

BASE DE DATOS DE MODELOS MOLECULARES DIGITALES 3D DE COMPUESTOS ORGÁNICOS PERSISTENTES USANDO SOFTWARE LIBRE.

A. Vilchez ⁽¹⁾, V. Marzocchi ⁽²⁾, H. Beldoménico ⁽³⁾ y N. Vanzetti ⁽⁴⁾

Facultad de Ingeniería Química (FIQ), Universidad Nacional del Litoral (UNL)
Santiago del Estero 2654, (S3000AOM) Santa Fe, Argentina

(1) Programa Informática Académica, FIQ, UNL. alguvi@unl.edu.ar

(2) Instituto de Tecnología Celulósica, FIQ, UNL. vmarzocc@fiq.unl.edu.ar

(3) Laboratorio Central de Análisis, FIQ, UNL. hbeldo@fiq.unl.edu.ar

(4) Estudiante de Ingeniería Química, FIQ, UNL. nvanzetti@gmail.com

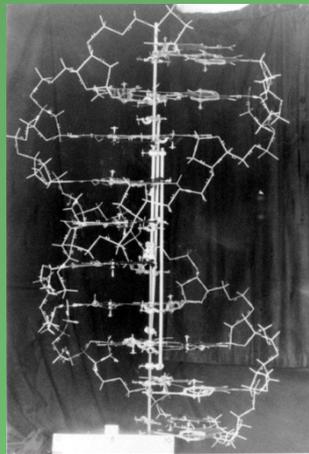
MODELOS MOLECULARES Y SOFTWARE LIBRE

Modelos Moleculares Mecánicos 3D

Hace más de medio siglo, Watson y Crick propusieron la estructura helicoidal del ADN. Para poder visualizar esta estructura construyeron un modelo mecánico de 2 m de altura. Hoy existe una variada oferta comercial de modelos moleculares de esferas (átomos) y conectores (enlaces), de material plástico.



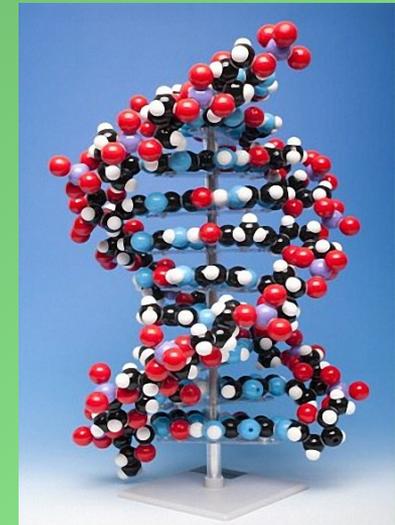
J.D. Watson J.D. y F.H. Crick.
Descubridores del modelo
del ADN



100
cm

Modelo del ADN de
Watson y Crick,
altura aproximada 2
m.

60 años



30 cm

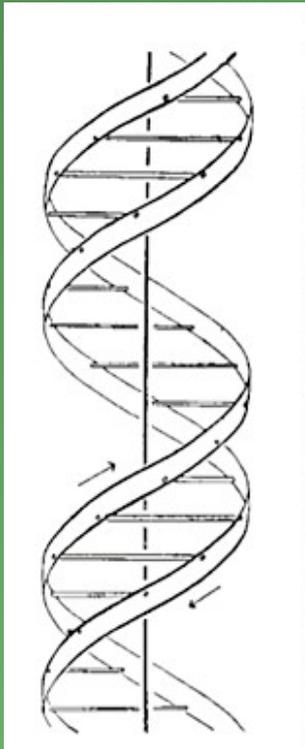
Modelo comercial del AND. Material
plástico, altura aproximada 60 cm.

VISUALIZACIÓN DE MOLÉCULAS

Modelos Moleculares Digitales 3D

Watson y Crick publicaron en 1953 una figura esquemática del modelo propuesto para el ADN.

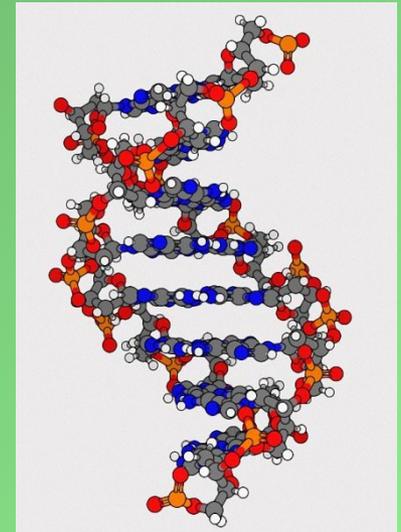
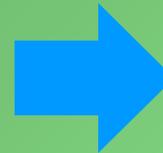
Hoy se pueden obtener en pocos minutos modelos moleculares digitalizados 3D con múltiples opciones de renderización incluso visión estereoscópica, sin grandes requerimientos de hardware y software.



This figure is purely diagrammatic. The two ribbons symbolize the two phosphate—sugar chains, and the horizontal rods the pairs of bases holding the chains together. The vertical line marks the fibre axis

Watson J.D. and Crick F.H.
Molecular structure of acid nucleic
Nature, 171(4356):737-738,
1953.

60 años



10 cm

Modelo Molecular 3D del ADN
obtenido en la ventana de
dibujo del software libre
Gabedit, usando el asistente
Build.

SOFTWARE DE MODELADO MOLECULAR

<http://cmm.info.nih.gov/>

The screenshot displays the NIH Center for Molecular Modeling (CMM) website. On the left is a vertical navigation menu with links such as 'CMM Home Page', 'CMM staff', 'CMM publications', 'Molecular Modeling Support for NIH Scientists: "MMIG@NIH"', 'Software', 'Hardware at the NIH', 'NIH Library', 'U.S. National Library of Medicine', 'NIH Roadmap Initiative', 'NIH Home Page', and 'Privacy Policy'. A green arrow points from the 'Software' link to the main content area.

