

Ciencias Experimentales

 Universidad
Rey Juan Carlos
| Servicio de Publicaciones

Yolanda Pérez Cortés
(Directora)

V Jornada de Promoción a la Investigación Básica
para estudiantes de Ciencias e Ingenierías

ISBN: 978-84-09-34468-0

LIBRO DE ABSTRACTS

V Jornada de Promoción a la Investigación Básica para
Estudiantes de Ciencias e Ingenierías

7 y 8 de septiembre de 2021

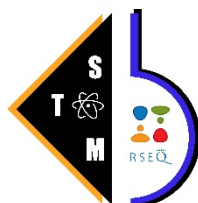
Universidad Rey Juan Carlos

PATROCINADORES

- Universidad Rey Juan Carlos (URJC).



- Real Sociedad Española de química, sección territorial de Madrid (RSEQ-STM).



- Escuela Superior de Ciencias Experimentales y Tecnología.



PROGRAMA DE LA JORNADA

DÍA 7 DE SEPTIEMBRE 2021

9:30-9:45 - PRESENTACIÓN DE LA JORNADA Y APERTURA. Prof. Alejandro Ureña, Prof. Coral Barbas, Dra. Yolanda Pérez y Dr. Santiago Gómez.

9:45-10:30 – NUEVOS RETOS ACTUALES EN EL DESCUBRIMIENTO DE FÁRMACOS Profa. María Luz López Rodríguez - Catedrática de Química Orgánica, Universidad Complutense de Madrid.

10:30-11:15 – MATERIALES COMPUESTOS MULTIFUNCIONALES PARA LOS RETOS DEL TRANSPORTE Y LA ENERGÍA – Dr. Alberto Jiménez Suarez. Profesor Titular, Universidad Rey Juan Carlos.

11:15-11:45 – Pausa café

11:45-12:30 – REDES METAL-ORGÁNICAS: SU GRAN POTENCIAL EN BIOMEDICINA – Dra. Patricia Horcajada Cortés. Investigadora Senior, IMDEA Energía.

12:30-13:15 – ALTA PRESIÓN: ESTRATEGIA PARA DISEÑAR Y CARACTERIZAR MATERIALES – Dr. Javier Sánchez Benítez. Profesor Contratado Doctor, Universidad Complutense de Madrid.

13:15-14:00 – FOTOCATALISIS OXIDATIVA PARA COMBATIR LA CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA URBANA – Dr. Manuel Cruz Yusta. Profesor Titular, Universidad de Córdoba.

14:00-16:00 – Pausa comida

16:00 – SESIÓN DE COMUNICACIONES FLASH 1

16:00-16:05 – FLASH 1: Estitxu Echenique

16:05-16:10 – FLASH 2: Andoni Zabala

16:10-16:15 – FLASH 3: Uxua Huizi

16:15-16:20 – FLASH 4: Laura Razquin

16:20-16:25 – FLASH 5: Samuel Morales

16:25-16:30 – FLASH 6: Miguel Burgos

16:30-16:35 – FLASH 7: Beatriz M. Sierra

16:35-16:40 – FLASH 8: Pablo Guerrero

16:40-16:45 – FLASH 9: Oscar García

16:45-16:50 – FLASH 10: Paulina Garnica

16:50-16:55 – FLASH 11: Giacomo Armani

16:55-17:00 – FLASH 12: Gabriel Sánchez

17:00-17:05 – FLASH 13: Manuel Del Barrio

17:05-17:10 – FLASH 14: Rubén Serrano

17:10-17:15 – FLASH 15: Antonio J. Chacón

17:15-17:20 – FLASH 16: Irene Rincón

17:20-17:25 – FLASH 17: Sorraya Lelouche

17:25-17:35 – Pausa

17:35-17:40 – FLASH 18: Asier Medel

17:40-17:45 – FLASH 19: Christian Rentero

17:45-17:50 – FLASH 20: Daniel González

17:50-17:55 – FLASH 21: Ana María Villa

17:55-18:00 – FLASH 22: Tamara Guerrero

18:00-18:05 – FLASH 23: David Vicente

18:05-18:10 – FLASH 24: Paloma de Oro

18:10-18:15 – FLASH 25: Antonio Ribeiro

18:15-18:20 – FLASH 26: Noelia Rosales

18:20-18:25 – FLASH 27: Aaron Terán

18:25-18:30 – FLASH 28: Iván Romero

18:30-18:35 – FLASH 29: Samuel Blázquez

18:35-18:40 – FLASH 30: Tamara Fernández

DIA 8 DE SEPTIEMBRE 2021

9:30-10:15 – ARCILLAS COMO SISTEMAS TRANSPORTADORES PARA LA LIBERACIÓN CONTROLADA DE FÁRMACOS – Dra. Eva María García Frutos. Científica Titular, Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC

10:15-11:00 – PLASTICIDAD CEREBRAL: LA REORGANIZACIÓN DE NUESTRO CEREBRO FRENTE AL DAÑO. Dra. Juliana M. Rosa - Investigadora Ramón y Cajal, Hospital Nacional de Parapléjicos

11:00-11:30 – Pausa café

11:30-12:15 – SUPERFICIES POLIMÉRICAS CON POROSIDAD MICROMÉTRICA: ESTRATEGIAS DE PREPARACIÓN Y APLICACIONES – Dr. Juan Rodríguez Hernández. Investigador Científico, Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, CSIC.

12:15-13:00 – MATERIALES POROSOS CATALÍTICOS: ESTRATEGIAS BIO-INSPIRADAS PARA IR MÁS ALLÁ DE INMOVILIZAR CENTROS ACTIVOS – Dr. Rubén Mas Ballesté. Profesor Contratado Doctor, Universidad Autónoma de Madrid.

13:00-13:30 — LA ACTIVIDAD ANTRÓPICA, UN ASPECTO CLAVE EN LA CONTAMINACIÓN GEOGÉNICA DE ARSÉNICO EN LAS AGUAS SUBTERRÁNEAS – Dr. Francisco Javier Lillo Ramos. Profesor Titular, Universidad Rey Juan Carlos.

13:30 – SESIÓN DE COMUNICACIONES FLASH 2

13:30-13:35 – FLASH 31: Fernando Martín

13:45-13:50 – FLASH 34: Marina León

13:35-13:40 – FLASH 32: Víctor Gregorio

13:50-13:55 – FLASH 35: Raúl Sanz

13:40-13:45 – FLASH 33: María Dolores de Dios

13:55-14:00 – FLASH 36: Rubén García

14:00-16:00 – Pausa comida

16:00 – CONTINUACIÓN SESIÓN DE COMUNICACIONES FLASH 2

16:00-16:05 – FLASH 37: Zenen Zepeda

16:45-16:50 – FLASH 46: Lara Moreno

16:05-16:10 – FLASH 38: Victoria García

16:50-16:55 – FLASH 47: Rodrigo de Miguel

16:10-16:15 – FLASH 39: Jorge Blanco

16:55-17:00 – FLASH 48: Carlos Agudo

16:15-16:20 – FLASH 40: Elena García

17:00-17:05 – FLASH 49: Karina Ovejero

16:20-16:25 – FLASH 41: Igor de las Heras

17:05-17:10 – FLASH 50: Laura Lozano

16:25-16:30 – FLASH 42: Anabel Morales

17:10-17:15 – FLASH 51: Fernando Herrera

16:30-16:35 – FLASH 43: Miriam Abán

17:15-17:20 – FLASH 52: Diego Heras

16:35-16:40 – FLASH 44: Matías J. Alonso

17:20-17:25 – FLASH 53: Elena Sánchez

16:40-16:45 – FLASH 45: Isabel Coloma

17:25-17:35 – Pausa

17:35-17:40 – FLASH 54: Victor Pérez

17:55-18:00 – FLASH 58: Sandra Pradana

17:40-17:45 – FLASH 55: Marina Tabuyo

18:00-18:05 – FLASH 59: Ana Pérez

17:45-17:50 – FLASH 56: Marta M. González

18:05-18:10 – FLASH 60: Irene Abelenda

17:50-17:55 – FLASH 57: Beatriz Arévalo

18:10-18:15 – FLASH 61: Danko Denchuk

18:25-18:45 – CLAUSURA DE LA JORNADA. Dra. Yolanda Pérez Cortés y Dr. Santiago Gómez Ruiz.

A NOVEL YTTRIUM-BASED METAL-ORGANIC FRAMEWORK FOR EFFICIENT SOLVENT-FREE CYANOSILYLATION OF CARBONYL COMPOUNDS WITH TRIMETHYLSILYL CYANIDE

E. Echenique-Errandonea¹, J.M. Pérez², S. Rojas³, J. Cepeda¹, J.M. Seco¹, I. Fernández², A. Rodríguez-Diéguez³

¹ Departamento de Química Aplicada, Facultad de Química, Universidad del País Vasco UPV/EHU, Paseo Manuel Lardizabal, N° 3, 20018, Donostia-San Sebastián, Spain.

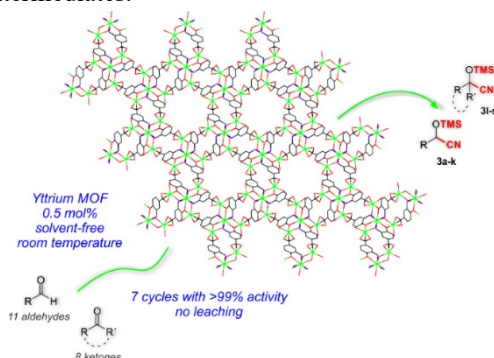
² Department of Chemistry and Physics, Research Centre CIAIMBITAL, University of Almería, Ctra. Sacramento, s/n, 04120, Almería, Spain. Email: ifernan@ual.es

³ Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Av. Fuentenueva S/N, 18071 Granada, Spain

email: estitxu.echenique@ehu.es

Metal–organic frameworks (MOFs) have emerged as a new class of materials with remarkable and exceptional features provided by their ultrahigh porosity, active sites configuration and tailorable chemical structure. Because of these reasons MOFs has become suitable candidates for many applications that go from gas storage, separation, catalysis, to sensing.¹

In this work we present the synthesis and characterisation of a new porous metal–organic framework with the chemical formula $[Y_5L_6(OH)_3(DMF)_3] \cdot 5H_2O$ (**1**) (where L = 3-amino-4-hydroxybenzoate) and its catalytic performance in the solvent free cyanosilylation of a broad scope of aldehydes and ketones. In fact, cyanosilylation reaction is a powerful synthetic tool for the C–C bond formation in organic chemistry and provides access to versatile cyanohydrins that can be easily transformed to plenty of useful compounds in the chemical industry, such as α -hydroxy acids, α -amino acids, β -amino alcohols, and other valuable intermediates.^{2,3}



The results obtained demonstrated that the Y_MOF (**1**) act as catalysts in the solvent-free cyanosilylation of aldehydes and of ketones showing an outstanding catalytic activity in the addition of trimethylsilyl cyanide to aldehydes with short reaction times and excellent yields. The exceptional recyclability and catalysis performed at solvent-free medium, enables reducing one order of magnitude of catalyst loading compared to all related lanthanide-based MOFs described so far in the literature.

References:

- [1] Lee, J.; Farha, O. K.; Roberts, J.; Scheidt, K. A.; Nguyen, S. T.; Hupp, J. T. *Chem. Soc. Rev.* **2009**, *38* (5), 1450–1459.
- [2] Kikukawa, Y.; Suzuki, K.; Sugawa, M.; Hirano, T.; Kamata, K.; Yamaguchi, K.; Mizuno, N. *Angew. Chemie - Int. Ed.* **2012**, *51* (15), 3686–3690.
- [3] Sarkar, A.; Santra, S.; Kundu, S. K.; Hajra, A.; Zyryanov, G. V.; Chupakhin, O. N.; Charushin, V. N.; Majee, A. *Green Chem.* **2016**, *18* (16), 4475–4525.

Acknowledgements:

- State Research Agency (grants RTC-2016-5239-2, CTQ2017-84334-R, PGC2018-102052-A-C22 and PGC2018-102052-B-C21)
- Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities, the European Union (European Regional Development Fund - ERDF)
- Junta de Andalucía (FQM-394)
- Gobierno Vasco/Eusko Jaurlaritz (IT1005-16, IT1291-19) and PRE_2020_2_0014
- University of the Basque Country (UPV/EHU) (GIU 17/13)

FLASH 2

EL ROL DE LA SUERTE EN LA INVESTIGACIÓN: TRATANDO DE EXPLOTAR TODO EL POTENCIAL DE UNA MOLÉCULA

A. Zabala-Lekuona¹, J. Cepeda¹, E. San Sebastian¹, A. Rodríguez-Diéguez², J.M. Seco¹, E. Colacio²

¹Dpto. de Química Aplicada, Facultad de Química, UPV/EHU, Paseo Manuel de Lardizabal nº 3, Donostia-San Sebastián, España

²Dpto. de Química Inorgánica, Universidad de Granada, Av. Fuentenueva s/n, Granada, España
andoni.zabala@ehu.eus

Normalmente, las reacciones no salen como uno espera. Lo habitual es hacer decenas o cientos de intentos para conseguir unos pocos resultados, pero a veces ni eso es suficiente. Sin lugar a dudas, el proceso puede ser desmotivador y frustrante para el investigador que necesita resultados desesperadamente. No obstante, un golpe de suerte puede cambiar el panorama de un día para otro y puede hacer que recuperes la ilusión.

En esta comunicación hablaremos de compuestos de coordinación basados en metales 3d y 4f con propiedades de molécula imán (SMM, Single Molecule Magnet) [1]. En concreto, mostraremos el planteamiento progresivo realizado de cara a pasar de moléculas discretas a materiales 1D donde, un golpe de suerte, dio lugar a un complejo tetranuclear con gran potencial.

Aparte de tener propiedades magnéticas interesantes, dicho sistema ofrece la posibilidad de trabajar la quiralidad, luminiscencia, cambios en el entorno de coordinación, incorporación en superficies, etc. En definitiva, un resultado inesperado puede abrir infinitud de nuevas vías de investigación que, a su vez, entusiasma y anima al investigador a seguir estudiando nuevos materiales, fenómenos y técnicas.

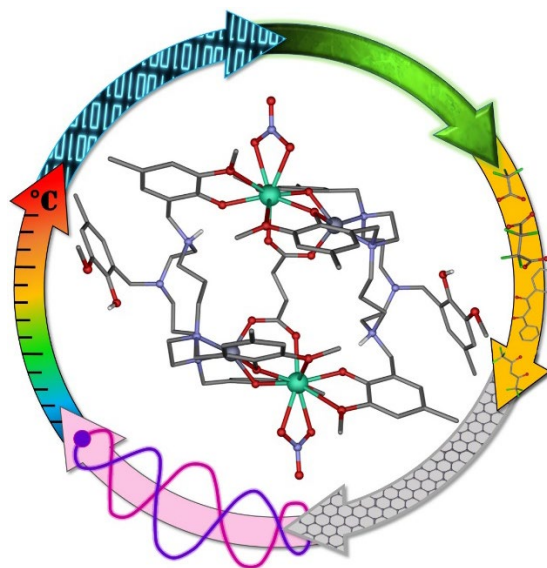


Figura 1.- Complejo tetranuclear de gran potencial. Las distintas flechas simbolizan los aspectos trabajados.

Referencias

[1] A. Zabala-Lekuona, J.M. Seco, E. Colacio, *Coord. Chem. Rev.* 441 (2021) 213984.

Agradecimientos

Al Ministerio de Innovación, Ciencia y Universidades (PGC2018 102052-B-C21), UPV/EHU (GIU 17/13) y Gobierno Vasco (PRE_2016_1_0256).

MOFs quirales con efecto CISS como filtros de espín

Uxua Huizi-Rayo¹, Eider San Sebastian², Javier Cepeda², Jesus M. Ugalde¹.

¹ *Kimika Fakultatea, Euskal Herriko Unibertsitatea (UPV/EHU) and Donostia International Physics Center (DIPC), P. K. 1072, 20080 Donostia, Euskadi, Spain*

² *Departamento de Química Aplicada, Facultad de Química, Universidad del País Vasco (UPV/EHU), 20018 Donostia, Spain*

uxua.huizi@ehu.eus

En un campo eléctrico tradicional, el espín de los electrones se orienta arbitrariamente sin que esta influya en la corriente eléctrica generando una "corriente electrónica no polarizada". Sin embargo, dentro de un campo espintrónico, los espines de los electrones optan únicamente por una de las configuraciones posibles (espín *up* o *down*) generando una "corriente electrónica polarizada por espín". Estas corrientes polarizadas poseen una gran parte de sus electrones con un estado de espín definido y se generan a través de materiales capaces de actuar como filtros de espín, los cuales permiten el paso de los electrones con espín "adecuado" mientras que dispersan o bloquean los electrones con el espín contrario. La primera referencia al fenómeno de este tipo de corrientes y al campo que las estudia, la espintrónica, es de hace apenas 30 años, y aunque el número y tipo de aplicaciones basadas en las corrientes de espín ha aumentado exponencialmente desde entonces, la variedad en el tipo de materiales capaces de generar estas corrientes es alarmantemente escasa.¹ Con el descubrimiento del efecto CISS en 2012 (del inglés *Chiral-Induced Spin Selectivity*)² se abrió camino al estudio de nuevos filtros de espín basados en materiales quirales y/o helicoidales conductores, que son capaces de acoplar el espín electrónico del electrón con su momento lineal, favoreciendo, así mismo, la circulación de uno de los espines e impidiendo la del otro.

