slow process in acquiring the required evidence for identification/detection makes BTs a high risk to national security. They are relatively invisible and from various settings where they can directly be used for terrorism. Since powdered anthrax spores were deliberately put into letters and mailed through the US postal system in 2001, investigations on BTs have taken great importance to prevent events that could result in sicknesses and, the worst scenarios, even deaths. Our research is based on detecting the biological simulant *Bacillus thuringiensis* (Bt) as a simulant for *Bacillus anthracis* (anthrax) due to their genetic resemblance. The project's success should lead to non-destructive analysis and reduce the risks of anthrax attacks. Bt is also an aerobe that can produce endospores and has morphological and biochemical similarities to anthrax. The endospores are responsible for many human diseases, and they will be the main components to analyze, having a much smaller diameter than other microorganisms. These endospores can sporulate in adverse conditions. According to Clinical Infectious Diseases, the mortality rate of inhaling anthrax is high, but it can vary. Raman Scattering spectroscopic technique will allow detecting this biological simulant on different surfaces to elucidate their vibrational behavior with the possibility of implantation for analysis by First Responders on mail packages. Large sample size from the acquired Raman spectra will be used to provide a robust multivariate analysis model for further use in national security purposes.

**P30**

**ELECTROCHEMICAL ANALYSIS OF THE BIORREMIEDIATION OF  
PHARMACEUTICAL DRUGS**

*Velázquez, J.; Ballester, H.; Santiago, D.; De Jesús, C.; Aponte, D.; Vega-Olivencia, C. PhD.*

*University of Puerto Rico, Mayagüez.*

*Department of Chemistry, Mayagüez, Puerto Rico.*

*Abuse of pharmaceutical drugs has led to wastewater contamination due to their presence in human feces. These waters eventually get to sources of potable water and may present a hazard to humans. In addition, pharmaceutical companies must constantly regulate their disposal of drugs wastes to minimize pollution. These companies use methods of detection of contaminants such as High-Performance Liquid Chromatography, Gas Chromatography, etc. This research is aimed to develop a new detection limit (LOD) method for pharmaceutical drugs using Cyclic Voltammetry (CV), an Electroanalytical technique that use a Glassy Carbon (GC) as a working electrode. CV is a more economically viable method of lower detection limits than previously mentioned methods. During this study, various drug sample solutions, such as Clonazepam and a combination medication of Acetaminophen, Pamabron and Pyrilamine, were prepared in a 0.1M potassium chloride (KCl) solution used as the solvent. Solutions with a range of concentrations from  $10^{-2}$  to  $10^{-6}$  were prepared for each drug and the variation in the anodic or cathodic peaks was observed. Afterwards, a calibration curve of current vs. concentration was prepared for each drug. Preliminary results show that reduction or oxidation signals may be obtained even at parts per million concentrations.*

**P31**

**ANTIPROLIFERATIVE PROPERTIES OF ETHANOLIC AND AQUEOUS GRAVIOLA LEAF EXTRACTS  
ON TONGUE SQUAMOUS CELL CARCINOMA CELL LINE-25 (SCC-25)**

*Velázquez-Aponte, R.A.; Cassé, C.*

*Department of Chemistry, UPR-Mayagüez*

*Annona muricata, commonly known as Graviola, soursop, or guanabana, is an evergreen tree native to the tropics with a long history of use in ethnomedicine in indigenous communities in Africa and South America. Its active phytoconstituents have provided medicinal benefits against various ailments and diseases such as arthritis, parasitic infection, hypertension, fever, or diabetes. Studies conducted in vitro and in vivo have concluded that Graviola phytoconstituents have anti-cancer and anti-tumor properties. One of the characteristics of cancer cells is their uncontrolled proliferation rate. In that sense, molecules that inhibit cell proliferation offer potential therapeutical benefits. While Graviola has been reported to be toxic to cell lines models for breast, colorectal, skin, head and neck, lung, liver, pancreatic, and prostate cancer, its effect on models of head and neck cancers has not been fully investigated. To fill this knowledge gap, we have assessed the antiproliferative/cytotoxic properties of Graviola on Squamous Cell carcinoma cell line 25 (SCC-25), an in vitro model for head and neck cancers. The results of our study are reported here. We botanically identified a local Graviola specimen, located in Boquerón, Cabo Rojo, PR, which leaves we collected and dried. We subsequently prepared ethanolic (EE) and aqueous leaf extracts (AE) and tested their respective antiproliferative activities on SCC-25 cells. The cells were treated with increasing amounts of EE or EA for 24h (dose-response analysis) and the respective doses leading to a 50% inhibition of cell growth (GI50) determined. The lower the GI50, the cytotoxic active the extract. Our results show that EE is 4 times more active in inhibiting the growth of SCC-25 than AA (respective GI50 of 61.7  $\mu\text{g/mL}$ , and 274.6  $\mu\text{g/mL}$ ). We hypothesize that some organic compounds responsible for the antiproliferative/cytotoxicity of the Graviola leaves were selectively extracted by Ethanol. Plans include the chemical characterization of those bioactive compounds. To assess whether EE could qualify as a potential anticancer drug with little to no toxicity to normal/non-cancer cells, we will also conduct comparative dose-response analyses on SCC cell lines vs. non-cancerous oral cells. By doing so, we hope to discover natural molecules to be used as alternative treatments for Oral Squamous Cell Carcinomas.*



*I. Fortalecer el Sentido de Pertenencia y “Orgullo Colegial”*

- *Bienvenida a los estudiantes subgraduados (virtual) y graduados (presencial) de nuevo ingreso - 6 de agosto de 2020*
- *Bienvenida a estudiante graduados de nuevo ingreso - 8 de enero de 2021.*
- *Se realizaron reuniones virtuales con los líderes de las asociaciones estudiantiles. - 11 de febrero de 2021*
- *Conversatorio con estudiantes de primer año- 18 de febrero de 2021*
- *Se realizó una visita guiada con un pequeño grupo de estudiantes de primer año para que visitaran el campus.*