The main content area features a central banner with the NIH logo and the text 'Center for Molecular Modeling' above a 3D molecular model. Below the banner, introductory text describes the CMM's role in the Division of Computational and Mechanical Biophysics, focusing on molecular dynamics simulations and their applications in drug design and enzyme mechanism studies.

On the right side of the main content area is a 'Universal Molecular Modeling Software List'. This list includes a note stating that the CMM does not endorse the use of any of the software listed. It features a legend with abbreviations for software categories: BP (Biopolymers), G (Molecular Graphics), DD (Drug Design), MC (Monte Carlo), P (Available for Personal Computers), MD (Molecular Dynamics), DB (Database), MP (Multipurpose), U (Utility), BI (Bioinformatics), X (Crystallography), MM (Molecular Mechanics), QM (Quantum Mechanics), and MB (Model Building). Below the legend is a table of software titles, each with a corresponding icon indicating its availability or documentation status.

Universal Molecular Modeling Software List			
Note: This list is provided for convenience only. The CMM does not endorse the use of any of the software listed below.			
Legends			
BP	Biopolymers	X	Crystallography
G	Molecular Graphics	MM	Molecular Mechanics
DD	Drug Design	QM	Quantum Mechanics
MC	Monte Carlo	MB	Model Building
P	Available for Personal Computers		
MD	Molecular Dynamics		
DB	Database		
MP	Multipurpose		
U	Utility		
BI	Bioinformatics		
link to main Web site link to documentation link to a ftp site link to other site			
Software List			
AbM		BP	
ADF		QM	
Agile Molecule		G, MB	
AMBER		MM, MD	
AMPAC		QM	
AMSOL		QM	
APEX-3D		DD	
AutoDock		DD	
Babel		U	
CAChe		MP, P	
Cambridge Structural Database (CSD)		DB	
CAVEAT		DD	
CHARMm		MM, MD	
CHARMM		MM, MD	
Chem-X		MP, DD, P	
ChemDBS-3D		DD, DB	
CHIME		G, P	
ClogP		DD, P	
CMR		DD	
CLIP		DD	
Composer		BP, MB	

116 Software

SOFTWARE DE MODELADO MOLECULAR

- Un solo sitio (<http://cmm.info.nih.gov>) posee listado de 116 software.
- Clasificados en 14 categorías

BP: Biopolymers MP: Multipurpose
MD: Molecular Dynamics QM: Quantum Mechanics
X: Crystallography MC: Monte Carlo
G: Molecular Graphics U: Utility
DB: Database MB: Model Building
MM: Molecular Mechanics P: Available for Personal
Computers
DD: Drug Design BI: Bioinformatics

- El listado no es exhaustivo.
- Incluye software libre y propietario.
- El Gamess (libre) incluye Gamess-UK, Avogadro, Gamess-US, PC-Gamess.
- No incluye el Gabedit (libre).
- Cientos de software de Modelado Molecular.
-



**Gran cantidad de software libre
para Modelado Molecular**

IMPORTANCIA DEL SOFTWARE LIBRE EN EL MODELADO MOLECULAR

- n **Promover e incorporar el uso de software libre para Modelado Molecular.**
- n **Seleccionar e instalar software libre para Modelado Molecular en toda computadora disponible en la FIQ-UNL (gabinets, laboratorios, oficinas).**
- n **Investigación aplicada a Docencia:** Biblioteca de moléculas sencillas.
- n **Investigación aplicada a Servicios/Extensión:**
Biblioteca de compuestos orgánicos especiales: bifenilos policlorados, dioxinas y furanos.
- n
- n **Investigación Básica:** Modelo de pared *fibrosa*.



IMPORTANCIA DEL SOFTWARE LIBRE EN EL MODELADO MOLECULAR

ACTIVIDADES REALIZADAS

Actividades		2008	2009	2010	2011	2012
1	Plataforma Linux (Distribuciones Debian y Ubuntu)	■	■	■	■	■
2	Software libre de Modelado Molecular	■	■	■	■	■
3	Ciclo de charlas	■	■			
4	Taller para docentes		■			
5	Talleres para estudiantes		■	■	■	
6	Modificaciones curriculares (Materia optativas y Químicas básicas)			■	■	■
7	Material de apoyo docente			■	■	■
8	Expo Carreras UNL 2010			■		
9	Seminario interno docentes Informática				■	
10	Modificación curricular (Gabedit en Informática)				■	■
11	Seminario interno para docentes FIQ					■
12	Taller para docentes preuniversitarios					■
13	Taller para alumnos ingresantes FIQ					■

Detalle de las actividades desarrolladas por año. (TE&ET 2011)

IMPORTANCIA DEL SOFTWARE LIBRE EN EL MODELADO MOLECULAR

PRODUCCIÓN

Marzocchi V.A., Vilchez A., Beldoménico H. y Vanzetti N.

Aplicación de software libre en actividades universitarias docentes y de extensión:

Visualización y base de datos de bifenilos policlorados.

40º JAIIO: Jornadas Argentinas de Informática, 8º Jornadas Argentinas Software Libre.

29 agosto al 2 setiembre 2011, UTN-Facultad Regional Córdoba, Argentina.

Vilchez A.G., Marzocchi V.A., Beldoménico H. y Vanzetti N.

Los Modelos Moleculares Digitales 3D y la Química.

ECImag 2012: Vª Escuela y Workshop Argentino en Ciencias de las Imágenes.

16 al 20 Julio 2012, FICH-UNL, Argentina.

Vilchez A.G., Marzocchi V.A., Beldoménico H. y Vanzetti N.

Base de Datos de Modelos Moleculares Digitales 3D de Compuestos Orgánicos Persistentes usando Software Libre.