A día de hoy, la literatura científica recoge algunos tipos de materiales quirales (algunos con estructura secundaria helicoidal) con distinto grado de efecto CISS, siendo un MOF tridimensional de disprosio el único material descrito con una capacidad del 100% para ejercer como filtro de espín a temperatura ambiente.³ Ante este hecho, y dada su conocida versatilidad y facilidad de síntesis, así como su naturaleza sólida, los MOFs son considerados materiales idóneos para el estudio y desarrollo de nuevos filtros de espín para su posterior implementación en dispositivos sólidos con aplicaciones industriales.

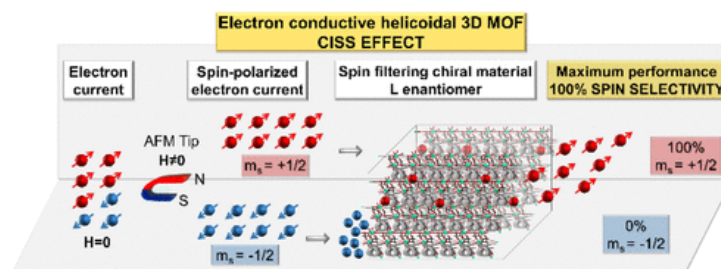


Figura 1. Generación de corrientes polarizadas de espín mediante efecto CISS en un material quiral y/o helicoidal.

Referencias

- ¹ Cornia, A.; Senor, P. "Spintronics: the molecular way", *Nature Materials* (2017), 16, 505-506.
- ² (a) Naaman, R.; Waldeck, D. H. "Chiral-induced spin selectivity effect", *J. Phys. Chem. Lett.* (2012), 3, 2178-2187.
- ³ (a) Waldeck, D. H.; Naaman, R.; Paltiel, Y. "The spin selectivity effect in chiral materials", *APL Materials* (2021), 9, 040902. (b) Huizi-Rayo, U.; Gutierrez, J.; Seco, J. M.; Mujica, V.; Diez-Perez, I.; Ugalde, J. M.; Tercjak, A.; Cepeda, J.; San Sebastian, E. "An Ideal Spin Filter: Long-Range, High-Spin Selectivity in Chiral Helicoidal 3-Dimensional Metal Organic Frameworks", *Nano Lett.* (2020), 20, 8476-8482.

Agradecimientos

Red Guipuzcoana de Ciencia, Tecnología e Innovación (OF218/2018). Universidad del País Vasco (GIU 17/13). Gobierno Vasco (IT1005-16). Ministerio de Economía y Competitividad (PGC2018-102052-A-C22, PGC2018-102052-B-C21). Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades, y la Unión Europea (PGC2018-097699-B-I00, PGC2018-102052-A-C22 and PGC2018-102052-B-C21). Donostia International Physics Center (DIPC).

DIVERSIDAD ESTRUCTURAL DE NUEVOS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN FORMADOS POR METALES DE LA PRIMERA SERIE DE TRANSICIÓN Y EL LIGANDO ÁCIDO 2-HIDROXI-6-METILNICOTÍNICO

L. Razquin-Bobillo¹, J. M. Seco¹, A. Rodríguez-Diéguez², E. San Sebastian¹ y J. Cepeda¹

¹ Departamento de Química Aplicada, Facultad de Química, Universidad del País Vasco, 20018 Donostia.

² Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071 Granada.

e-mail: lrazquin002@ikasle.ehu.eus

Los materiales metal-orgánicos conocidos como compuestos de coordinación constituyen uno de los tipos de materiales más estudiados y versátiles [1]. En lo relativo a la construcción de los complejos y polímeros de coordinación, las estructuras cristalinas resultan de la interacción entre los dos componentes básicos: ligando orgánico e ion metálico (o en ocasiones clústeres de los mismos) [2]. En relación con los iones metálicos, se suelen emplear frecuentemente los iones de transición, principalmente los de la primera serie, por su abundancia y facilidad de formar enlaces de coordinación. Existen numerosas combinaciones de metales y ligandos orgánicos, lo que puede mostrar diferentes características físico-químicas y proporcionar materiales con una diversidad estructural muy amplia [3].

En el presente trabajo se han conseguido seis compuestos de diferentes estructuras cristalinas formados por diferentes iones metálicos de la primera serie de transición y el ligando ácido 2-hidroxi-6-metilnicotínico: dos compuestos basados en entidades aisladas, $[\text{Mn}(\mu\text{-}2\text{h}6\text{mnic})_3] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (**1**) y $2[\text{Cu}_2(2\text{h}6\text{mnic})_3(\mu\text{-}2\text{h}6\text{mnic})_3(\text{MeOH})] \cdot [\text{Cu}_2(2\text{h}6\text{mnic})_2(\mu\text{-}2\text{h}6\text{mnic})_2] \cdot 2[\text{Cu}(2\text{h}6\text{mnic})_2(\text{MeOH})] \cdot 32\text{H}_2\text{O}$ (**2**), un compuesto basado en cadenas, $\{[\text{MnNa}(\mu_3\text{-}2\text{h}6\text{mnic})_3(\text{MeOH})] \cdot \text{H}_2\text{O} \cdot \text{MeOH}\}_n$ (**3**), y dos redes metal-orgánicas isoestructurales de naturaleza iónica, $\{[\text{M}_2\text{Na}_4(\mu_3\text{-}2\text{h}6\text{mnic})_2(\mu\text{-}2\text{h}6\text{mnic})_2(\mu\text{-}\text{H}_2\text{O})(\text{H}_2\text{O})_6](\text{NO}_3)_2\}_n$ ($\text{M}^{\text{II}} = \text{Co}$ (**4**) y Ni (**5**), respectivamente). En el caso del compuesto $[\text{ZnNa}(2\text{h}6\text{mnic})_2](\text{NO}_3)(\text{H}_2\text{O})_{1/2}$ (**6**) no se ha podido resolver su estructura cristalina. Entre los compuestos anteriores, el compuesto formado por Zn(II) ha mostrado tener propiedades luminiscentes, ya que presenta fluorescencia y fosforescencia. El espectro de emisión en continuo muestra la presencia de dos bandas anchas situadas en $\lambda_{\text{em}} = 385$ y 480 nm, que son responsables del color azul-verdoso observado bajo el microscopio para esta muestra (Figura 1).

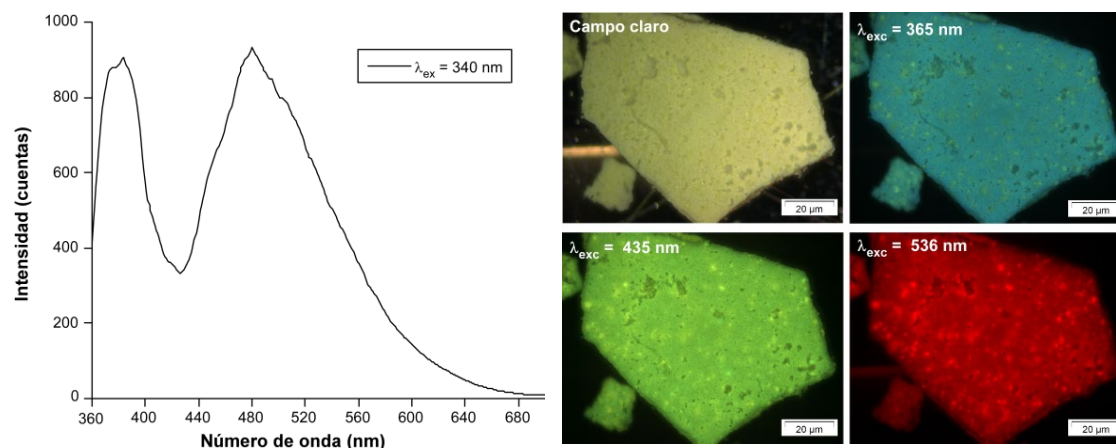


Figura 1. Espectro de emisión (izquierda) e imágenes de fotoluminiscencia (derecha) para el compuesto **6**.

Referencias:

- [1] Batten, S. R. et al. *ChemPlusChem*. **2016**, *81*, 669.
- [2] Lu, W. et al. *Chem.Soc. Rev.* **2014**, *43* (16), 5561-5593.
- [3] Kitagawa, S. et al. *Chem. Int. Ed.* **2004**, *43*, 2334-2375.

Agradecimientos:

Los autores de este trabajo agradecen la financiación recibida por el Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (MCIU/AEI/FEDER, UE) (PGC2018-102052-A-C22, PGC2018-102052-B-C21), la Universidad del País Vasco (UPV/EHU) (GIU20/028) y la Junta de Andalucía (FQM-394).

SOLVENT-FREE CYANOSILYLATION REACTIONS USING NEW COMPOUNDS BASED ON 2,2'-BIQUINOLINE-4,4'-DICARBOXYLIC ACID

S. Morales-Cámara¹, N. Ruiz-Cuevas¹, J. M. Pérez², D. Choquesillo-Lazarte³, A. Rodríguez-Diéguez¹, I. Fernández², and S. Rojas¹.

¹Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Granada, Av. Fuentenueva s/n, Granada.

²Departamento de Química y Física, Universidad de Almería, Ctra. Sacramento s/n, Almería.

³Laboratorio de Estudios Cristalográficos IACT, CSIC-Universidad de Granada, Avda. de las Palmeras 4, Armilla, Granada.

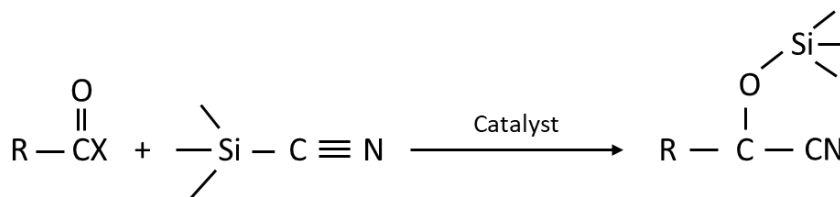
samuelmc@ugr.es

Cyanosilylation is a type of reaction quite used to obtain cyanohydrins, intermediate products of many organic compounds (Scheme 1). Normally, trimethylsilyl cyanide (TMSCN) is used as reagent for the formation of C–C bonds. However, to improve the yield and enantioselectivity of the reaction, different catalysts have been used (1). In this study, we want to develop novel Metal-Organic Frameworks (MOFs) as a catalyst to be used in cyanosilylation reactions.

MOFs are a class of crystalline hybrid materials resulting from the assembly of metal centers or clusters and organic linkers to form a porous accessible framework. Among their possible applications, MOFs have been studied as catalyst as these porous materials possess high surface areas, providing an exceptional environment to facilitate catalytic reactions.

To obtain new MOFs structure, we have used the 2,2'-biquinoline-4,4'-dicarboxylic acid (BCA) as linker due to its high capacity to establish coordination bonds (2) and its photoluminescence properties (3). Four MOFs have been obtained based on BCA and different metals (Sr(II), Y(III), Ba(II) and Cd(II)) using solvothermal conditions. In their structural characterization by single-crystal X-ray diffraction, we appreciate that some of the compounds have a 3D distribution with a potential accessible porosity. The thermal stability of the compounds was tested by thermogravimetric analysis, the compounds show being stable until above 400 °C.

Finally, the catalytic activity of the synthesized compounds were tested. We performed cyanosilylation reactions of various aldehydes and ketones in solvent-free conditions, therefore, following an environmentally safe process. The preliminary results show a high rate of conversion for the Sr and Y compounds.



Scheme 1. Cyanosilylation of aldehydes (X=H) and ketones (X=R') to obtain silylated cyanohydrins.

Referencias

1. Ma, Z.; Gurbanov, A. V.; Sutradhar M.; Kopylovich, M.N.; Mahmudov, T.; Maharramov, A.M.; Guseinov, F. I.; Zubkov, F.I.; Pombeiro A.J.L. *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*. 2016, 428, 17-23.
2. Zou, J.Y.; Li, L.; You, S.Y.; Zhang, S.W. *Inorganica Chimica Acta*, **2019**, 498, 119126.
3. Wojtal, P.; Zhitomirsky, I. *Materials Letters*, **2016**, 174, 44-47.
4. Deng, B.; Huang H.; Li Q. *Advanced Materials Research*, **2014**, 881-883, 893-896.

Agradecimientos

Junta de Andalucía y Universidad de Granada. Programa de Garantía Juvenil.

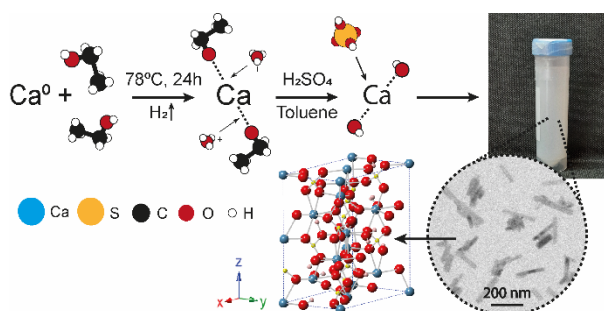
SÍNTESIS DE NANOPARTÍCULAS DE $\text{CaSO}_4 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$ DE ELEVADA REACTIVIDAD USANDO ETÓXIDO DE CALCIO COMO PRECURSOR¹

M. Burgos-Ruiz^a, G. Pelayo-Punzano^b, E. Ruiz-Agudo^a, K. Elert^a y C. Rodríguez-Navarro^a

^aDepartamento de Mineralogía y Petrología, Universidad de Granada, Fuentenueva s/n, 18002.

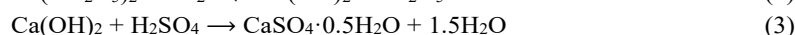
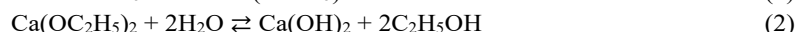
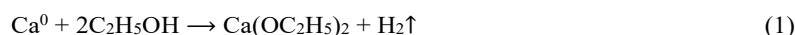
^bDepartamento de Química Inorgánica, Universidad de Granada, Fuentenueva s/n, 18002.

miguelburgos95@ugr.es



En la naturaleza se puede encontrar al sulfato de calcio en distintas fases cristalinas en función de su grado de hidratación ($\text{CaSO}_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$), siendo estas la anhidrita (α -, β - o γ - CaSO_4), la bassanita (α - o β - $\text{CaSO}_4 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$) y el yeso ($\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$). De ellas, las fases hemihidratadas presentan un especial interés a nivel socio-económico, dada su capacidad de hidratación, su elevada biocompatibilidad y a las propiedades físico-mecánicas óptimas del material obtenido como resultado de su hidratación.² Así, el sulfato de calcio hemihidratado presenta una gran versatilidad como material multipropósito, encontrando aplicación directa en campos como la biotecnología, la industria farmacéutica o en la conservación y restauración del patrimonio cultural y arquitectónico.

En este trabajo se presenta una ruta de síntesis solvotermal sencilla, con alta selectividad y de elevado rendimiento neto ($R\% > 99\%$) para la producción de nanopartículas de $\text{CaSO}_4 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$ (~120 nm) con el mayor valor de área superficial hasta el momento (~54.2 m²/g) usando etóxido de calcio como precursor. Esta vía de síntesis puede ser resumida según el siguiente mecanismo:



En primer lugar, la reacción de oxidación-reducción irreversible del calcio metálico en un exceso de etanol absoluto (1) origina una suspensión alcohólica de etóxido de calcio, que funciona como precursor del producto final, que precipitará tras añadir una disolución concentrada de H_2SO_4 en presencia de tolueno, momento en el cual ocurre la hidrólisis ácida del etóxido de calcio (2), dando lugar a hidróxido de calcio, que reacciona posteriormente con ácido sulfúrico (3) para dar lugar a las nanopartículas de $\text{CaSO}_4 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$.

Actualmente se está trabajando en la elaboración de suspensiones alcohólicas de estas nanopartículas (de manera similar a las actuales “nanolimes”)³ para su aplicación en sustrato deteriorado de elevado valor cultural, como lo son las yeserías y los mocárabes de la Alhambra (entre otros).

Referencias:

- Burgos-Ruiz, M., Pelayo-Punzano, G., Ruiz-Agudo, E., Elert, K., Rodríguez-Navarro, C. (2021): Synthesis of high Surface area $\text{CaSO}_4 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$ nanorods using calcium ethoxide as precursor. – Chem. Commun.
- Van Driessche, A. E. S., Stawski, T., Kellermeier, M. (2019): Calcium sulfate precipitation pathways in natural and engineering environments. – Chemical Geology, 530, 119274.
- Rodríguez-Navarro, C., Ruiz-Agudo, E. (2018): Nanolimes: from synthesis to application. – Pure Appl. Chem., 90(3), 523-550.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE UN POLÍMERO DE COORDINACIÓN BASADO EN COBRE Y GLUFOSINATO COMO HERBICIDA MEJORADO

S. Rojas¹, A. Rodríguez-Diéguez¹, A. García-García¹, B. Sierra¹.

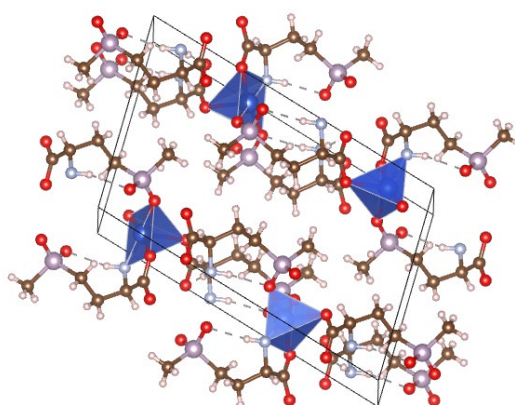
¹Biochemistry and Electronics as Sensing Technologies research group. Department of Inorganic Chemistry, University of Granada, Av. Fuentenueva s/n, 18071, Granada, Spain.

bmsierraserrano@gmail.com

El uso de pesticidas tiene un papel clave en la agricultura ya que contribuyen a controlar plagas y a aumentar el rendimiento de los cultivos. Sin embargo, existe una alta ineficiencia en el uso de estos ya que se utilizan de forma masiva. Se ha estimado que alrededor del 90% de los pesticidas aplicados se pierden antes de cumplir su función por diversos procesos naturales como la dispersión en el aire, arrastrados por lluvia u otros fenómenos meteorológicos o por su degradación prematura, acumulándose en el medio y afectando a la salud de los seres vivos.

Las redes metal-orgánicas (metal-organic frameworks, MOFs) son polímeros de coordinación porosos con propiedades que los hacen buenos candidatos para su uso en la agricultura: i) son porosos, ii) son lo suficientemente estables para llevar a cabo su función pero se degradan con el tiempo, evitando su acumulación, iii) algunos no son tóxicos, iv) se pueden sintetizar a diferentes tamaños de partícula (nano o micrómetro), v) permiten el escalado de la síntesis, vi) algunos son comerciales.

En este trabajo se ha conseguido sintetizar un nuevo MOF (MOF-CuGlufo) compuesto por Cu²⁺ (antibacteriano) como ion metálico y glufosinato (herbicida) actuando como ligando orgánico, del que se espera una doble acción contra diferentes elementos patógenos que afectan a los cultivos, consiguiendo que toda la estructura sea activa. El MOF-CuGlufo se sintetizó a reflujo y utilizando disolventes no tóxicos. Según los resultados obtenidos, el material es capaz de inhibir completamente la germinación de semillas de rábano (considerada mala hierba en cultivos como bayas o vides) y de envenenar a la planta una vez crecida en un período de 8 días utilizando la misma cantidad que del pesticida comercial (glufosinato de amonio). Estos resultados mejoran el efecto que posee la misma concentración de herbicida en su forma comercial, habiendo conseguido sintetizar un herbicida más eficiente. El MOF también es estable en disolución acuosa durante al menos 8 días y no se degrada hasta los 260 °C, evitando que su estructura se pierda antes de llevar a cabo su función.



Estructura del MOF-CuGlufo

Referencias

- [1] S. Rojas, P. Horcajada, Chem. Rev. (2020) 120, 16, 1681 (2020) 1049.

SÍNTESIS Y APLICACIONES DE NUEVOS POLÍMEROS DE COORDINACIÓN BASADOS EN LOS NUEVOS LIGANDOS DERIVADOS DEL PIRENO

Pablo GUERRERO-GARCÍA¹, Mariano ORTEGA-MUÑOZ², Duane CHOQUESILLO-LAZARTE³, Sara ROJAS-MACÍAS¹, Antonio RODRÍGUEZ-DIÉGUEZ¹

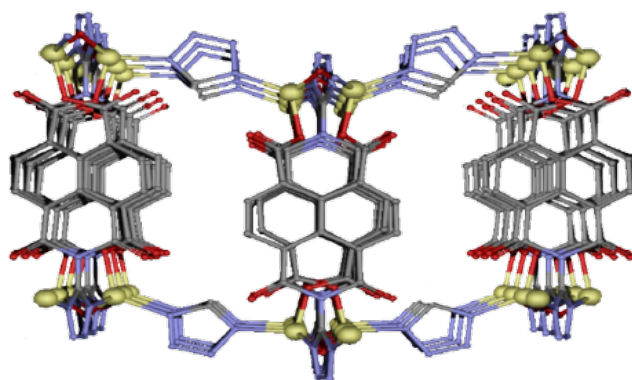
¹Departamento de Química Inorgánica, Universidad de Granada, Av. Fuentenueva s/n, 18071, Granada, España.

²Departamento de Química Orgánica, Universidad de Granada, Av. Fuentenueva s/n, 18071, Granada, España.

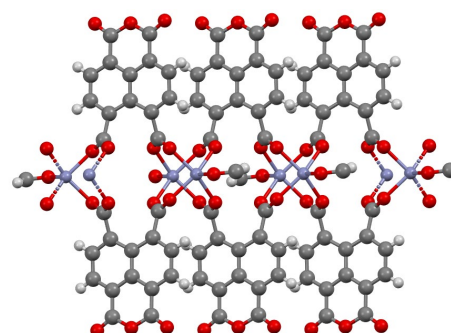
³Laboratorio de Estudios Cristalográficos, IACT, CSIC-Universidad de Granada, Avda. de las Palmeras 4, 18100 Armilla, España. Email: guerrerogarcia@correo.ugr.es

Los materiales porosos son de gran interés, ya que poseen una estructura interna con una gran cantidad de cavidades. Gracias a esas aberturas, otras sustancias pueden alojarse en ellas ofreciendo diversas aplicaciones gracias al diseño y funcionalización de los poros. Actualmente, los MOFs (Metal-Organic Framework) son compuestos de coordinación formados por un centro metálico coordinado con ligandos orgánicos generando estructuras bi- o tridimensionales. En la actualidad, los MOFs tienen múltiples aplicaciones en diversos campos como por ejemplo la adsorción, catálisis, magnetismo, biomedicina, [1] luminiscencia, [2] sensores, etc.

El objetivo de este estudio es la síntesis de nuevos MOFs a partir de ligandos derivados del pireno. Estos ligandos poseen una alta competencia para establecer enlaces coordinados con los metales gracias a sus átomos de nitrógeno. Por tanto, se forman compuestos de coordinación muy interesantes por sus potenciales aplicaciones y propiedades como sensor químico. La síntesis de estos MOFs están basados en los novedosos ligandos 1,3-dioxo-2-(2H-tetrazol-5-yl)-2,3-dihidro-1H-benzo[de] isoquinoline-6,7-dicarboxylic acid (TBA) y 1,4,5,8-naphthalenetetracarboxylic acid dianhydride (NTCDA). Se han sintetizado dos compuestos mediante una síntesis solvotermal suave de alto rendimiento donde cada reacción ha tenido lugar en un mismo vial de vidrio. Los disolventes empleados han sido agua y DMF (N,N'-dimetilformamida) en proporción (1mL:1mL) para el compuesto con el ligando TBA y 2 mL de DMF para el compuesto con NTCDA. Asimismo, a ambos compuestos se les han añadido cantidades estequiométricas (1:1) del respectivo ligando y nitrato de zinc. De este modo, se han obtenido dos polímeros bidimensionales con interesantes propiedades luminiscentes.



Compuesto con ligando TBA



Compuesto con ligando con NTCDA

Referencias:

[1] Sara Rojas y Patricia Horcajada. Chem. Rev. (2020), 120, 8378–8415.

[2] Javier Cepeda y Antonio Rodríguez-Diéguez. CrystEngComm. (2016), 18, 8556–8573.

Agradecimientos:

En primer lugar, quiero agradecer a mi tutor, Antonio Rodríguez Diéguez, quien confió en mí y me dió la oportunidad de desarrollar este proyecto. Asimismo, a mi familia por brindarme los recursos necesarios y su incondicional ayuda en todo momento. Finalmente, a mis compañeros y amigos por su apoyo constante.

SÍNTESIS DE NUEVOS COMPUESTOS DE COORDINACIÓN ACTIVOS FRENTE A LA ENFERMEDAD DEL CHAGAS

O. García-Villar¹, A. García-García¹, S. Rojas¹, A. Rodríguez-Diéguez¹, D. Choquesillo-Lasarte²; C. Marin Sanchez³

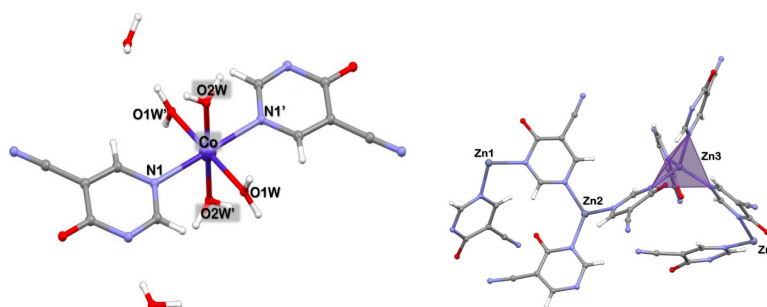
¹Biochemistry and Electronics as Sensing Technologies research group. Department of Inorganic Chemistry, University of Granada, Av. Fuentenueva s/n, 18071, Granada, Spain; ²Laboratorio de Estudios Cristalográficos, IACT, CSIC-University of Granada, Avda. de las Palmeras 4, 18100 Armilla, Granada, Spain; ³Department of Parasitology, University of Granada, Severo Ochoa s/n, 18071 Granada, Spain

oscargarciavillar22@gmail.com

Muchas enfermedades tropicales son causadas por parásitos que prosperan en condiciones calientes y húmedas. Aunque representan una tremenda carga para la sociedad, históricamente muchas de estas enfermedades infecciosas han recibido poca atención de la industria farmacéutica debido a las pocas perspectivas de generar ganancias financieras. La Organización Mundial de la Salud (OMS) las considera Enfermedades Tropicales Desatendidas (ETD) debido al desarrollo restringido de métodos de diagnóstico, tratamientos terapéuticos y/o estrategias de control.

La *enfermedad del Chagas* es producida por el parásito protozoario flagelado *Trypanosoma cruzi* (*T. cruzi*). La enfermedad es endémica en las regiones rurales de América Latina. Sin embargo, debido principalmente a la mayor movilidad de la población en los últimos años, están apareciendo casos por todo el mundo. El tratamiento de la enfermedad de Chagas se basa en fármacos nitroaromáticos (Benznidazol y Nifurtimox) antiguos y bastante inespecíficos que tienen una actividad significativa sólo en la fase aguda de la enfermedad y, cuando se asocian con tratamientos a largo plazo, dan lugar a efectos secundarios graves.

En este trabajo, se pretende sintetizar nuevos compuestos organometálicos que presenten una mejor efectividad frente al parásito con una menor citotoxicidad. Por lo que se han sintetizado cinco nuevos compuestos de coordinación empleando el ligando 4-hidroxipirimidina-5-carbonitrilo (hypymca) con diferentes metales de transición (Mn, Co, Ni, Cu, Zn). Los cuales han sido caracterizados por infrarrojo y difracción de rayos X en monocristal. Además, se han medido la actividad antiparasitaria *in vitro* en *T. cruzi* en la forma epimastigote y la citotoxicidad en células Vero de cuatro de ellos.



- (1) Salas, J. M.; Caballero, A.; Esteban-Parra, G. M.; Méndez-Arriaga, J. M. Leishmanicidal and Trypanocidal Activity of Metal Complexes with 1,2,4-Triazolo[1,5-a]Pyrimidines: Insights on Their Therapeutic Potential against Leishmaniasis and Chagas Disease. *Curr. Med. Chem.* **2017**, *24* (25), 2796–2806. <https://doi.org/10.2174/0929867324666170516122024>.
- (2) García-Valdivia, A. A.; Romero, F. J.; Cepeda, J.; Morales, D. P.; Casati, N.; Mota, A. J.; Zotti, L. A.; Palacios, J. J.; Choquesillo-Lazarte, D.; F. Salmerón, J.; Rivadeneyra, A.; Rodríguez-Diéguez, A. Rational Design of an Unusual 2D-MOF Based on Cu(I) and 4-Hydroxypyrimidine-5-Carbonitrile as Linker with Conductive Capabilities: A Theoretical Approach Based on High-Pressure XRD. *Chem. Commun.* **2020**, *56* (66), 9473–9476. <https://doi.org/10.1039/d0cc03564e>.
- (3) Esteban-Parra, G. M.; Méndez-Arriaga, J. M.; Rodríguez-Diéguez, A.; Quirós, M.; Salas, J. M.; Sánchez-Moreno, M. High Antiparasitic Activity of Silver Complexes of 5,7-Dimethyl-1,2,4-Triazolo[1,5-a]Pyrimidine. *J. Inorg. Biochem.* **2019**, *201* (May), 110810. <https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2019.110810>.
- (4) <https://doi.org/10.1016/j.jinorgbio.2019.110810>.

SÍNTESIS DE POLIURETANOS REFORZADOS CON Fe_3O_4 PARA SU POTENCIAL USO COMO BIOMATERIALES

Paulina Garnica Chávez^{1*}, Rodrigo Navarro², José Rivas³, Lucía Téllez-Jurado¹

¹Instituto Politécnico Nacional, México; ²Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, España; ³Universidad de Santiago de Compostela, España

*paulina_garnica@outlook.com

Durante décadas, el daño en diferentes tejidos en el cuerpo humano (tales como el óseo, cardiovascular y epitelial), ha sido tratado principalmente mediante trasplantes autólogos y autónomos. Dichos procedimientos resultan dolorosos, costosos y desafortunadamente con un alto índice de fracaso [1].

Es por esto que la ingeniería de materiales ha centrado su atención en los biomateriales. El término se refiere a aquellos materiales extracelulares que son implantados en un organismo vivo con la finalidad de reparar la morfología o funcionalidad del tejido u órgano dañado por fisura fractura, malformación o alguna enfermedad degenerativa [2].

Entre los biomateriales, los polímeros se presentan como una solución prometedora gracias a sus adecuadas propiedades mecánicas. Dentro de los polímeros, se encuentran los poliuretanos segmentados, los cuales tienen tres componentes básicos: Un polioli de cadena larga y flexible (*segmento blando*), un isocianato aromático o alifático y un monómero de cadena corta, denominado extendedor de cadena (ambos formando el *segmento duro*). Las propiedades mecánicas de los poliuretanos vienen marcadas por el balance entre ambos segmentos, lo que demuestra la versatilidad de este tipo de materiales.

Adicionalmente, la incorporación de nanopartículas magnéticas proporciona materiales finales con propiedades mecánicas reforzadas que exhiben una multifuncionalidad adicional. Esto debido a su carácter magnético, el cual favorece la adhesión/proliferación celular, sirve como guía de los factores de crecimiento cargados de nanotransportadores magnéticos y promueve la hipertermia magnética. Entre ellas destaca el uso de Fe_3O_4 en aplicaciones biológicas [3].

En este trabajo se presenta la síntesis de poliuretanos segmentados a partir de Poli(ϵ -caprolactona) PCL (como segmento blando), 1,6-Hexametilen diisocianato (HDI) y 3-aminopropil-trietoxisilano (APTES) (como segmento duro) en proporciones de segmento blando: segmento duro 50:50, 60:40, 70:30 y 80:20 respectivamente. Posteriormente se incorpora un 0.5% W de nanopartículas de Fe_3O_4 previamente caracterizadas por DLS, potencial Z y TEM, recubiertas con ácido oleico. Todos los polímeros fueron caracterizados mediante diversas espectroscópicas (FTIR, RMN sólidos) que confirmaron la estructura química. Adicionalmente, se evaluó el comportamiento térmico de estos materiales, mediante DSC y estabilidad térmica con TGA. Adicionalmente, se abordó el estudio del comportamiento mecánico de los poliuretanos, corroborándolo con su estructura química. Finalmente, la caracterización se vio completada con el estudio de la superficie de los materiales, mediante ángulo de contacto y microscopía electrónica de barrido (SEM). En una segunda etapa, se evaluó el efecto de la adición de nanopartículas magnéticas y así evaluar su uso como posible biomaterial.

Los autores agradecen el apoyo del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por la financiación del proyecto, así como al Consejo Superior de Investigaciones Científicas y a la Universidad de Santiago de Compostela por su colaboración para la realización del mismo.

- [1] Ehsan Jabbarzadeh et al. «Induction of angiogenesis in tissue-engineered scaffolds designed for bone repair: A combined gene therapy–cell transplantation approach,» PNAS, pp. 11099-11104, 23 Dec 2008.
- [2] Catalina Estrada et al., «Ingeniería de tejido óseo: consideraciones básicas,» EIA, pp. 93-100, 2006..
- [3] Manuel Bañobre-López et al., «Hyperthermia Induced in Magnetic Scaffolds for Bone Tissue Engineering,» IEEE Transactions on Magnetics, vol. 50, 02 Dec 2014.

CONDUCTING POLYMER NANOSTRUCTURATION IN MOFS THROUGH TEMPLATE EFFECT

**G. Armani Calligaris¹, F. Salles², P. Bordet³, C. Martineau-Corcós⁴, P. Atienzar⁵, S. Navalón⁵,
P. Horcajada¹**

¹ UMPA, IMDEA Energy Institute, Móstoles (Spain);

² Institut Charles Gerhardt Montpellier, Montpellier (France);

³ CNRS, Grenoble (France);

⁴ Institut Lavoisier - UVSQ, Versailles (France);

⁵ Universidad Politécnica de Valencia, Valencia (Spain); 4

giacomo.armani@imdea.org

Due to its optoelectrochemical properties, polypyrene (pPyr) has been used as fluorescent probe, and for electrochemical devices. Although it is known that these properties could be enhanced by controlling the degree and configuration of the polymer, the established synthetic methods often led to oligomers with random configuration¹.