Un caso de aplicación:

CONTAMINANTES ORGÁNICOS PERSISTENTES

OBJETIVOS DE ESTE TRABAJO

- q Uso de software libre para editar y visualizar bifenilos policlorados, dioxinas y furanos.
- q Creación de una Base de Datos de Compuestos Orgánicos Persistentes para ser accedido por la web.

SOFTWARE LIBRE UTILIZADO

- Gabedit
- Jmol
-
- PostgreSQL



SOFTWARE LIBRE GABEDIT

<http://gabedit.sourceforge.net/home.html>

What is Gabedit ?

Gabedit is a graphical user interface to computational chemistry packages like Gamess-US, Gaussian, Molcas, Molpro, MPQC, OpenMopac, Orca, PCGamess and Q-Chem. It can display a variety of calculation results including support for most major molecular file formats. The advanced "Molecule Builder" allows to rapidly sketch in molecules and examine them in 3D. Graphics can be exported to various formats, including animations.

Laboratoire de Spectrométrie Ionique et Moléculaire | UFR Physique | Le CNRS | Annu

cnrs

Accueil du site > Annuaire > ALLOUCHE Abdul-Rahman

ALLOUCHE Abdul-Rahman
M.Conf

Website / Bibliographie

Université Claude Bernard Lyon 1

Statut : Permanent - Organisme de rattachement : UCBL
Contact : [ALLOUCHE Abdul-Rahman](#)
Téléphone : 04 72 43 19 29
Équipe : [Physico-chimie théorique](#)

Labo
Équip
Services techniques
Publications
Ressources
Liens
Recrutements
Doctorants



SOFTWARE LIBRE GABEDIT

Algunas de las herramientas disponibles en el Gabedit útiles para su uso como editor de moléculas son:

- Posee una librería interna con unas 380 moléculas clasificadas en 10 categorías: grupos funcionales, anillos, heterocíclicos, hidrocarburos, drogas, fullerenos, aminoácidos (L), aminoácidos (D), agentes antivirales, y misceláneas.
- Permite al usuario crear librerías de moléculas y agregarlas a la librería interna.
- Lee y graba archivos en formato propio y en varios formatos de software de química computacional: Gamess-US, Gaussian, HyperChem, Molcas, Molpro, MPQC, Open Mopac, Orca, PC Gamess, Q-Chem y otros.



SOFTWARE LIBRE GABEDIT

- Lee y graba archivos con formato pdb (Protein Data Bank) lo que permite visualizar gran cantidad de archivos alojados en repositorios en internet.
- Asistente Build para construir rápida y fácilmente moléculas lineales, en anillo, con un eje de simetría, polipéptidos, ácidos polinucleicos, polisacáridos y nanotubos.
- Ventana de dibujo con sencillas y potentes herramientas para construir moléculas, con distintas opciones de visualización y renderización.
- Panel de mediciones de parámetros conformacionales: distancias de enlaces, ángulos y ángulos diedros.





SOFTWARE LIBRE GABEDIT

- **Editor XYZ que permite editar las coordenadas de los centros atómicos.**
- **Genera archivos pdf y jpg de las moléculas visualizadas en la ventana de dibujo.**
- **Además de todas estas herramientas útiles para la visualización en 3D, el Gabedit puede calcular la energía de moléculas, optimizar estructuras químicas y realizar muchos otros cálculos de química computacional.**





SOFTWARE LIBRE GABEDIT

The screenshot displays the Gabedit software interface. The main window, titled "Gabedit : Draw Geometry", shows a 3D ball-and-stick model of a water molecule (H₂O) with a hydrogen atom (H) and an oxygen atom (O) connected by a dashed line. The model is labeled (a). To the right of the main window is a panel labeled (b) containing measurement data:

Distances (Angstroms)

H[3]-O[1]	0.980054080
H[3]-H[6]	2.359021195
O[1]-H[6]	1.777437762

Angles (Degrees)

H[3]-O[1]-H[6]	114.5074263
----------------	-------------

Dihedral (Degrees)

Move group

Averaged distance (Angstroms)

0.980686

Below the main window is a smaller window titled "Geometry Editor" labeled (c). It contains a "TYPE" dropdown menu set to "Select a option" and "Units" set to "Angstrom". Below this is a table with the following data:

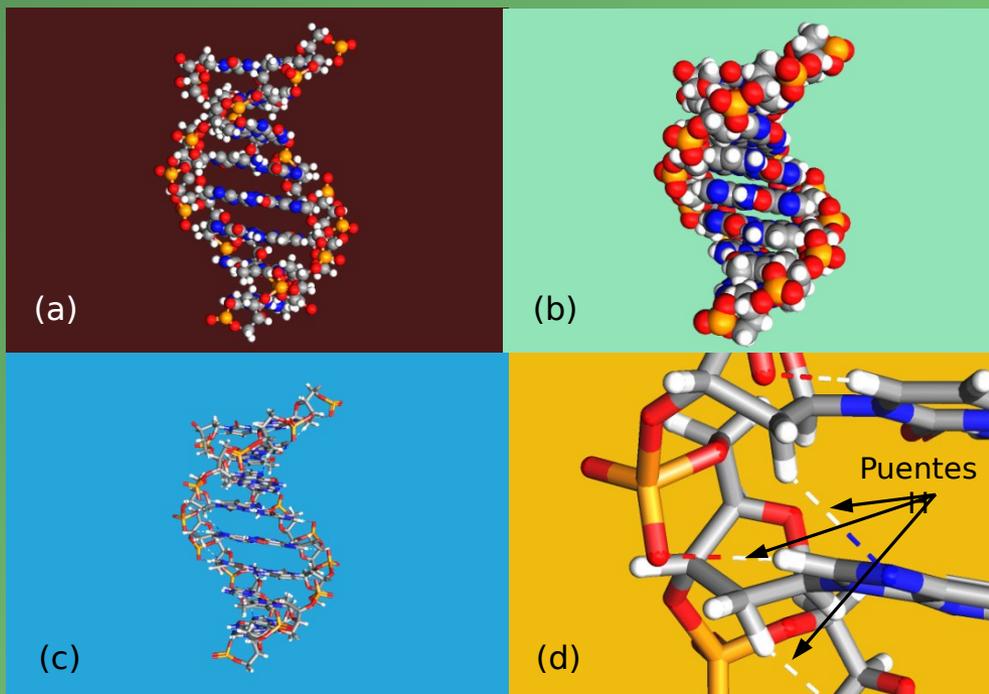
XYZ Editor							
Nr	Symbol	MM Type	PDB Type	Residue	X	Y	Z
1	O	UNK	O28	HOH	-1.239000	1.280000	-1.347
2	H	UNK	H28	1HOH	-1.447000	1.512000	-0.417
3	H	UNK	H28	2HOH	-0.355000	1.683000	-1.476
4	O	UNK	O29	HOH	-1.313000	-1.454000	-1.717
5	H	UNK	H29	1HOH	-0.571000	-1.743000	-1.147
6	H	UNK	H29	2HOH	-1.291000	-0.479000	-1.597