In this work, we propose to tune pyrene polymerization via its nanostructuration within porous crystalline hybrid materials², also known as Metal-Organic Frameworks (MOFs), in order to obtain a stereospecific polymerisation and enhanced electrical properties. In particular, the zirconium carboxylate MIL-140D³ with monodimensional pores (11 Å) comparable with the molecular size of pyrene was selected as template. By a two-step strategy (monomer encapsulation followed by its *in-situ* polymerisation), the resulting pPyr@MIL-140D composite seems to allow blocked geometry and configuration of the growing polymer, while increasing its stability and properties.

References

- 1 S. C. Han, E. G. Bae, H. Lim and M. Pyo, *J. Power Sources*, 2014, **254**, 73–79.
- 2 P. Salcedo-Abraira, A. Santiago-Portillo, P. Atienzar, P. Bordet, F. Salles, N. Guillou, E. Elkaim, H. Garcia, S. Navalon and P. Horcajada, *Dalt. Trans.*, 2019, **48**, 9807–9817.
- 3 V. Guillerm, F. Ragon, M. Dan-Hardi, T. Devic, M. Vishnuvarthan, B. Campo, A. Vimont, G. Clet, Q. Yang, G. Maurin, G. Férey, A. Vittadini, S. Gross and C. Serre, *Angew. Chemie Int. Ed.*, 2012, **51**, 9267–9271.

Acknowledgments

PolyMOF project (BBVA Foundation), RaPhuel project (ENE2016-79608-C2-1-R, BES-2017-082749)

NOVEL USE OF METAL-ORGANIC FRAMEWORKS IN THE ELIMINATION OF DRINKING WATER DISINFECTION BY-PRODUCTS

Gabriel Sanchez Cano^{1,2*}, Antonio Lastra¹, Lydia Sáez¹, Eduardo Arozamena³, Margarita Amado⁴, Sara Rojas², Patricia Horcajada²

¹R&D&I Department, Canal de Isabel II, Plaza de Descubridor Diego de Ordás, 3, Madrid, Spain

²Advanced Porous Materials Unit (APMU), IMDEA Energy Institute, Av. Ramón de la Sagra, 3, Móstoles, Madrid, Spain

³Área tratamiento aguas Guadarrama, Canal de Isabel II, ETAP Valmayor, Colmenarejo, Madrid, Spain

⁴Área tratamiento de aguas Lozoya-Jarama, Canal de Isabel II, ETAP Colmenar, Colmenar Viejo, Madrid, Spain

email: gabrielsanchezcano@canal.madrid

Water disinfection is a common process to treat drinkable and wastewater to eliminate or inactivate pathogenic microorganisms capable of transmitting waterborne diseases. Among the different methods applied in water disinfection (*e.g.* ozone, UV-vis light), chlorination is the most frequently used due to its high effectiveness and low cost. It involves the addition of chlorine or chlorine-based derivatives to oxidize organic matter. Some advantages of chlorine dioxide include its greater oxidizing power than chlorine and its use does not generate halogenated derivatives (*i.e.* trihalomethanes). Despite its outstanding properties, a rapid decomposition is favored under alkaline conditions, leading to the formation of inorganic by-products (ClO_2^- and ClO_3^-). [1] Further, the continuous exposure to these by-products could negatively impact on human health (*e.g.* chlorite could produce oxidative stress in red blood cells, resulting in methemoglobin formation; whereas chlorate could compete with iodine in the thyroid gland, causing illness such as hypothyroidism). [2] European Council Directive 2020/2184 has regulated a maximum concentration of $0.250 \text{ mg}\cdot\text{L}^{-1}$ of ClO_2^- and ClO_3^- . [3] Thus, water treatment plants are trying to develop efficient procedures to remove ClO_2^- and ClO_3^- after water disinfection. Above all, ClO_2^- and ClO_3^- adsorption is highlighted due to its easy implementation in the actual installations, low cost, and mild working conditions (pressure and temperature). Although activated carbon is the most widely used adsorbent, it has poor performances in the ClO_3^- abatement. Significant progress has been made into the discovery and use of other porous materials, such as Metal-Organic Frameworks (MOFs, Figure 1). Compared to classical adsorbents, MOFs present several advantages (*e.g.* versatile composition, large structural variability, important porosity, easy modulation) that make them excellent candidates for the selective removal of ClO_2^- and ClO_3^- . In this regard, we propose here the application of highly water stable and porous MOFs in the elimination of ClO_2^- and ClO_3^- . The results show that these porous solids can incorporate both ClO_2^- and ClO_3^- achieving different adsorption efficiencies depending on the structure and composition. Among the tested materials, the flexible porous MIL-88B(Fe)- NH_2 shows very good performances, reaching 100% of ClO_2^- and 30% of ClO_3^- removal from drinking water in only 15 min.

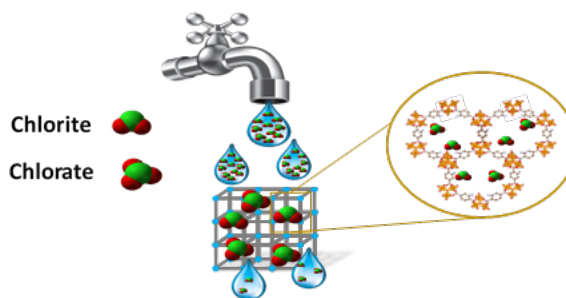


Figure 1. Schematic approach of the ClO_2^- and ClO_3^- adsorption process into metal-organic frameworks

References

- [1] S. Sorlini, F. Gialdini, M. Biasibetti and C. Collivignarelli, *Water Res.*, 2014, **54**, 44–52.
- [2] USEPA, *U.S. Epa, Off. Water*, 2016, 110.
- [3] The European Parliament and the Council of the European Union, *Off. J. Eur. Communities*, 2020, **2019**, 35.

Acknowledgements

This work is developed in Canal de Isabel II, IMDEA Energy Institute and Community of Madrid (Spain) through the project of the industrial doctorates from the Community of Madrid (IND2019/AMB-17129). PH, SR, AL, LS, EA, MA and GS want to thank the financial support of Community of Madrid.

NANOSTRUCTURED MOF-DERIVED CARBONS FOR ELECTROCHEMICAL ENERGY STORAGE APPLICATIONS

Manuel Del Barrio Jimeno^{1,2}, Giacomo Armani-Calligaris², Sara Martín-Calvo^{1,2}, Daniel Arenas-Esteban¹, Pablo Salcedo-Abraira², Patricia Horcajada², David Ávila-Brandé¹.

¹Universidad Complutense de Madrid: Department of Inorganic Chemistry, Madrid, Spain

²Advanced Porous Materials Unit, IMDEA Energy Institute, Móstoles, Madrid, Spain

manuel.delbarrio@imdea.org

Introduction

MOFs are highly porous crystalline materials built from inorganic units connected by organic polydentate ligands. Due to their great structural and compositional variety, along with their high and well-defined porosity, these materials are excellent candidates in relevant societal and industrial applications (e.g.: energy, catalysis, biomedicine, environment, etc.)¹. In the energy field, MOFs have been used as precursor for the preparation of nanostructured porous conducting carbons, promising for energy storage (e.g. electrochemical devices).² However, the carbonization of MOFs is generally accompanied by a partial or complete collapse of their original morphology³. In this communication, we propose the chlorination of MOFs as a synthetic tool to prepare carbons retaining the structure of the precursor.

Results and Discussion

Several MOF precursor materials have been selected according to the following criteria: their high surface area, low metal:linker ratio, the presence of heteroatoms, and constitutive metals able to form volatile halides (e.g.: Ti, Zr, Zn, Fe). MOFs were successfully synthesized and fully characterized. Then, MOFs were heated in a tubular furnace at 500 or 900°C (50 °C/min) under a continuous flow of chlorine gas. At the end of the reaction, chlorine flow was cut and replaced by argon to remove the chlorine excess and metal halides during the reactor cooling to room temperature. After the chlorination reaction, some of the resulting carbon materials exhibit a similar morphology than the MOF precursors, as it has been demonstrated by electron microscopy. The shape retention in the MOF-derived carbon materials could indicate that the porous structure could also be retained. The resulting carbons will be tested as electrodes in electrochemical storage devices, mainly in supercapacitors and Na-ion batteries.

Conclusions

The chlorination of MOFs has been proved to be a facile method to produce carbons with morphology retention. This method can be exploited in the preparation of materials with high area and a predetermined pore size distribution for a particular application such as electrodes in electrochemical devices.

References

1. Wang, C. *et al.* (2013). *J. Am. Chem. Soc.* 135, 13222–13234.
2. Xia, W. *et al.* (2015). *Energy Environ. Sci.* 8, 183–1866.
3. Pachfule, P. *et al.* (2016). *Nature Chem.* 8, 718–724

Acknowledgment

This research was supported by the Bat-poro project within the program of Iberdrola Spain Foundation's 2020 Research Grants.

SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF MOFs WITH POTENTIAL APPLICATIONS AS PHOTOCATALYSTS

R. Serrano¹, P. Salcedo-Abraira¹, C. Biglione¹, A. Rodriguez², S. Navalón³, P. Horcajada¹

¹ IMDEA Energy, Advanced Porous Materials Unit (APMU), Avda. Ramón de la Sagra 3, E-28935 Móstoles, Madrid, Spain

² Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Avenida de la Fuente Nueva, s/n, 18071 Granada, Spain.

³ Departamento de Química and Instituto de Tecnología Química (CSIC-UPV), Universitat Politècnica de València, C/Camino de Vera, s/n, 46022 Valencia, Spain.

ruben.serrano@imdea.org

Metal-organic frameworks (MOFs) are constituted by metal centres or clusters that are bonded to polydentate ligands. Their easy design, as well as the organized porous structures they form, make them very promising materials for a multitude of applications[1].

In order to address today's energy and environmental challenges, such materials can be used by exploiting their electro/photoactive properties. MOFs, thanks to their uniform crystalline structures, are able to provide the necessary conditions to carry out catalytic processes such as H₂ production, CO₂ reduction and even water purification[2]. In addition, not only they can be exploited as catalysts, but also can be useful in other application such as electrolytes in proton conduction in proton exchange fuel cells (PEMFCs).

In the present work, we show two isostructural materials consisting of Cu and Ni metal clusters linked to pyrene phosphate ligands. The high electron density, the ability to absorb radiation, the capacity to establish a charge balance and coordination with metals, make this ligand a very interesting candidate to create MOFs with electro/photoactive properties. These characteristics make them very interesting in above-mentioned applications: H₂ production through Hydrogen Evolution Reaction (HER) or over-all water splitting, and even as membrane electrolytes in PEMFCs[3]. Hence, in order to take advantage of the benefits of this ligand, our research group has synthesised two MOFs using this ligand and two metals, Cu and Ni. The synthesis was carried out by simple and scalable solvo/hydrothermal method, obtaining good yields and reproducibility. The synthesis materials were exhaustive characterised using techniques such as P-XRD, SC-XRD, TGA, FTIR, UV-Vis. It has been discovered that the MOF consisting of Cu and pyrene, named IEF-8 (Cu), presented promising features as photocatalysts. In this sense, this material shown catalytic activity in water splitting and cyclable at least for 4 cycles. Considering the isostructural similarity of the Ni based MOF with IEF-8 (Cu), it is envisioned that it will also have interesting properties for photocatalyst. Currently, the water splitting studies with this material are under investigation.

- [1] Q. L. Zhu and Q. Xu, "Metal-organic framework composites," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 43, no. 16, pp. 5468–5512, 2014, doi: 10.1039/c3cs60472a.
- [2] J. Cao *et al.*, "Ultrafine metal species confined in metal–organic frameworks: Fabrication, characterization and photocatalytic applications," *Coordination Chemistry Reviews*, vol. 439. Elsevier B.V., p. 213924, Jul. 15, 2021, doi: 10.1016/j.ccr.2021.213924.
- [3] P. Salcedo-Abraira *et al.*, "Nickel phosphonate MOF as efficient water splitting photocatalyst," *Nano Res.*, vol. 14, no. 2, pp. 450–457, 2021, doi: 10.1007/s12274-020-3056-6.

TOWARDS DESIGN, SYNTHESIS AND CHARACTERIZATION OF NEW LEAD-FREE BISMUTH-BASED HYBRID PEROVSKITES

Antonio J. Chacón García¹, Artem Babarik¹, Antonio Rodriguez-Diequez², Yolanda Pérez^{1,3}, Patricia Horcajada¹.

¹ *Advanced Porous Materials Unit, IMDEA Energy Institute, E-28935 Móstoles, Madrid, Spain*

² *Department of Inorganic Chemistry, University of Granada, 18071, Granada, Spain.*

³ *Department of Biology and Geology, Physics and Inorganic Chemistry, Rey Juan Carlos University, 28933, Móstoles, Madrid, Spain.*

antonio.chacon@imdea.org

Halide perovskites are being considered one of the most important materials in photovoltaic applications. In the last decade, the number of publications concerning perovskites materials has risen exponentially. This fact is due to their excellent optoelectronic properties such as high quantum yields, tunable bandgap, or easy and eco-friendly processability ¹.

Lead-based perovskites have shown the most promising optoelectronic properties reaching Power Conversion Efficiency (PCE) of 23.7% and being the most studied until date ². However, the use of lead is associated with great problems, one is related to the toxicity associated with this metal for human health and the environment and the second one is related to the low moisture resistance under adverse ambient conditions which results in a shorter life cycle of the final device.

Bismuth-based perovskites have emerged as a promising alternative to lead-based perovskites. These materials have shown a lower toxicity, a higher chemical stability in comparison with lead-based perovskites and optimal photoresponsive properties ³.

In this work, we have prepared two new hybrid perovskites IEF-15 and IEF-16 (IEF IMDEA Energy Framework) using the organic ligand 3,5-diamino-1,2,4-triazole. Both structures were solved by single crystal x-ray diffraction revealing 1D iodobismuthate structures based on polymeric chains. Further characterization revealed direct bandgap values of 1.93 eV and 2.04 eV for IEF-15 and IEF-16 respectively, which are optimal values for optoelectronic and photovoltaic applications.

Referencias – Máximo 3 referencias

1. *Hiragond, C. B., Powar, N. S. and In, S. (2020), Nanomaterials, (2569).*
2. *Zhang, W. et al. (2018), Chemistry of Materials, 30, pp. 4081–4088.*
3. *Shestimerova, T. A. et al. (2020), Molecules, (2765).*

ENZYME@METAL-ORGANIC FRAMEWORK COMPOSITES AS NOVEL APPROACH FOR MICROPLASTIC DEGRADATION

Autores. I.Rincón¹, S.Rojas¹, T.Hidalgo¹, P.Horcajada¹

¹ Instituto IMDEA Energía, Av. Ramón de La Sagra 3, 28935, Móstoles, Madrid, España

irene.rincon@imdea.org

Plastic pollution is one of the main current environmental concerns. Nowadays, the society lifestyle involves a persistent plastic consumption, aggravating the low efficiency of Wastewater Treatment Plants (WWTP) in the removal of microplastics from water^[1]. These pollutants can be accumulated in human bodies which make necessary to identify new strategies for water decontamination. Enzymes (e.g., *Candida Rugosa*-CrL) are known to act as natural plastic degraders, acting as catalysts in the depolymerization reaction^[2]. However, their stability, recyclability and economical costs are the main drawback for their potential application. Here, for the first time a new plastic degradation approach is presented: enzyme immobilization in Metal-Organic Frameworks (MOFs; CrL@MOF composites) to achieve the degradation of bis-(hydroxyethyl) terephthalate (BHET), main degradation product of polyethylene terephthalate (PET), in aquatic systems. The immobilization of CrL in MOFs will *a priori* enable its reusability, improve its stability and reduce its economic cost, which will favor the potential real application of these systems. Results shows BHET degradation capacities up to 50 % for CrL@MOF composites and, in some cases, reach degradation efficiencies reached by the enzyme in its free form. This, added to the recyclability of the composites make them a promising alternative in future decontamination processes.

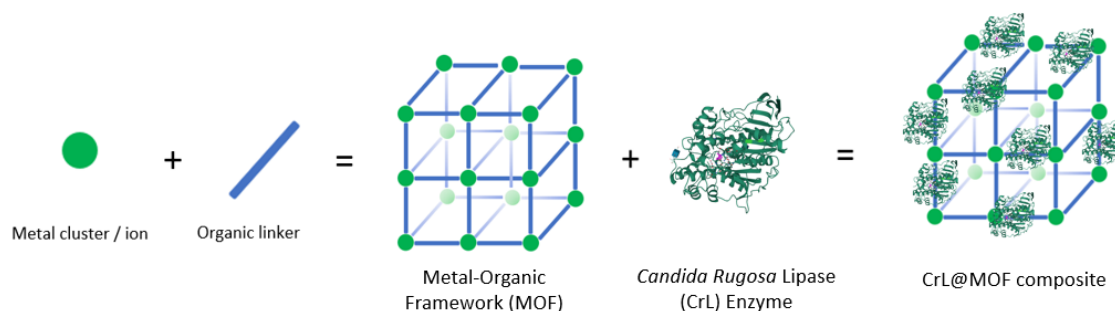


Figure 1: scheme of CrL@MOF composites formation

[1] Iyare, P.U., Ouki, S.K. & Bond, T. (2020). Microplastics removal in wastewater treatment plants: a critical review. *Environmental Science: Water Research & Technology*, 6(10): 2664-2675.

[2] Carniel, A., Valoni, É, Junior, J.N., da Conceição Gomes, A. & de Castro, A.M. (2017). Lipase from *Candida antarctica* (CALB) and cutinase from *Humicola insolens* act synergistically for PET hydrolysis to terephthalic acid. *Process Biochemistry*, 59: 84-90.

Synthesis of photoactive nano-composites: nanoMOF@GNP

Sorraya Lelouche¹

P. Horcajada¹

¹APMU, IMDEA Energy Institute Av. Ramón de La Sagra, 3, 28935 Móstoles,
Madrid

@:Sorraya.lelouche@imdea.org

The search for new and efficient materials is a never-ending endeavour, even more so for biocompatible materials. In order to specifically tailor the property of materials several approaches exist. One of which is the synthesis of composites; by combining at least two different materials it is possible to achieve higher efficiency and precise tailoring. Although composites made up of MOF (Metal Organic Framework) and GNP (Gold nanoparticles), have been largely reported in the field of catalysis much less examples can be found in biomedical applications, as they have only recently emerged as promising drug delivery systems

¹. Indeed, by combining nanosized biocompatible MOFs with high drug loading capacities² and different surface-engineered plasmonic GNP, one could achieve space-time controlled, light-triggered drug release (and additional properties such as optoacoustic imaging and/or photodynamic therapy).

Thus two Zr-based MOFs; PCN-224(Zr) and PCN-222(Zr), based on a photoactive porphyrin ligand (5, 10, 15, 20-tetrakis (4-carboxyphenyl)porphyrin (TCPP)), were selected to produce GNP@MOF nanocomposites as efficient theragnostic agents. Furthermore, their high porosities (2600 and 2476 m²/g BET surface; and pore size 1.9 nm and, 1.2 & 3.2 nm, respectively) is suitable for efficient drug encapsulation. Additionally, their photoactive character might allow a fine tuning of the drug release insideliving entities. PCN-224(Zr) is a kinetic phase and PCN-222(Zr) is the thermodynamically favoured phase. The figure below shows electron microscopy images, of a sample with a low loading in GNP. Through microwave assisted synthesis, PCN-222(Zr), stick shaped crystals, and PCN-224(Zr), ball shaped crystals, associated to GNP as core-shell composites were obtained. Further optimization of the purity, particle size and yield is in progress.

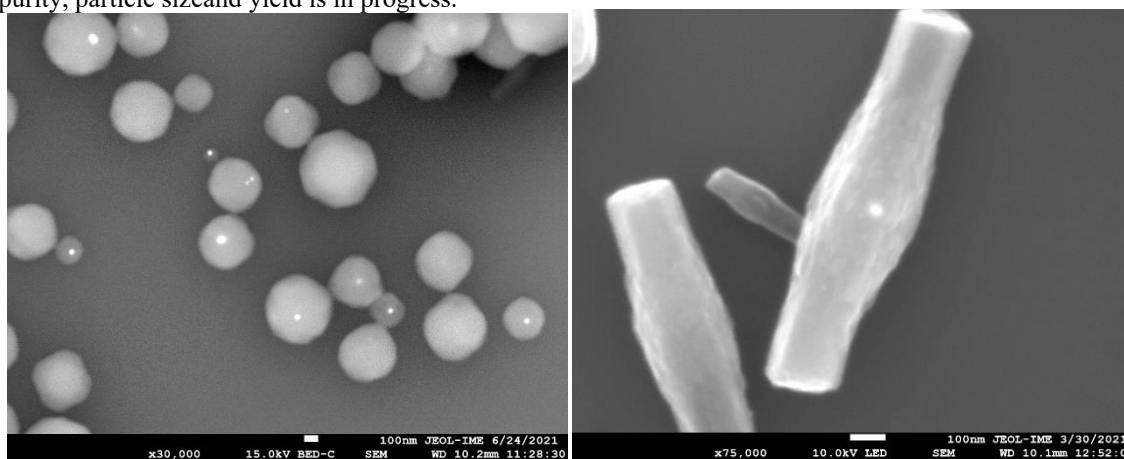


Figure 1(A-B): Electron microscopy images of composite sample (PCN-224 (Zr) on the left and PCN-222(Zr) on the right)

References

1. Carrillo-Carrión, C. *et al.* Aqueous Stable Gold Nanostar/ZIF-8 Nanocomposites for Light-Triggered Release of Active Cargo Inside Living Cells. *Angew. Chemie - Int. Ed.* **58**, 7078–7082 (2019).
2. Leng, X. *et al.* Zirconium-porphyrin PCN-222: PH-responsive controlled anticancer drug oridonin. *Evidence-based Complement. Altern. Med.* **2018**, (2018).
3. Feng, D. *et al.* Construction of ultrastable porphyrin Zr metal-organic frameworks through linker elimination. *J. Am. Chem. Soc.* **135**, 17105–17110 (2013).

Acknowledgment

This project has received funding from the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme under the Marie Skłodowska-Curie grant agreement No. 860942.

COMPUESTOS OXIMATO DE POTASIO: CATALIZADORES ACTIVOS EN LA POLIMERIZACIÓN CONTROLADA DE LACTIDA

A.Medel¹, C.Rentero¹, J.Damian¹, V.Sessini¹, M.E.G. Mosquera¹

¹Departamento de Química Orgánica y Química Inorgánica, Instituto de Investigación en Química “Andrés M. del Río” (IQAR) Universidad de Alcalá, Campus Universitario, 28871-Alcalá de Henares, Madrid, asiermedelgarcia@hotmail.es

Actualmente la industria produce millones de toneladas de plástico por año, estos plásticos proceden de recursos fósiles no renovables y su ciclo de vida es muy extenso, causando gran contaminación e impacto en el medio ambiente. Como resultado, se ha potenciado la búsqueda de posibles alternativas que se basen en procesos más sostenibles y respetuosos con el medio ambiente, adquiriendo gran importancia los bioplásticos, por su origen renovable y porque en algunos casos son biodegradables.^[1]

En este trabajo se busca obtener bioplásticos con propiedades avanzadas. En este sentido, los polímeros de poli-*L*-lactida (PLA), adquieren importancia como precursores de bioplásticos porque en las condiciones adecuadas pueden presentar respuesta piezoeléctrica.^[2]

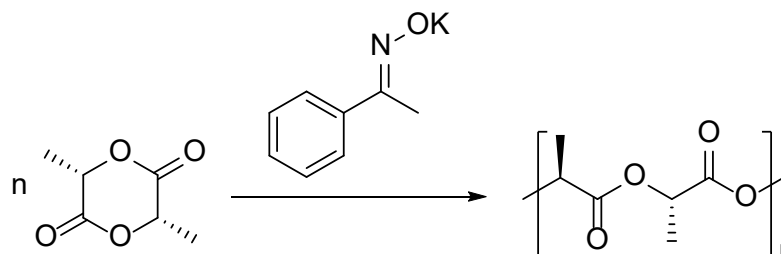


Figura 1. Síntesis de PLLA

Es posible lograr la formación de poli-*L*-lactida a partir del monómero cíclico lactida mediante una polimerización de apertura de anillo (ROP). Este tipo de polimerización permite un alto control de la microestructura del polímero obtenido lo cual es esencial para lograr polímeros con propiedades avanzadas. En las reacciones ROP estudiadas hemos empleado como catalizador un compuesto oximato de potasio, que resultó ser muy activo, logrando la polimerización de la lactida en pocos minutos. Además, el uso de potasio posee un gran interés ya que es barato, abundante y no tóxico para el cuerpo humano.^[3] En los estudios de polimerización realizados se han optimizado diversos factores, como el disolvente, el uso de alcohol bencílico a modo de iniciador y la estequiometría catalizador: iniciador: monómero. Además, se han caracterizado los polímeros obtenidos por Resonancia Magnética Nuclear, Cromatografía de Permeación en Gel, Análisis Termogravimétrico y Calorimetría Diferencial de Barrido.

Referencias

- [1] Thakur, S.; Chaudhary, J.; Sharma, B.; Verma, A.; Tamulevicius, S.; Thakur, V. K. Sustainability of bioplastics: Opportunities and challenges. *Current opinion in green and sustainable chemistry* 2018, 13, 68-75.
- [2] Chorsi, M. T.; Curry, E. J.; Chorsi, H. T.; Das, R.; Baroody, J.; Purohit, P. K.; Ilies, H.; Nguyen, T. D. Piezoelectric Biomaterials for Sensors and Actuators. *Adv. Mater.* 2018, 31.
- [3] García-Valle, F. M.; Estivill, R.; Gallegos, C.; Cuenca, T.; Mosquera, M. E. G.; Taberner, V.; Cano, J. Metal and Ligand-Substituent Effects in the Immortal Polymerization of rac-Lactide with Li, Na, and K Phenoxo-imine Complexes. *Organometallics* 2015, 34, 477-487

BIOPLÁSTICOS CON PROPIEDADES PIEZOELÉCTRICAS

Autores: C. Rentero¹, A. Medel, V. Sessini, J. Damián Burgoa, M. E. G. Mosquera

¹Departamento de Química Orgánica y Química Inorgánica, Instituto de Investigación en Química “Andrés M. del Río” (IQAR), Universidad de Alcalá, Campus Universitario, 28871 Alcalá de Henares, España.

e-mail: christian.rentero@edu.uah.es

El interés en reemplazar los plásticos derivados del petróleo está aumentando debido a la contaminación causada por los grandes vertidos de residuos plásticos. Los bioplásticos aparecen como una opción más respetuosa con el medio ambiente debido a que proceden de fuentes renovables y/o son biodegradables.[1]

La poli-*L*-lactida (PLLA) es uno de los bioplásticos más utilizados. Es posible sintetizar PLLA mediante la polimerización catalítica de *L*-lactida, un éster cíclico que puede obtenerse de fuentes renovables. Asimismo, los polímeros de PLLA pueden presentar piezoelectricidad mediante una síntesis y un procesamiento mecánico adecuados.[2] Para la polimerización catalítica de lactida, generalmente se emplean complejos metálicos que puedan controlar la estereoquímica del proceso de polimerización por apertura de anillo (ROP: *Ring-Opening Polymerization*) y se puedan dar lugar a polímeros con altos pesos moleculares y buena polidispersidad. Recientemente, en nuestro grupo se ha desarrollado un catalizador de potasio muy activo en la ROP de ésteres cíclicos.[3] Además, el potasio es un metal abundante y no tóxico que presenta buena biocompatibilidad, lo cual es de gran interés para posibles aplicaciones biomédicas.

En este trabajo, se utilizó un complejo de potasio, cuyo entorno fue diseñado para poder controlar la polimerización y dar lugar a polímeros isotácticos de PLLA. Para producir polímeros con propiedades piezoeléctricas, se procesaron polímeros de PLLA mediante la técnica de electrospinning. Finalmente, tanto los polímeros sintetizados como las nanofibras orientadas fueron caracterizadas.

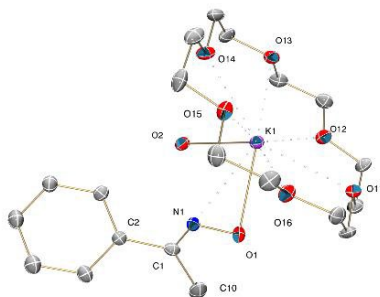


Figura 1

Referencias

- [1] Zhu, Y.; Romain, C.; Williams, C. K. Sustainable polymers from renewable resources. *Nature* 2016, 540, 354-362.
- [2] Chorsi, M. T.; Curry, E. J.; Chorsi, H. T.; Das, R.; Baroody, J.; Purohit, P. K.; Ilic, H.; Nguyen, T. D. Piezoelectric Biomaterials for Sensors and Actuators. *Advanced materials* 2019, 31.
- [3] Fernández-Millán, M.; Ortega, P.; Cuenca, T.; Cano, J.; Mosquera, M. E. G. Alkali-Metal Compounds with Bio-Based Ligands as Catalysts for Isolelective Lactide Polymerization: Influence of the Catalyst Aggregation on the Polymerization Control. *Organometallics* 2020, 39, 2278-2286.

INTRODUCCIÓN DE FOTOCATALIZADORES EN NANOTUBOS DE CARBONO PARA LA MEJORA DE SU ESTABILIDAD Y ACTIVIDAD CATALÍTICA

D. González-Muñoz¹, M. Blanco¹, Ana Somer³, Sergio Díaz-Tendero³, S. Cabrera², J. Alemán¹

¹Universidad Autónoma de Madrid. Departamento de Química Orgánica

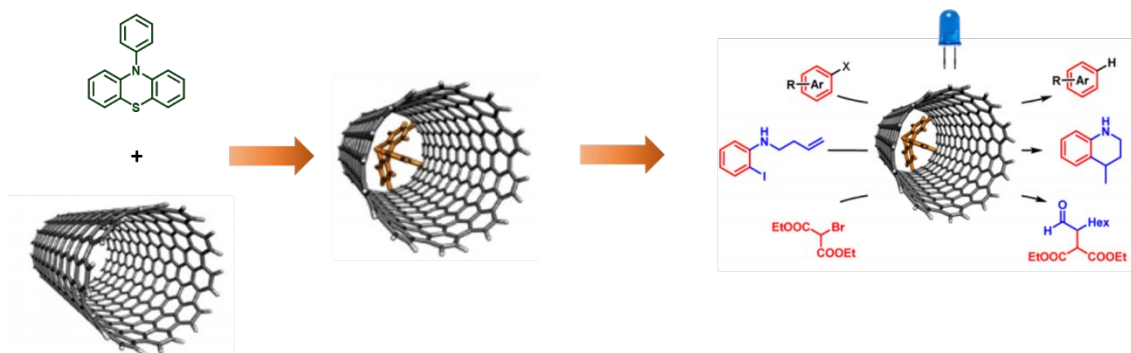
²Universidad Autónoma de Madrid. Departamento de Química Inorgánica

³Universidad Autónoma de Madrid. Departamento de Química

daniel.gomu91@gmail.com

El cambio climático es el problema más importante al que nos vamos a enfrentar los próximos años, y el desarrollo de procesos químicos menos contaminantes es de vital importancia para la sociedad. En la naturaleza las plantas utilizan la luz solar para llevar a cabo reacciones químicas en su interior de tal forma que puedan almacenar energía. Así nace la fotocatalisis, la rama de la ciencia que intenta imitar artificialmente el proceso de fotosíntesis de las plantas. La fotocatalisis tiene aplicaciones en múltiples campos como la síntesis de fármacos, el tratamiento de aguas, la descontaminación del aire o la producción de nuevos combustibles como el hidrógeno.¹

En este trabajo se han utilizado nanotubos de carbono de pared sencilla (SWCNTs) para funcionalizarlos con fenilfenotiazina (PTH), un conocido fotocatalizador orgánico, y poder mejorar sus propiedades fotocatalíticas en diferentes reacciones químicas de interés (véase esquema)². En primer lugar, se llevó a cabo la funcionalización endohédrica de SWCNTs con PTH mediante impregnación húmeda en caliente usando nanotubos cuyas puntas estaban previamente abiertas mediante digestión ácida. Al funcionalizar la cavidad interna de los SWCNTs, se mejoran las propiedades electrónicas del fotocatalizador híbrido resultante, ya que los nanotubos de carbono son conductores, lo que potencia la transferencia de electrones notablemente desde la PTH al sistema electrónico del nanotubo en los procesos de excitación usando luz visible. El nanomaterial híbrido PTH@SWCNT resultó ser un excelente fotocatalizador heterogéneo capaz de llevar a cabo la deshalogenación de haluros de arilo, la síntesis de tetrahydroquinolinas a partir de la ciclación de iodoanilinas y la α -alquilación de aldehídos. Además, PTH@SWCNT resultó ser muy robusto y reciclable, llegando a mantener su actividad fotocatalítica después de 8 ciclos de reacción.



Referencias:

1. *Advances in Solar Energy Research*; Himanshu, T., Agarwal, A. K., Chakraborty, P. R., Powar, S., Ed.; Springer Nature, Singapore, 2019.
2. González-Muñoz, D.; Martín-Somer, A.; Strobl, K.; Cabrera, S.; De Pablo, P. J.; Díaz-Tendero, S.; Alemán, J. *ACS Appl. Mater. Interfaces*. **2021**, *13*, 24877.

Agradecimientos: European Research Council (ERC-CoG, Contract Number: 647550), the Gobierno Español (RTI2018-095038-B-I00, PID2019-110091GB-I00) y Comunidad de Madrid (S2018/NMT-4367). M.B. agradece un contrato Juan de la Cierva (IJC2019-042157-I).