To the right of the XYZ Editor table is a "VARIABLES Editor" table with columns "Name" and "Value".

Gabedit. a) Ventana de dibujo;
b) Panel de mediciones;
c) Editor XYZ.



SOFTWARE LIBRE GABEDIT



Gabedit. Imágenes capturadas de modelos de ADN con distintas renderizaciones.
(a) (b) Bolas y palitos; (c) (d) Palitos.

SOFTWARE LIBRE Jmol



<http://www.jmol.org>

Jmol: un visor Java de código abierto para estructuras químicas en tres dimensiones.

Programa libre, gratuito y de código abierto.

Se puede descargar, usar, copiar y distribuir gratuitamente.

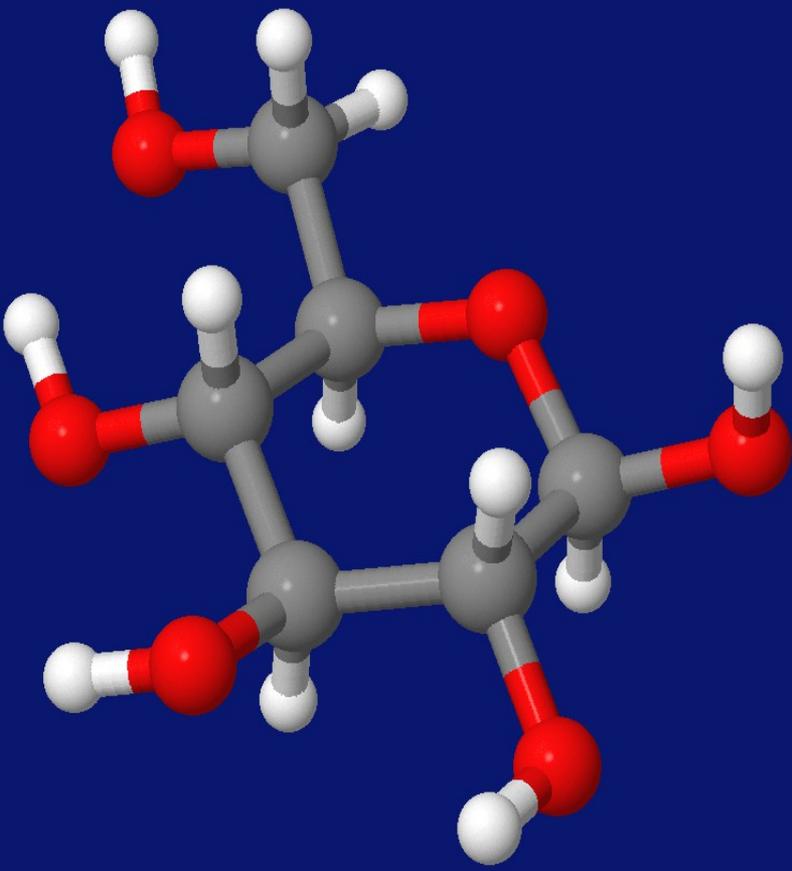
SOFTWARE LIBRE Jmol

- Programa Autónomo
- Insertarse en páginas web.
- Incorporarse como librería de otros programas.

Repositorios de modelos moleculares con Jmol:

SOFTWARE LIBRE Jmol

Biomodel 3:



Biomodel-3 Hecho con **Jmol** 

Bioquímica estructural para enseñanza secundaria

[Instrucciones](#)

- Glúcidos
 - [Monosacáridos](#)
 - [Disacáridos](#)
 - [Polisacáridos](#)
- Lípidos
 - [Ácidos grasos](#)
 - [Triacilgliceroles](#)
 - [Fosfolípidos](#)
 - [Esteroides](#)
 - [Bicapa lipídica](#)
- [Vitaminas](#)
- Proteínas
 - Estructura primaria:
 - [Aminoácidos](#)
 - [Péptidos](#)
 - Estructura secundaria:
 - [Hélice alfa](#)
 - [Hebra beta](#)
 - Estructura terciaria:
 - [Lisozima](#)
 - Estructura cuaternaria:
 - [Hemoglobina](#)
- Ácidos nucleicos
 - [Bases nitrogenadas](#)
 - [Nucleósidos](#)
 - [Nucleótidos](#)
 - [ADN](#)
 - [ARN](#)

[Créditos](#) 

[Guía didáctica](#)

Jmol

Versión **Biomodel-3v11** - abril 2012

Repositorios de modelos moleculares y bases de datos

SOFTWARE LIBRE Jmol

RCSB-PDB Protein Data Bank

The screenshot shows the RCSB Protein Data Bank website. The browser address bar displays www.rcsb.org/pdb/home/home.do. The page title is "Biological Macromolecular Resource".