PLATAFORMAS SENSORAS NANOESTRUCTURADAS BASADAS EN UN COMPLEJO TERNARIO DE ADN

A. M. Villa-Manso¹, M. Revenga-Parra^{1,2,3}, F. Pariente^{1,2,3} y E. Lorenzo^{1,2,3}

¹ Departamento de Química Analítica y Análisis Instrumental, ² Institute for Advanced Research in Chemical Sciences (IAdChem), Universidad Autónoma de Madrid, Cantoblanco, 28049 Madrid, España.

³ Instituto Madrileño de Estudios Avanzados en Nanociencia (IMDEA-Nanociencia), Faraday, 9, Campus UAM, Cantoblanco, 28049 Madrid, España

anamaria.villa@estudiante.uam.es

En este trabajo de investigación se ha desarrollado una nueva estrategia para modificar electrodos serigrafados de grafeno (SPGrE), basada en la formación de un complejo ternario compuesto por ADN bicatenario (dsADN), ion aluminio y el colorante histoquímico hemateína (Hm). Para ello, en primer lugar, se ha demostrado la formación del complejo $[Al(Hm)_2]^+$, determinándose su estequiometría y constante de formación mediante espectrofotometría UV-Vis. La modificación de los electrodos se llevó a cabo en dos etapas: en primer lugar, se depositó directamente dsADN e ion aluminio sobre la superficie de grafeno y, en segundo lugar, se electrodepositó hemateína sobre ellos. El electrodo modificado resultante se caracterizó mediante voltamperometría cíclica, confirmando la presencia de los grupos característicos quinona/hidroquinona presentes en la estructura de la hemateína. La microscopía electrónica de barrido reveló que la superficie del electrodo está cubierta por estructuras esponjosas, que corresponden a nanopartículas esféricas que se unen formando ramificaciones debido a la formación del complejo antes mencionado sobre la superficie del electrodo. Esta novedosa plataforma nanoestructurada presenta una buena estabilidad y fuerte actividad electrocatalítica frente a la oxidación de la hidracina (Figura 1). La corriente catalítica aumenta linealmente al aumentar la concentración de hidracina hasta 1,00 mM. Los límites de detección (0,600 μ M) y cuantificación (1,97 μ M) calculados indican que los electrodos modificados pueden usarse como sensores amperométricos para la determinación de hidracina.

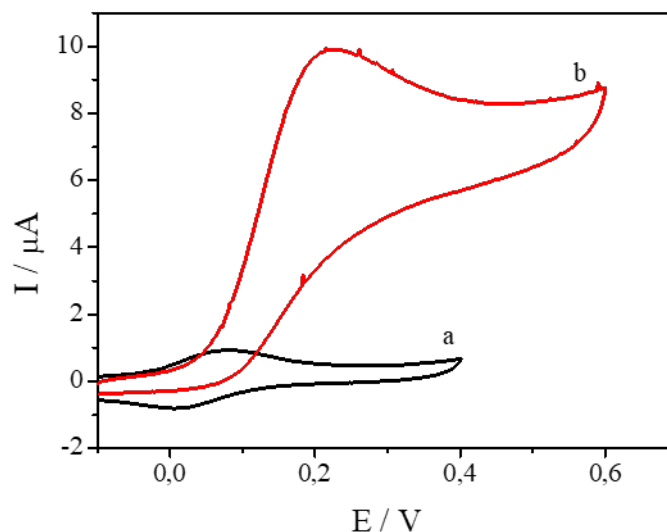


Figura 1. Voltamperogramas cíclicos de un electrodo SPGrE modificado con dsADN-Al³⁺-Hm en ausencia (a) y en presencia (b) de 0,500 mM hidracina en tampón fosfato 0,1 M (pH 7,0). Velocidad de barrido: 5 mVs⁻¹

INMUNOSENSOR ELECTROQUIMIOLUMINISCENTE PARA LA DETECCIÓN DE GLIFOSATO EN MUESTRAS ALIMENTARIAS

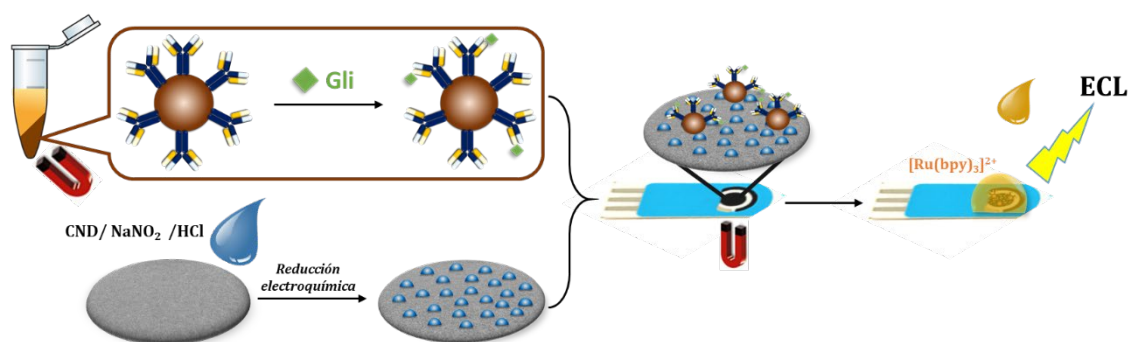
**Tamara Guerrero-Esteban^a, Cristina Gutiérrez-Sánchez^a, Emiliano Martínez-Periñán^a,
 Mónica Revenga-Parra^{a,b,c}, Félix Pariente^{a,b}, Encarnación Lorenzo^{a,b,c}**

^aDepartamento de Química Analítica y Análisis Instrumental and ^bInstitute for Advanced Research in Chemical Sciences (IAdChem) Universidad Autónoma de Madrid, 28049 Madrid, Spain.

^cInstituto Madrileño de Estudios Avanzados (IMDEA) Nanociencia, Faraday, 9, Campus de Cantoblanco, 28049 Madrid, Spain.

E-mail: tamara.guerrero@uam.es

La electroquimioluminiscencia (ECL) se ha convertido en una poderosa herramienta analítica en el diseño de biosensores para la detección de diferentes biomoléculas relacionadas con el diagnóstico clínico, monitoreo ambiental y de alimentos debido a su capacidad de proporcionar una respuesta sensible y rápida. Además, el uso de nanoestructuras puede mejorar la intensidad de la señal ECL y, por tanto, el rendimiento del biosensor. Por esta razón, en el presente trabajo se han unido covalentemente nanopuntos de carbono (CND) ricos en nitrógeno a electrodos serigrafados de carbono mediante un proceso de electroinjerto. Las plataformas resultantes mostraron una mayor superficie relativa y mejores propiedades en la transferencia de electrones. Los CND se sintetizaron mediante radiación microondas partiendo de los precursores L-arginina y 3,3'-diamino-N-metildipropilamina y se caracterizaron mediante diferentes técnicas. Las plataformas desarrolladas también mostraron un comportamiento electrocatalítico, mejorando la señal ECL del $[\text{Ru}(\text{bpy})_3]^{2+}$ y por ello, se emplearon para el desarrollo de un inmunosensor ECL basado en el uso de nanopartículas magnéticas modificadas con anticuerpos anti-glifosato para la determinación de glifosato. El glifosato es el herbicida más utilizado en todo el mundo y actualmente, su uso está permitido en actividades agrícolas, urbanas y domésticas. Su uso intensivo en agricultura ha provocado una contaminación global que puede afectar a muestras de agua, suelo o alimentos. Por lo tanto, el desarrollo de nuevos métodos para la determinación de glifosato es de gran interés. La utilidad del dispositivo se ha demostrado mediante la determinación del contenido de glifosato en muestras de leche de soja y té. Los resultados se validaron comparándolos con los obtenidos mediante un kit ELISA comercial, lo que demostró que la plataforma de detección inmunomagnética ECL desarrollada es un dispositivo rápido, selectivo y sensible que se puede utilizar para la monitorización *in situ* de glifosato.



SELENIUM NANOPARTICLES FOR THE TREATMENT OF ALZHEIMER DISEASE: INTERACTION WITH AMINO ACID ENANTIOMERS

Vicente-Zurdo, D., Rodríguez-Blázquez, S., Rosales-Conrado, N., León-González, M.E., Madrid, Y.

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avenida Complutense s/n, 28040, Madrid
davidvic@ucm.es

Alzheimer's Disease (AD) is a neurodegenerative disorder that represents the most common type of dementia in the world, being therefore of great importance and impact, since more than 40% of the population over 85 years of age suffers from this disease [1]. It has been estimated that 150 million people will suffer from AD by 2050 [2]. AD pathology is characterized by aggregation of amyloid β -protein 1-42 ($A\beta_{42}$). While L-amino acids are considered essential in the humans, there is a direct relationship between D-amino acid content and protein ageing, triggering the development of numerous diseases, such as AD. Selenium nanoparticles stabilized with chitosan (Ch-SeNPs) have shown great potential reducing the aggregation of amyloid fibers [3] and can also have enantiomeric selectivity properties due to the chitosan.

In this work, Ch-SeNPs were characterized by several techniques. Reproducibility test of the synthesis and storage stability were carried out by UV-Vis. Interaction between Ch-SeNPs and D-Phe or L-Phe was studied by UV-Vis and fluorescence, by a derivatization reaction of the Phe enantiomers. For D-Phe, interaction was maximum at 1:4 stoichiometry (Ch-SeNPs : D-Phe), while for L-Phe no interaction was found, thus confirming the enantioselectivity of selenium nanoparticles. Regarding $A\beta_{42}$ experiments by TEM, L-Phe did not interact with the protein, whereas D-Phe showed an increase of amyloid aggregation, thus triggering AD. Thereby, incubation in the presence of Ch-SeNPs was carried out, achieving a complete disaggregation of $A\beta_{42}$ fibers which were previously aggregated due to D-Phe effect. Amyloid fibers under presence of L-Phe were not modified under Ch-SeNPs addition.

In conclusion, this study provided insight into the enantioselective behaviour of selenium nanoparticles in AD, which will support the development of new way of pharmacological research to combat AD.

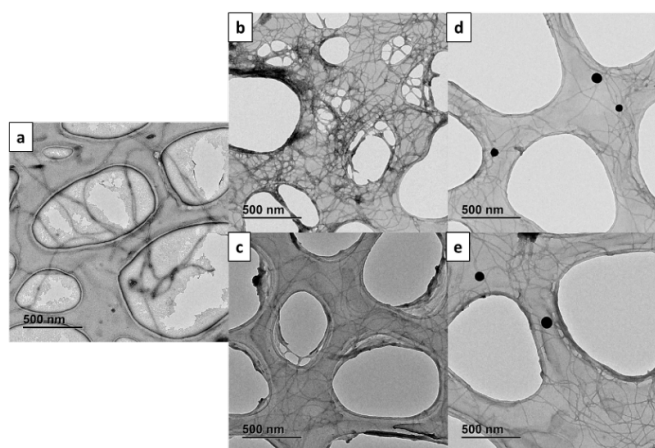


Figure 1. Incubation of $A\beta_{42}$ at 37 °C during 48 h. a) Alone; b) D-Phe; c) L-Phe; d) D-Phe + Ch-SeNPs; e) L-Phe + Ch-SeNPs

References

- [1] Lewczuk, P., et al. *Advances in Medical Sciences*. 76 (2015) 60.
- [2] Alzheimer's Association. *Alzheimers Dement*. 2015 11(3):332.
- [3] Vicente-Zurdo, D., et al. *Analytical and Bioanalytical Chemistry*. 412 (2020) 6485.

Acknowledgements

This work was supported by PB2018/BAA-4393- AVANSECAL II-CM, CTQ2017-83569-C2-1-R, PR26/16-16B-3. D. Vicente-Zurdo acknowledges the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities for funding (FPU18/00573).

ALTERNATIVE METHOD TO STUDY THE BIOACCUMULATION AND BIOTRANSFORMATION OF EMERGING POLLUTANTS USING ZEBRAFISH LARVAE

P. de Oro-Carretero¹, J. Sanz-Landaluze¹

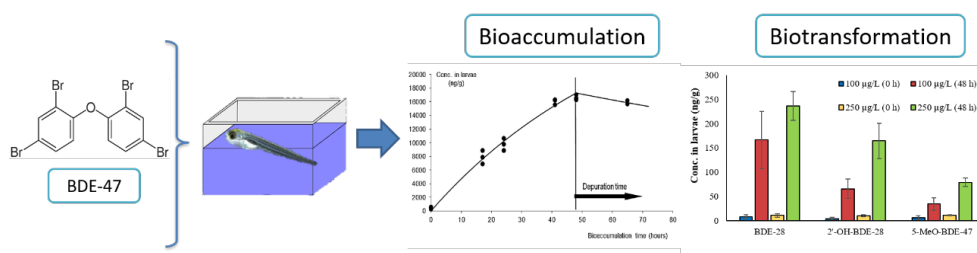
¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Av. Complutense, s/n, 28040, Madrid
 pdeoro@ucm.es

Emerging pollutants are a wide group of substances that, although their presence in the environment is not necessarily recent, their effects and the concern about them are new.

In recent years, several international agencies and institutions have been calling for a transformation in toxicity testing, seeking greater efficiency and a decrease in the use of animals by transitioning from the current lengthy *in vivo* tests to alternative and *in vitro* tests on cell line [1].

In this sense, an alternative method based on the official OECD guideline 305 [2], previously developed in the research group [3], is used to evaluate bioaccumulation with zebrafish larvae (*Danio rerio*), drastically reducing the time, the reagents and the suffering of the animals. This method is based on the exposure of the larvae (72 hpf) to the contaminant for 48 h and a depuration phase up to 72 h, so that the concentration ratio between the larvae and the exposure medium over time (Bioconcentration Factor, BCF) is estimated using toxicokinetic models. This method, within the research group, has been used to study a wide variety of pollutants, including polybrominated diphenyl ethers (PBDEs), due to their high resistance to environmental degradation, tendency to bioaccumulate and concerns about their mutagenic, carcinogenic and endocrine disrupting effects (EDCs). In addition, they produce hydroxylated and methoxylated derivatives (OH-BDEs and MeO-BDEs) with similar toxic properties.

The profiles found for BDE-47, one of the most abundant congeners, show a rapid uptake in the first hours of larval development and a high bioaccumulative power (BCF > 5000), BCF 8000 and 43000 at 10 and 1 µg·L⁻¹ (< 1% LC50), respectively. In addition, increasing concentrations of the metabolites BDE-28, 2'-OH-BDE-28 and 3-OH-BDE-47 were observed over the exposure time. These results show the feasibility of the method for bioaccumulative studies and open the possibility for metabolic studies with zebrafish larvae, which is a very underdeveloped field with no official tests or regulation.



Acknowledgments:

Authors are grateful to AZTI Tecnalia (Bizkaia, Spain) for providing of the eleutheroembryo samples and the financial support of this work by the Ministry of Economy and Competitiveness (grant code CTQ2017-83569-C2-1-R), Comunidad Autónoma of Madrid (Project AVANSECAL-II-CM, code 2018/BAA4393) and Universidad Complutense of Madrid for supporting the research group “Determinación de Trazas, Especiación y Proteómica.

References:

- [1] U.S. National Research Council. Toxicity Testing in the 21st Century: A Vision and a Strategy, prepared by the Committee on Toxicity Testing and Assessment of Environmental Agents, (2007).
- [2] OECD, “Test No. 305 Bioaccumulation in Fish: Aqueous and Dietary Exposure,” *Guidel. Test. Chem.*, (2012).
- [3] J. Sanz-Landaluze, M. Pena-Abaurrea, R. Muñoz-Olivas, C. Cámara, and L. Ramos, “Zebrafish (danio rerio) eleutheroembryo-based procedure for assessing bioaccumulation,” *Environ. Sci. Technol.*, vol. 49, no. 3, pp. 1860–1869, (2015).

NANOPUNTOS CUÁNTICOS DE CARBONO

A. Ribeiro González¹, C. Agudo Blanco¹, D. García Fresnadillo¹, N. Martín^{1,2}.¹ Departamento Química Orgánica, Facultad de CC. Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid² IMDEA-Nanociencia, C/ Faraday 9, Campus de Cantoblanco, 28049 Madrid

anribe01@ucm.es

Los nanopuntos cuánticos de carbono (*carbon quantum dots*, CQDs) son estructuras de carbono en forma de nanopartículas (10^{-9} m) que suscitan creciente interés científico-tecnológico debido al confinamiento cuántico de sus electrones, lo que las dota de carácter semiconductor y de propiedades optoelectrónicas interesantes y distintivas en comparación con otros nanomateriales como el grafeno. Por otro lado, los nanopuntos de carbono suelen presentar baja toxicidad si se comparan con otras nanopartículas inorgánicas. Además, poseen absorción de luz en la región UV-Visible del espectro electromagnético y emisión de fluorescencia dependiente de la longitud de onda de excitación.¹ Debido a estas propiedades, se pueden desarrollar aplicaciones de los CQDs en distintos campos como la iluminación LED, bioimagen, terapias fotodinámicas o (bio)sensores, en la conversión y almacenamiento de energía, y en nuevos materiales optoelectrónicos y magnéticos.²

La síntesis de CQDs se ha realizado mediante un reactor fotoquímico, empleando un láser pulsado Nd:YAG a 532 nm, como se representa en la Figura 1, siguiendo una aproximación de abajo-arriba a partir de precursores orgánicos sencillos y sales inorgánicas.³ Los CQDs obtenidos están siendo caracterizados mediante técnicas de microscopía, espectroscopía y medidas de magnetización, previamente al desarrollo de aplicaciones en los campos citados. En la Figura 2 se muestra una de las características de los CQDs, la dependencia existente entre la emisión de fluorescencia y la longitud de onda de excitación.

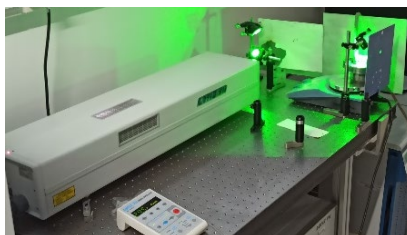


Figura 1. Síntesis de CQDs mediante láser pulsado.

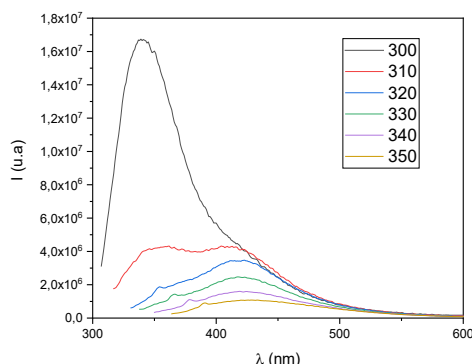


Figura 2. Espectros de emisión UV-Visible en 2-propanol de CQDs obtenidos a partir de ácido benzoico (6,6 µg/mL).

Referencias

- [1] Chung, S.; Revia R. A.; Zhang M. *Adv. Mater.* **2019**, *33*, 1904362.
- [2] Sivasankarapillai, V. S.; Kirthi, A. V.; Akksadha, M.; Indu, S.; Dharshini, U. D.; Pushpamalar, J.; Karthik, L. *Nanoscale Adv.* **2020**, *2*, 1760-1773.
- [3] Tan, D.; Sharafudeen, K. N.; Yue, Y., Qiu, J. *Prog. Mater. Sci.* **2016**, *76*, 154-228.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por la Comisión Europea (ERC Synergy Grant 2020, ERC-2020-SyG: TOMATTO), el MINECO de España (CTQ2017-83531-R), y la Comunidad de Madrid (FOTOCARBON-CM S2013/MIT-2841).

NEW SUSTAINABLE STRATEGIES FOR THE VALORISATION OF AGRI-FOOD BIORESIDUES

E. Gómez-Mejía¹, N. Rosales-Conrado¹, M.E. de León-González¹, Y. Madrid¹

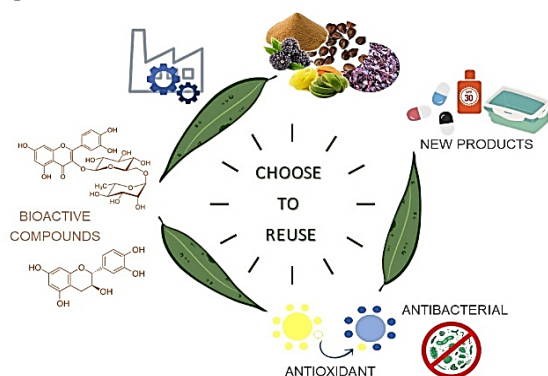
¹ Analytical Chemistry Department, Chemistry Faculty, Complutense University of Madrid
 egomez03@ucm.es

Significant amounts of industrial bioresidues are generated worldwide, causing serious environmental issues, to be land occupation, emission of carbon dioxide or resource expenditure to name but a few. Accordingly, sustainable approaches, such as circular economy, are increasingly seen as a crucial way to reduce food residues and obtain valuable raw materials. Furthermore, there is a growing demand for industrial products with clean labels and biological benefits, where natural bioactive compounds replace artificial ones. Among these natural bioactives, polyphenols stand out for their fully reported health benefits against cancer, diabetes or neurodegenerative diseases. Therefore, the valorisation of agro-industrial bioresidues as rich sources of polyphenol, for the development of new natural preservatives, bioactive dyes and nutraceutical is in the spotlight [1].

Based on these premises, the present work aims to report the development and optimization of cost-effective and sustainable extraction procedures for the recovery of polyphenols from different agri-food biowastes using hydroethanolic mixtures, considered as environmentally friendly, food compatible and low toxic solvents. Widely produced food wastes were selected for their higher economic and environmental impact, so post-fermentation brewer's yeast, citrus peels, spent coffee grounds, and grape and mulberry residues were studied as sources of polyphenols. The phenolic extracts were then determined by liquid chromatography (LC) coupled to a UV-Vis detector and/or a mass analyser (MS).

Thereupon, polyphenols have been isolated using two extraction strategies: conventional solid-liquid extraction (SLE) assisted by magnetic stirring and matrix solid-phase dispersion extraction (MSPD) assisted by dioxide titanium nanoparticles. In a further effort to establish the optimal extraction conditions to maximise the amount of extracted polyphenols, either target phenolics or in total, it was necessary to resort to chemometric tools such as experimental design and response surface methodology.

Bioactive compounds such as gallic acid, chlorogenic acid, narangin, hesperidin or catechin were recovered at concentration levels from 15 mg·g⁻¹, up to 650 mg·g⁻¹ [2, 3]. In addition, spectrophotometric and *in vitro* analyses were performed complementarily to evaluate the antioxidant, antimicrobial and cytotoxic activity of the phenolic extracts. An effective antimicrobial activity against multiresistant *Staphylococcus aureus* or *Escherichia coli* (Minimal Inhibitory Concentration = 5 mg·mL⁻¹ for grape and mulberry seeds) and antioxidant activity against free radicals (IC₅₀ = 13 ± 3 mg·g⁻¹ for lemon peels) or against lipid peroxidation (IC₅₀ = 5.0 ± 0.4 µg·g⁻¹ for wine pomace) were obtained. Hence, these results show the potential of these bioresidues extracts as natural ingredients to be used in the industrial, cosmetic or agri-food industries [1-3].



According to the aforementioned, evaluated bioresidues could be reused and valorised as source of antioxidant-rich ingredients to minimise the environmental impact of waste management along to develop new industrial products.

References

- [1] Gómez-Mejía, E., Lobo Roiz, C., Heleno, S.A et al., *Food Chem.*, 2021, 337 (2021), 127998
- [2] Gómez-Mejía, E., Rosales-Conrado, N., León-González, M.E., & Madrid, Y., *Food Chem.*, 282 (2019) 289-299
- [3] Gómez-Mejía, E., Hartwig Mikkelsen, L., Rosales-Conrado, N., et al., *J. Chrom. A*, 1644 (2021), 462128

Acknowledgements

This work was supported by the Community of Madrid/FEDER program [S2018/BAA-4393, AVANSECAL II-CM]; the Science Ministry [PID2020-114714RB-100] and the Complutense University through a pre-doctoral grant

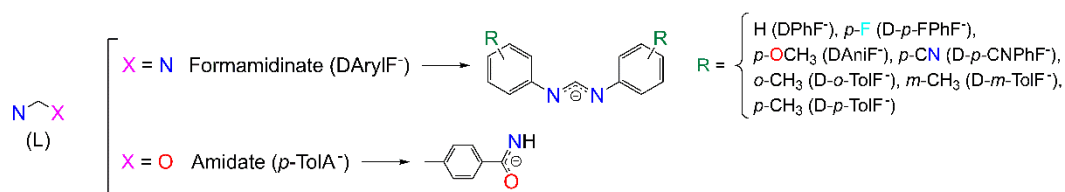
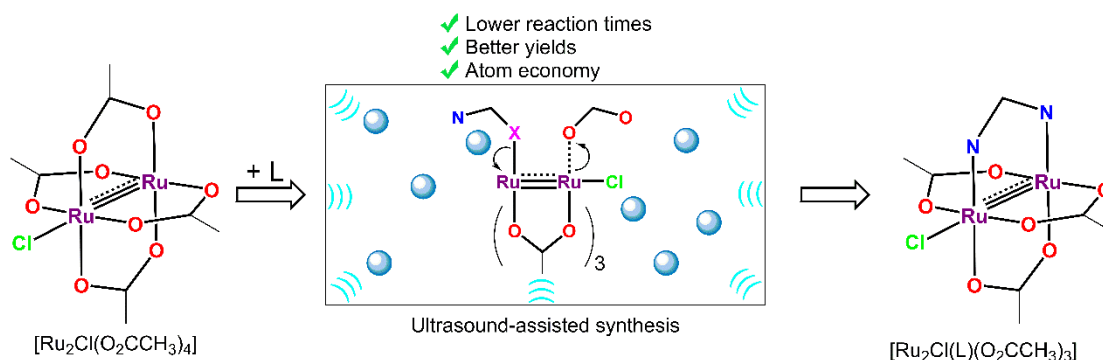
Green synthesis for the preparation of metal-metal bonded compounds

A. Terán¹, S. Herrero¹, A. E. Sánchez-Peláez¹, R. Jiménez-Aparicio¹

¹Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid, Spain
aaronter@ucm.es

The use of greener alternative activation methods such as microwave-assisted synthesis to obtain metal-metal bonded compounds has been gaining interest in recent years.¹ In particular, it has been used successfully to prepare diruthenium derivatives. However, that method was focused mainly on the synthesis of full substituted species, $[\text{Ru}_2\text{Cl}(\text{L})_4]$ ($\text{L} = \text{O}, \text{O}'\text{-donor}, \text{N}, \text{N}'\text{-donor}$ or $\text{N}, \text{O}\text{-donor}$ ligands) from $[\text{Ru}_2\text{Cl}(\text{O}_2\text{CMe})_4]$, and it does not generally allow to obtain intermediate substitution compounds, $[\text{Ru}_2\text{Cl}(\text{L})_x(\text{O}_2\text{CMe})_{4-x}]$ ($x = 1, 2, 3$). The monosubstituted complexes, $[\text{Ru}_2\text{Cl}(\text{L})(\text{O}_2\text{CMe})_3]$, have been especially elusive with any synthetic procedure. Moreover, when the compound is obtained, a laborious purification processes are necessary.²

In this study, we report a novel, easy, efficient and general synthetic method for the preparation of monosubstituted Ru_2^{5+} derivatives based on ultrasound assisted synthesis (UAS) as activation method and using $\text{N}, \text{N}'\text{-donor}$ (DArylF^-) or $\text{N}, \text{O}\text{-donor}$ ($p\text{-TolA}^-$) molecules as substitution bridging ligands. This is the first time that UAS has been used to carry out ligand substitution reactions in metal-metal bonded compounds. The isolated compounds were characterized by a multi-technique approach including single-crystal X-ray diffraction studies and magnetic properties measurements.



Referencias

- González-Prieto, R., Herrero, S., Jiménez-Aparicio, R., Morán, E., Prado-Gonjal, J., Priego, J. L., Schmidt, R. Microwave-assisted solvothermal synthesis of inorganic compounds (molecular and non molecular). in *Microwave Chemistry* (eds. Cravotto, G. & Carnaroglio, D.) 225–247 (De Gruyter, 2017).
- Cortijo, M., González-Prieto, R., Herrero, S., Priego, J. L. & Jiménez-Aparicio, R. The use of amidinate ligands in paddlewheel diruthenium chemistry. *Coord. Chem. Rev.* **400**, 213040 (2019).

Agradecimientos

The Government of Comunidad de Madrid (Project S2017/BMD-3770-CM) and Universidad Complutense are gratefully acknowledged for financial support. A.T. acknowledge to Universidad Complutense for a Predoctoral Grant (CT63/19-CT64/19) and to the Spanish Ministry of Science and Innovation for a Postgraduate Fellow at Residencia de Estudiantes (2020-2021).

ANÁLISIS DE MICOTOXINAS FÚNGICAS EN DISTINTAS VARIEDADES DE ARROZ

I. Romero-Sánchez, E. Gracia-Lor, Y. Madrid-Albarrán

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avenida Complutense s/n, Madrid, 28040, España

Ivaromer@ucm.es

Las micotoxinas son metabolitos secundarios tóxicos producidos por una amplia variedad de hongos, mayoritariamente del género *Aspergillus*, *Penicillium* y *Fusarium*. Estos hongos se hallan presentes en todo tipo de cultivos y, bajo determinadas condiciones, pueden sintetizar micotoxinas. Actualmente se estima que al menos el 25% de los cultivos mundiales de cereales están contaminados por micotoxinas. Entre los cientos de micotoxinas que se conocen son de especial interés aquellas que generan toxicidades de relevancia en el organismo, como es el caso de las aflatoxinas, las fumonisinas, las ocratoxinas, la zearalenona o los tricotecenos, entre otras. Las toxicidades generadas por estas familias de micotoxinas son muy variadas y pueden actuar tanto de forma aguda como crónica. De entre todas las anteriormente mencionadas, son de especial interés las aflatoxinas B1, B2, G1 y G2, que presentan una estructura derivada de bis-dihidro-furanocumarinas y se hallan fuertemente implicadas en la hepatitis aguda y en el desarrollo de hepatocarcinomas, entre otras toxicidades. La aflatoxina B1 es la más tóxica, considerándose uno de los principales factores de riesgo del cáncer hepático a nivel mundial). Estas cuatro aflatoxinas generan toxicidad a partir de los intermediarios metabólicos que se generan en su metabolización hepática, que da lugar otros metabolitos también tóxicos, que acaban presentes en sangre, orina y en la leche materna (*Turner et al., 2012*), como las aflatoxinas M1 y M2; y a la formación de aductos fuertemente oxidantes que son capaces de alterar la estructura del ADN celular, provocando mutaciones cancerosas en las células.

En este estudio, se ha evaluado la presencia de las aflatoxinas B1, B2, G1 y G2 en distintas variedades de arroz (considerado un alimento básico de la dieta común a nivel mundial). Para ello, se ha optimizado un método para la adecuada extracción y purificación de los analitos presentes en el arroz mediante el uso de columnas de inmunoafinidad; estas columnas permiten la retención selectiva de las aflatoxinas mediante su unión con anticuerpos específicos presentes en la matriz de la columna. Para ello se han optimizados las variables más importantes del método de extracción y purificación, tales como los solventes de extracción, el tipo de agitación, el tiempo de agitación y de centrifugación, los tipos de filtros usados, etc. Con las condiciones optimizadas se ha logrado una recuperación del 86% para la AFB1, del 90% para la AFB2, del 87% para la AFG1 y del 92% para la AFG2. El análisis de los compuestos se ha llevado a cabo mediante cromatografía líquida acoplada a detector de matriz de diodos y a un detector de espectrometría de masas (LC-DAD-MS).

El método optimizado se ha aplicado a una amplia variedad de arroces seleccionados en base a su diversa procedencia, variedad, técnicas de cultivo del mismo en cuanto a los tratamientos industriales efectuados en el cereal previo a su consumo. De este modo se ha podido comprobar si los arroces seleccionados exceden o no los límites establecidos por la normativa CE 1881/2006, que establece el contenido máximo de AFB1 en cereales en 2 ug/kg y el de la suma de las cuatro aflatoxinas en 4 ug/kg.

Referencias

Paul C. Turner, Brenna Flannery, Catherine Isitt, Mariyam Ali and James Pestka. "The role of biomarkers in evaluating human health concerns from fungal contaminants in food". *Nutrition Research Reviews* (2012), 25, 162–179.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por la Comunidad de Madrid a través del Convenio Plurianual con la Universidad Complutense en su línea Programa de Estímulo a la Investigación de Jóvenes Doctores (Referencia PR65/19-22432) y a través del programa AVANSECAL-II CM (Referencia S2018/BAA-4393). I. Romero Sánchez agradece su contrato predoctoral a la Universidad Complutense de Madrid.

ESTABILIDAD DE HIDRATOS DE METANO EN CONDICIONES MARINAS

S. Blázquez¹, C. Vega¹ y M. M. Conde²

¹ Departamento de Química Física I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid, España

² Departamento de Ingeniería Química Industrial y Medio Ambiente, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Universidad Politécnica de Madrid, 28006, Madrid, España
samuelbl@ucm.es

Los hidratos de metano son sólidos no estequiométricos formados a bajas temperaturas y presiones moderadas en el fondo marino en los que el agua forma una red cristalina que atrapa en su interior moléculas de metano. Estos hidratos generan gran interés debido a su potencial uso como fuente de energía y su presencia natural en el fondo marino [1].

En este trabajo se han realizado simulaciones utilizando la técnica de la dinámica molecular para calcular el descenso en la temperatura de triple coexistencia hidrato de metano-disolución acuosa de NaCl-metano gaseoso, para diferentes concentraciones de sal. Se ha utilizado el método de la coexistencia directa para determinar las temperaturas y presiones a las que los hidratos de metano son estables en condiciones marinas y a mayores concentraciones de cloruro sódico. El uso de simulaciones moleculares implica la necesidad de elegir correctamente modelos que describan todos los componentes presentes en el sistema. Para el agua se ha utilizado el modelo TIP4P/2005 [2], el cloruro sódico se ha descrito con un novedoso modelo [3] que utiliza el concepto de cargas escaladas para los iones (sodio y cloro tienen cargas +0,85 y -0,85 con este modelo) basándose en el hecho de que en una disolución acuosa se produce cierta transferencia de carga entre los iones y las moléculas de agua. Por último, el metano se ha descrito como un sitio de interacción simple Lennard-Jones. Finalmente se concluye que el desplazamiento de las temperaturas del punto de triple coexistencia (T_3) obtenido a diferentes concentraciones se encuentra en concordancia con los resultados experimentales y que el uso de cargas escaladas describe correctamente la disolución acuosa de cloruro sódico.