Left Sidebar:

- Customize This Page**
- Available on the App Store
- PDB-101** (Hide): Structural View of Biology, Understanding PDB Data, Molecule of the Month, Educational Resources, Author Profiles
- MyPDB** (Hide): Login to your Account, Register a New Account
- Home** (Hide): News & Publications, Usage/Reference Policies, Deposition Policies, Website FAQ, Deposition FAQ, Contact Us, About Us, Careers, External Links, Sitemap, New Website Features
- Deposition** (Hide): All Deposit Services, Electron Microscopy, X-ray | NMR, Validation Server, BioSync Beamlines/Facilities, Related Tools
- Tools** (Hide): Download Files

Main Content Area:

Biological Macromolecular Resource

Full Description

Featured Molecules (Hide)

Structural View of Biology (List View of Archive By: Title | Date | Category)

Molecule of the Month
cAMP-dependent Protein Kinase (PKA)
Phosphate groups are perfect chemical groups for modifying the function of proteins: they have a strong negative charge, they are fairly bulky, and they can form multiple hydrogen bonds. When a phosphate group is attached or removed to a protein, it may modify the shape and flexibility of the protein chain, or provide a readily-visible handle for recognition by other proteins.
[Full Article](#)

Protein Structure Initiative Featured System
Solute Channels
Cells maintain a steady traffic of small molecules across their membranes. PSI researchers are discovering the functional features of channels that carry water-soluble molecules into and out of cells.
[Full Article](#) | [Archive](#) | [PSI Structural Biology Knowledgebase](#)

Latest Structures (Hide)

3UF5 : Crystal structure of the mouse Colony-Stimulating Factor 1 (mCSF-1) cytokine
Allosteric competitive inactivation of hematopoietic CSF-1 signaling by the viral decoy receptor BARF1
[View in 3D \(Jmol\)](#)

Right Sidebar:

- New Structures** (Hide): Latest Release, New Structure Papers, Search Unreleased Entries
- New Features** (Hide): **Advanced Search: Diffraction Source**, Latest features released: Website Release Archive: [dropdown]
- RCSB PDB News** (Hide): Weekly | Quarterly | Yearly
2012-08-21
Download RCSB PDB Mobile for the iPhone/iPad
Search the PDB, access MyPDB, view molecules in 3D, and more
Poster Prize Awarded at ACA

EL MOTOR DE BASE DE DATOS:



<http://www.postgresql.org/>

- Gestor de Bases de Datos Relacionales Orientado a Objetos de código abierto más avanzado hoy en día del mundo
- Soporta transacciones multiusuarios, optimización de consultas, herencia y arreglos, además de integridad referencial, y ofrece todas las características de una base de datos profesional (triggers, constraints, secuencias, relaciones, reglas, vistas).
- Extensible, ya que soporta operadores, funciones, métodos de acceso y tipos de datos definidos por el usuario.
- Posee drivers: Odbc, Jdbc, .Net, etc. Soporte de tipos de datos de SQL92 y SQL99.



PostgreSQL

- Soporte de protocolo de comunicación encriptado por SSL.
- Incluye un lenguaje nativo llamado PL/pgSQL.
- Posibilita usar Perl, Python o TCL como lenguaje de procedimiento embebido.
- Flexibilidad o portabilidad. Soporte nativo para los lenguajes de programación más populares: PHP, C, C++, Perl, Python, etc.

PostgreSQL

- Arquitectura cliente/servidor de procesos por usuario, lo que posibilita acceder a través de la web.
- Multiplataforma: Linux, Unix, Mac OS y Windows
- Ilimitado el máximo permitido de bases de datos, y de registros por tablas.
- Posee documentación organizada.
- Comunidades de usuarios muy activas en distintos países.
-
-

COP: Compuestos Orgánicos Persistentes

Los Contaminantes Orgánicos Persistentes (COP) son un grupo de compuestos considerados altamente tóxicos que provocan graves efectos sobre la salud y el medio ambiente.

-Medidas de alcance mundial: Convenio de Estocolmo sobre COP, para proteger la salud humana y medio ambiente.



Eliminando

Reduciendo, las emisiones y las descargas de los COP.

- Tema de importancia y actualidad: acciones concertadas mundialmente.

-El año pasado fue incluido el endosulfán en los COP.

-En Argentina ya se ha comenzado a tomar medidas para su erradicación total.

-A la fecha, los COP incluyen 22 sustancias.

-Algunas son familias de congéneres como el caso bifenilos policlorados, dioxinas y furanos.

BASE DE DATOS DE COP

- **HERRAMIENTAS DE DESARROLLO:**
 - **POSTGRESQL** Motor de base de datos relacional Orientado a Objetos de código abierto.
 - **HTML** para definir las pantallas de acceso a los datos, sus componentes gráficos, etc.
 - **PHP** para crear el código necesario para cubrir lógica particular de la operación de consulta.

BASE DE DATOS DE COP

CONTENIDOS

- Datos referentes a PCBs, dioxinas y furanos.
 - Congénere
 - Fórmula
 - Estructura, descriptor, CAS, etc.
 - Archivo de centros de coordenadas XYZ.
 - Archivo PDB.

BASE DE DATOS DE COP

ACCESO A LA BASE DE DATOS

- Con una interfaz simple se accede a la DB por internet.
 - PCB.
 - Por número de PCB.
 - Por Congénere.
 - Por CAS congénere.
 - Por CAS PCB
 - Dioxinas.
 - Por congénere.
 - Furanos.
 - Por congénere.

BASE DE DATOS DE COPs

- [Principal](#)
- [Consultas](#)
 - [PCB](#)
 - [Por nro de PCB](#)
 - [Por Congéneres](#)
 - [Por CAS congénere](#)
 - [Por CAS PCB](#)

[Furanos](#)

DIOXINAS

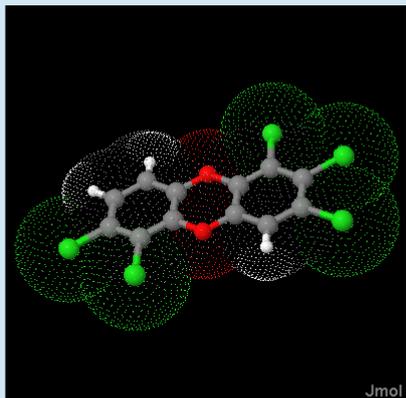
Identificador de Dioxina: 12367

Estructura: 1,2,3,6,7

CAS: 71925-15-0

Congéneres: **Pentaclorodibenzo-p-dioxina**

Fórmula: $C_{12}H_3Cl_5O_2$



Centros de coordenadas en JMOL

[Descargar coordenadas XYZ](#)

VENIDOS AL SITIO OFICIAL DEL PI:56-273
**UALIZACIÓN Y MODELADO MOLECULAR
CROPOLÍMEROS ORGÁNICOS DE INTERÉS
INDUSTRIAL"**

FURANOS

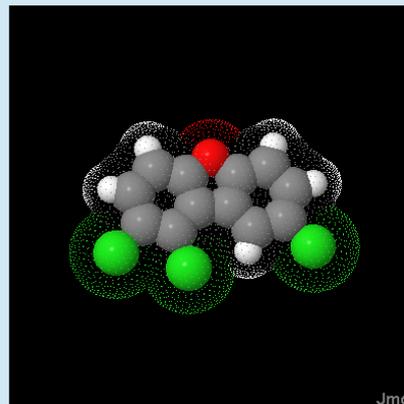
Identificador de Furano: 128

Estructura: 1,2,8

CAS: 83704-34-1

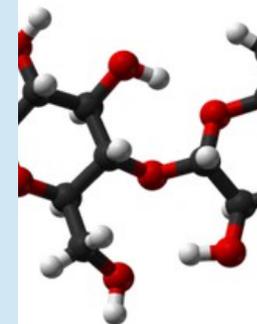
Congéneres: **Triclorodibenzofurano**

Fórmula: $C_{12}H_5Cl_3O$

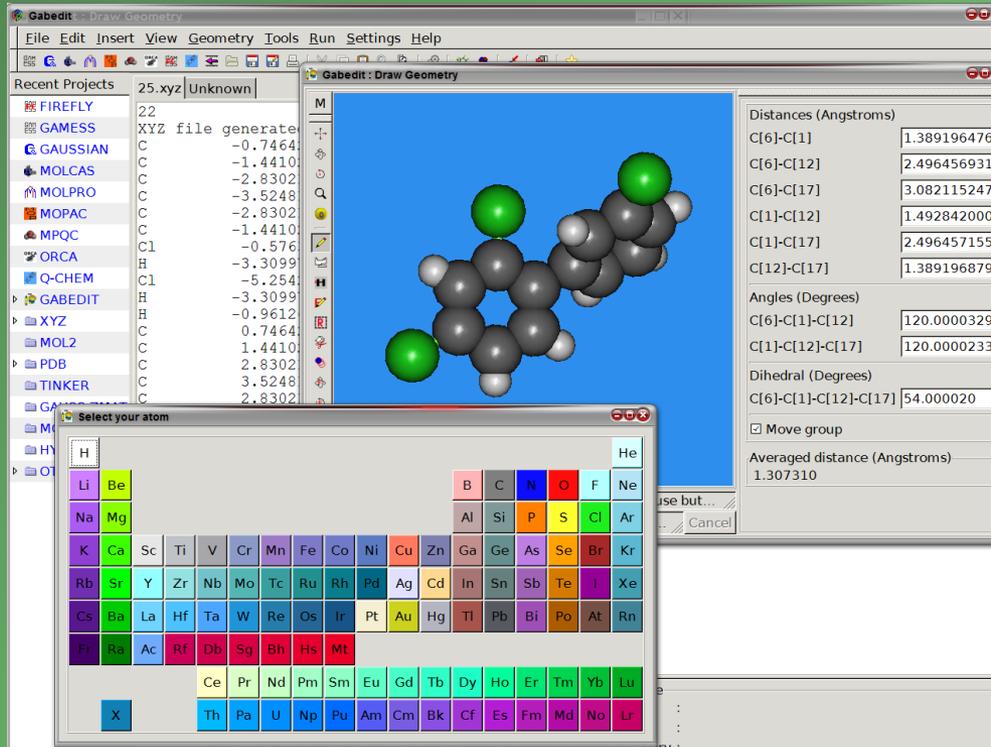


Centros de coordenadas en JMOL

[Descargar coordenadas XYZ](#)



OBTENCION DE LOS DATOS



PCB 25.

- Ajuste del ángulo diedro.
- Reemplazo de átomos de Cloro.
- Ajuste de la distancia de enlace C-Cl
- Renderización.

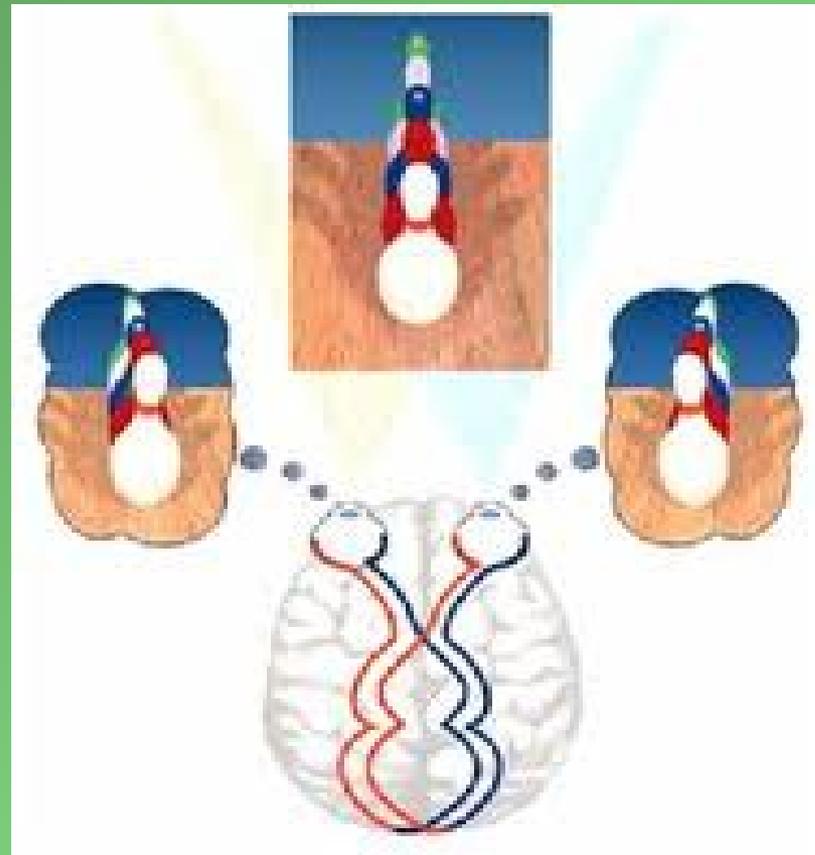
Gabedit: Ventana principal, editor XYZ, ventana de dibujo, panel de mediciones y tabla periódica.

BASE DE DATOS DE COP

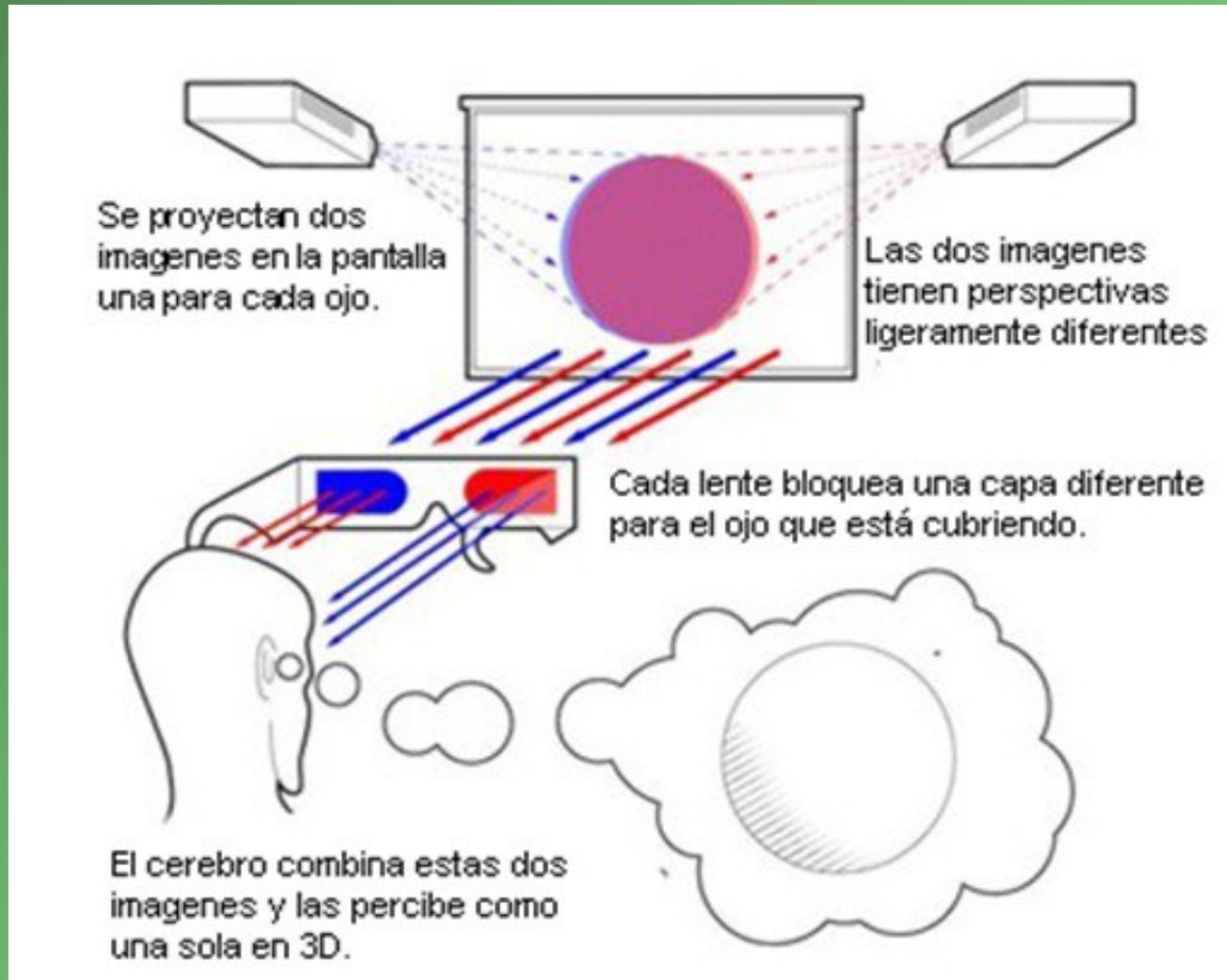
Un agregado especial:

Visualización estereoscópica

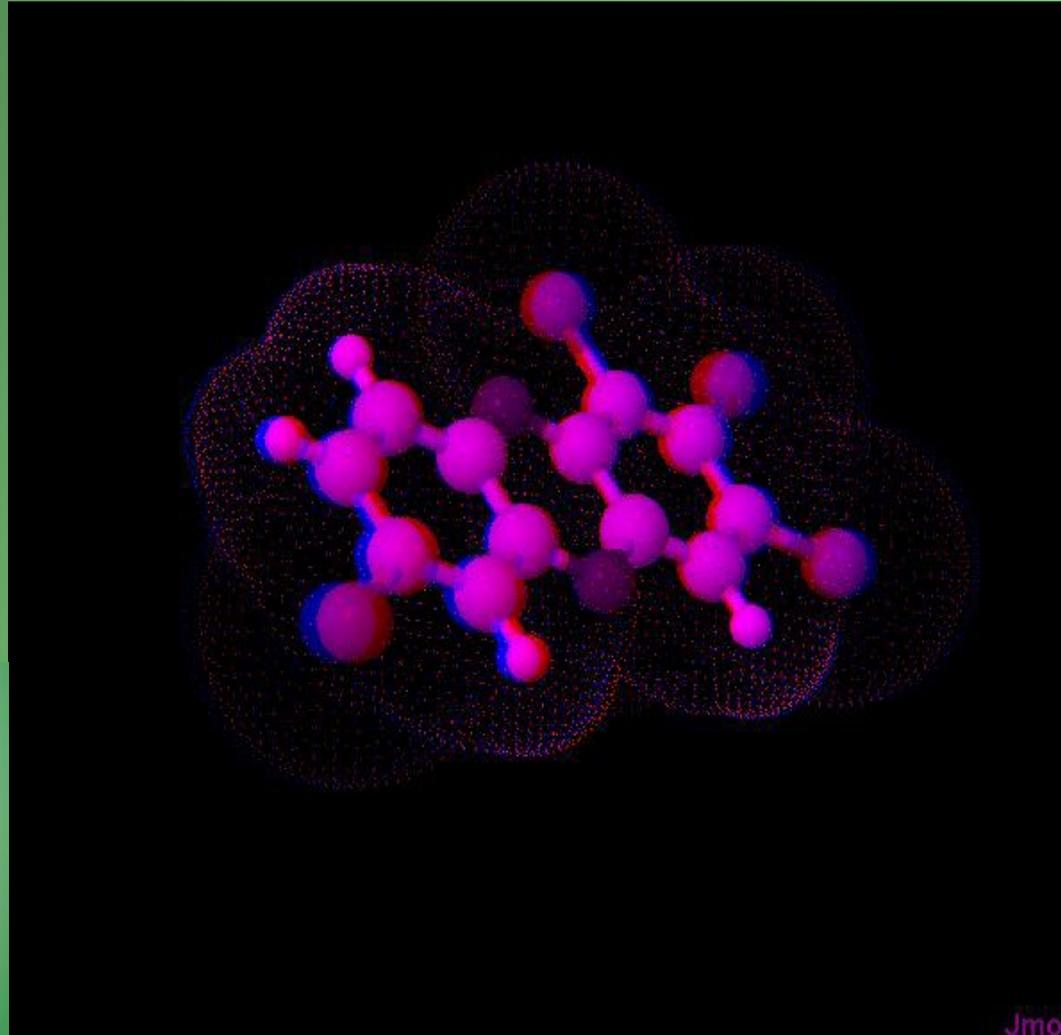
PARALAJE BINOCULAR



VISUALIZACIÓN ESTEREOSCÓPICA CON ANAGLIFOS



VISUALIZACIÓN ESTEREOSCÓPICA CON Jmol



Visualización estereoscópica de 1,2,3,7,tetraclorodibenzo-p-dioxina usando Jmol

DB de MODELOS MOLECULARES DIGITALES 3D DE COMPUESTOS ORGÁNICOS PERSISTENTES USANDO SOFTWARE LIBRE.

APORTES

- Disponibilidad de datos básicos de PCBs, dioxinas y furanos en internet.
- Posibilidad de exportar las coordenadas XYZ de los centros atómicos que los conforman, y el archivo en formato PDB para poder visualizar o trabajarlos con alguna otra herramienta de Modelado Molecular.
- Visualización 3D animada desde la web a través de la mini aplicación JmolApplet.

CONCLUSIONES

- La utilización de software libre como Gabedit evita las restricciones económicas y legales que establecen las licencias de otros software de visualización y modelado molecular, y ha demostrado ser una herramienta muy útil para la obtención de modelos 3D usados en el estudio de la estructura de los COP. Al estar disponible el código, permite desarrollos posteriores como la ampliación de las familias de compuestos químicos de su librería interna.
- La base de datos de COPs desarrollada con el software libre PostgreSQL es una excelente herramienta de apoyo a las actividades docentes y de servicios analíticos, tiene gran potencialidad de ampliación y ha comenzado a ser consultada para temas sanitarios y medioambientales.
- Con el software libre Jmol se puede lograr una visualización y animación 3D más realista a través de pares estereoscópicos a un costo muy bajo.

http://www.fiq.unl.edu.ar/modeladomolecular/Alicia_bd_pcb/www/index.html

BASE DE DATOS DE MODELOS MOLECULARES DIGITALES 3D DE COMPUESTOS ORGÁNICOS PERSISTENTES USANDO SOFTWARE LIBRE.

A. Vilchez ⁽¹⁾, V. Marzocchi ⁽²⁾, H. Beldoménico ⁽³⁾ y N. Vanzetti ⁽⁴⁾

Facultad de Ingeniería Química (FIQ), Universidad Nacional del Litoral (UNL)
Santiago del Estero 2654, (S3000AOM) Santa Fe, Argentina

(1) Programa Informática Académica, FIQ, UNL. alguvi@unl.edu.ar

(2) Instituto de Tecnología Celulósica, FIQ, UNL. vmarzocc@fiq.unl.edu.ar

(3) Laboratorio Central de Análisis, FIQ, UNL. hbeldo@fiq.unl.edu.ar

(4) Estudiante de Ingeniería Química, FIQ, UNL. nvanzetti@gmail.com

GRACIAS POR SU ATENCIÓN