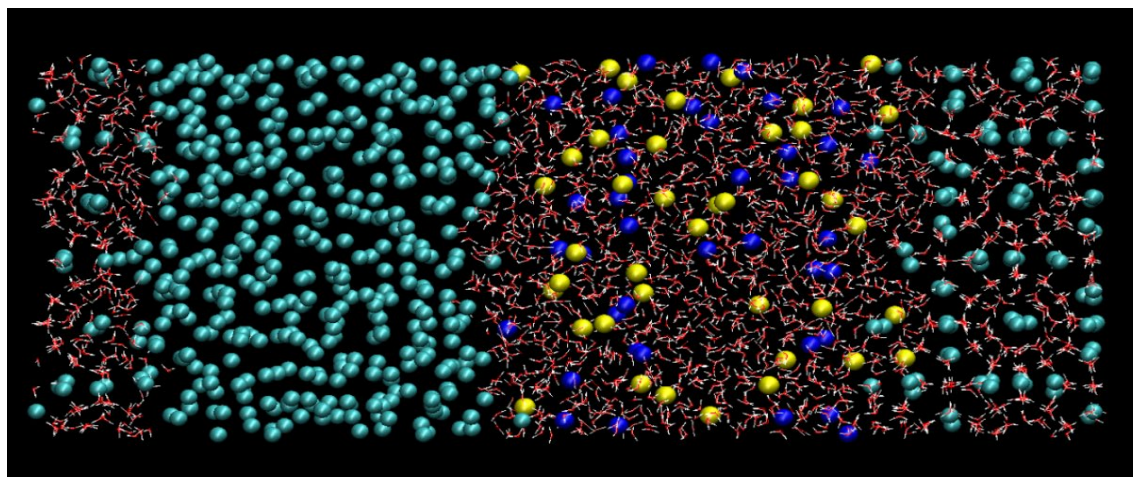


Figura 1. Vista frontal de la configuración inicial de la coexistencia directa sólido-líquido-gas formada por una fase sólida de hidrato de metano, una fase líquida de disolución salina y otra fase gas de metano.

Referencias

- [1] Sloan, E. D., Fundamental principles and applications of natural gas hydrates. *Nature* **426**, 353 (2003).
- [2] Abascal, J. L. F. & Vega, C., A general purpose model for the condensed phases of water: TIP4P/2005. *J. Chem. Phys.* **123**, 234505 (2005).
- [3] Zerón, I. M., Abascal, J. L. F. & Vega, C., A force field of Li^+ , Na^+ , K^+ , Mg^{2+} , Ca^{2+} , Cl^- , and SO_4^{2-} aqueous solution based on the TIP4P/2005 water model and scaled charges for the ions. *J. Chem. Phys.* **151**, 134504 (2019).

DETERMINACIÓN DE SELENIO Y MERCURIO EN LAS PROTEÍNAS SOLUBLES DE PESCADOS DE CONSUMO HABITUAL

T. Fernández-Bautista, B. Gómez-Gómez, R. Palacín-García, E. Gracia-Lor, M.T. Pérez-Corona, Y. Madrid

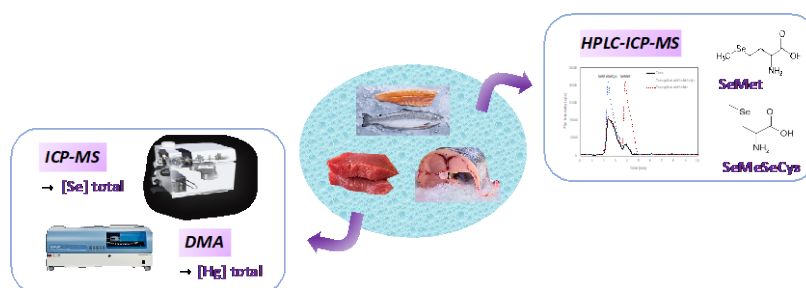
Departamento Química Analítica, Facultad Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avenida Complutense s/n, 28040, Madrid

tamarf02@ucm.es

Resumen

Los pescados son alimentos de gran consumo, por lo que conocer con profundidad qué elementos esenciales aporta o si se ven afectados por la presencia de algún compuesto tóxico es de gran relevancia para preservar la salud del consumidor. El selenio (Se) es un elemento traza considerado esencial, ya que participa en numerosas reacciones metabólicas en los seres vivos [1]. Además, puede provocar efectos beneficiosos por sus propiedades antioxidantes, asignándosele incluso un papel preventivo frente a ciertos cánceres o a enfermedades de carácter inmunológico, como el VIH. La principal fuente de obtención de selenio en humanos es a través de la dieta, sobre todo a través de la ingesta de pescado. De forma general, el selenio en los alimentos se puede encontrar en distintas formas químicas: Se(IV), Se(VI) o en forma de selenoaminoácidos como la selenometionina (SeMet), selenocisteína (SeCys) y la selenometilselenocisteína (SeMeSeCys), que dan lugar a las selenoproteínas. Su concentración y la forma química en la que se encuentre pueden afectar a su biodisponibilidad, acumulación y toxicidad, siendo las especies inorgánicas más tóxicas que las especies orgánicas [2]. Además de sus propiedades antioxidantes, el selenio puede tener una acción protectora frente a la toxicidad del mercurio. El mercurio (Hg) es un elemento con presencia medioambiental que es fácilmente bioacumulable por los peces, pudiendo estar presente en cantidades no deseadas en ciertos pescados, especialmente en los que se encuentran en el nivel más alto de la cadena trófica.

La matriz objeto de estudio es el músculo de pescado, que es la parte comestible del mismo. En concreto, se analizaron pescados de consumo habitual: atún, pez espada, salmón de piscifactoría, salmón salvaje... La determinación de Se mediante espectrometría de masas con plasma de acoplamiento inductivo (ICP-MS) y de Hg mediante el Analizador Directo de Mercurio (DMA) constataron que el atún y el pez espada son los pescados que presentan mayores concentraciones de ambos analitos, debido a procesos de bioacumulación. Por otra parte, una vez extraídas las proteínas solubles en Tris-HCl procedentes del músculo de los pescados, se llevó a cabo la especiación de selenio mediante cromatografía de intercambio aniónico acoplada a ICP-MS (HPLC-ICP-MS), previa hidrólisis enzimática utilizando la Proteasa XIV (aislada de *Streptomyces griseus*). Los resultados obtenidos evidenciaron la presencia de SeMeSeCys en todos los pescados, además de SeMet en el caso del atún.



Referencias

- [1] Heras et al., *Anal. Bioanal. Chem.*, 400 (2012), 1717–1727
- [2] Pedrero et al., *J. Anal. At. Spectrom.*, 24 (2009), 775–784

Agradecimientos

A la Comisión Española de Ciencia y Tecnología (CTQ2017-83569-C2-1-R), la Comunidad de Madrid y los programas FSE y FEDER (proyecto S2018/BAA-4393, AVANSECAL-II CM).

CARACTERIZACIÓN AVANZADA DE MATERIALES ELASTOMÉRICOS A TRAVÉS DE DIFERENTES MÉTODOS EXPERIMENTALES

F.M. Salamanca¹, A. González-Jiménez², Zenen Zepeda-Rodríguez¹, R. Navarro¹, J.L. Valentín¹

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP-CSIC). C/Juan de la Cierva 3, 28006 – Madrid

² Área de Ciencia e Ingeniería de Materiales, Universidad Rey Juan Carlos (URJC). C/Tulipán s/n, 28933 Móstoles, Madrid

fms@ictp.csic.es

La elasticidad en los materiales compuestos de caucho depende de los parámetros moleculares que definen la estructura de red. Los entrecruzamientos y los entrelazamientos tienen un efecto que ya se tiene en cuenta de diferentes formas en las diversas teorías de elasticidad. Las diferentes aproximaciones experimentales utilizadas para caracterizar estos parámetros son el ensayo de tracción uniaxial, los experimentos de hinchamiento y más recientemente los experimentos de doble coherencia cuántica en resonancia magnética nuclear de protones (¹H DQ-NMR, ver **Figura 1**) [1]. El análisis de cada uno de estos experimentos se basa en unas asunciones diferentes y aproximaciones experimentales únicas, haciendo difícil la combinación de los resultados de los diferentes experimentos.

El principal objetivo de este trabajo es unificar por primera vez estas aproximaciones experimentales bajo un único marco físico teórico tan independiente como sea posible de cada uno de los experimentos. Esto permitirá desarrollar una nueva metodología de análisis que posibilitará la combinación de estos experimentos para una cuantificación de los parámetros estructurales, tales como la densidad de entrecruzamientos y la densidad de entrelazamientos. Es más, esta nueva metodología permitirá estudiar el efecto de otros parámetros importantes como los defectos de red y la distribución espacial de los entrecruzamientos [2] (que no se han considerado en las actuales teorías de elasticidad) en las propiedades de los cauchos.

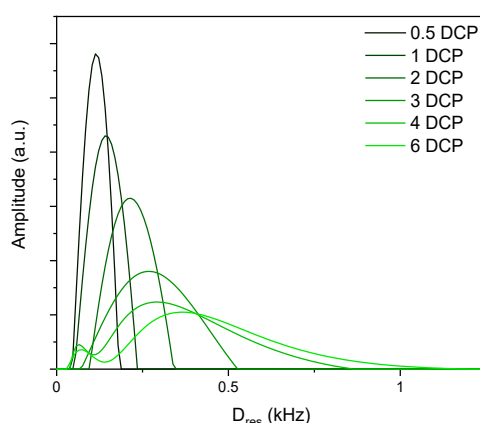


Figura 2. Distribuciones de acoplamiento dipolar residual entre protones.

Referencias

[1] J. L. Valentín, P. Posadas, A. Fernández-Torres, M. A. Malmierca, L. González, W. Chassé, and K. Saalwächter. Inhomogeneities and Chain Dynamics in Diene Rubbers Vulcanized with Different Cure Systems *Macromolecules* 2010, 43, 9, 4210–4222

[2] M. Lang. On the Elasticity of Polymer Model Networks Containing Finite Loops. *Macromolecules* 2019, 52, 16, 6266–6273

Agradecimientos

FMS agradece a la Comunidad de Madrid el contrato PEJ-2019-AI_IND-13942 dentro de la convocatoria Garantía Juvenil. Agradecimientos al proyecto 201960E124 del CSIC por la financiación.

ELECTROLITOS SÓLIDOS POLIMÉRICOS PARA BATERIAS DE Li, Na, Al o Zn PROCESADOS SIN DISOLVENTES.

Víctor Gregorio¹, Nuria García¹, Pilar Tiemblo¹.

¹ Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP-CSIC), calle Juan de la cierva 3, 28006, Madrid.
v.gregorio@ictp.csic.es

En la sociedad actual, donde cada día aumenta la demanda energética, la obtención de esta a través de fuentes de energía renovables y no contaminantes se ha convertido en una prioridad en la lucha contra el cambio climático. La creciente explotación de las fuentes de energía renovable conlleva la necesidad de desarrollar sistemas de almacenamiento energético más potentes, seguros y eficientes. De entre los dispositivos de almacenamiento energéticos más empleados, destacan las baterías electroquímicas.

Los electrolitos sólidos, nacen con el propósito de eliminar los problemas de seguridad de las baterías electroquímicas, a la vez que permiten el desarrollo de baterías más ligeras y flexibles. Existen diferentes tipos de electrolitos sólidos; cerámicos, poliméricos, geles y compuestos[1]. Los electrolitos poliméricos son, de entre todos, los que presentan una mayor versatilidad, ya que, además de presentar una gran tenacidad, pueden ser baratos, fáciles de procesar y de escalar. El tipo mejor conocido es el basado en polímeros capaces de complejar los iones metálicos y de permitir su transporte a lo largo de la cadena. El polímero más estudiado y empleado es el poli(óxido de etileno) (PEO). El gran hándicap de los electrolitos preparados con este polímero y sales (de Li o Na) es su baja conductividad iónica debida a la (relativamente) baja movilidad de las cadenas de PEO ($T_g \approx -40^\circ\text{C}$) y a la elevada fracción de PEO cristalino. Por ello, además de una sal del catión metálico correspondiente, se añaden diferentes disolventes, con el objetivo de disminuir la cristalinidad y aumentarla fase móvil en el electrolito final.

Generalmente los electrolitos poliméricos se procesan por colada, procedimiento en el cual es necesario el empleo de disolventes auxiliares, lo que presenta muchos inconvenientes, principalmente el sobrecoste que esto conlleva, además de que muchos de los disolventes empleados son contaminantes. En el grupo HEMPOL, se lleva tiempo trabajando para eliminar el uso de disolventes del procesado de polímeros[2], empleando procesos en fundido típicos de la industria de los plásticos, permitiendo fabricar electrolitos a escala industrial de forma sencilla. Por otro lado, en el diseño de electrolitos sólidos poliméricos el empleo de disolventes orgánicos, inflamables y poco estables electroquímicamente, ha dado paso a distintos líquidos iónicos, más seguros, aunque caros, y, más recientemente, a líquidos iónicos que son líquidos eutécticos profundos preparados a partir de componentes de bajo precio.

En este trabajo se lleva a cabo la gelificación en fundido, sin el empleo de disolventes auxiliares, de diferentes electrolitos líquidos basados en cationes de Li, Na, Al y Zn con pequeñas cantidades de poli(óxido de etileno). El resultado es la obtención de geles poliméricos elásticos y autorreparables, como se observa en la Figura 1, con propiedades mecánicas propias de un pseudo-sólido y conductividades iónicas en el mismo orden de magnitud que el electrolito líquido análogo.

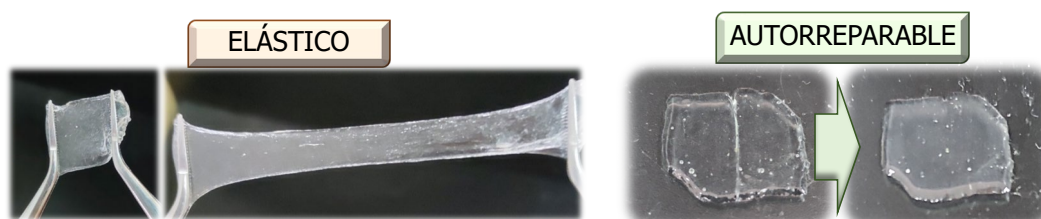


Figura 1: Propiedades elásticas y de autor reparación de los electrolitos poliméricos preparados.

Referencias

1. Zhao, Q.; Stalin, S.; Zhao, C.Z.; Archer, L.A. Designing solid-state electrolytes for safe, energy-dense batteries. *Nat. Rev. Mater.* **2020**, *5*, 229–252, doi:10.1038/s41578-019-0165-5.
2. Mejía, A.; García, N.; Guzmán, J.; Tiemblo, P. Extrusion processed polymer electrolytes based on poly(ethylene oxide) and modified sepiolite nanofibers: Effect of composition and filler nature on rheology and conductivity. *Electrochim. Acta* **2014**, *137*, 526–534, doi:10.1016/j.electacta.2014.06.032.

Agradecimientos

Los autores agradecen la financiación recibida del proyecto europeo SALBAGE (H2020-FETOPEN-1-2016-2017 G.A: 766581).

SÍNTESIS DE POLIURETANOS A PARTIR DERECLICLADO QUÍMICO DE PET

María Dolores de Dios Caputto, Rodrigo Navarro, Alejandra Rubio, Ángel Marcos-Fernández
Grupo Elastómeros, Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (CSIC), Juan de la Cierva, 3, 28006-Madrid
e-mail: mariad.dedios@ictp.csic.es

Actualmente, la implementación de un modelo de Economía Circular en lugar de un modelo de producción lineal parece ser la solución ideal para el problema del tratamiento y gestión de residuos plásticos^[1]. Una posible vía de actuación sería el reciclado de estos residuos, como en el caso del poli(etilentereftalato) (PET), el cuál destaca por sus excelentes propiedades térmicas y mecánicas y su bajo coste de producción. El reciclaje mecánico de PET está bastante desarrollado en la industria, pero su procedimiento implica la pérdida de propiedades del producto final en comparación con el PET obtenido mediante materia prima virgen; por otro lado, sus propiedades disminuyen notablemente después del segundo ciclo mecánico^[2]. Por el contrario, el reciclado químico presenta procedimientos versátiles y la posibilidad de obtener productos de alto valor añadido. Sin embargo, normalmente requiere condiciones drásticas de reacción (altas temperaturas, altas presiones, etc.) que aumentan el precio de producción, lo que conlleva a la pérdida de valor del producto y a su exclusión del ciclo de reciclado^[2].

Por estos motivos, el objetivo de este trabajo fue el reciclado químico del PET para la obtención de polioles, en condiciones suaves de reacción y con una alta versatilidad. Para ello, se emplearon diferentes catalizadores básicos y residuos de PET de diferente origen y pigmentación (monómero Bis (2-hidroxiethyl) tereftalato (BHET) procedente de la glicólisis del PET o PET molido de distinto origen). Además, el peso molecular y la composición química de cada poliol resultante se determinó mediante ¹H-RMN utilizando un procedimiento desarrollado por este grupo^[3]. La finalidad de estos polioles será la obtención de nuevos

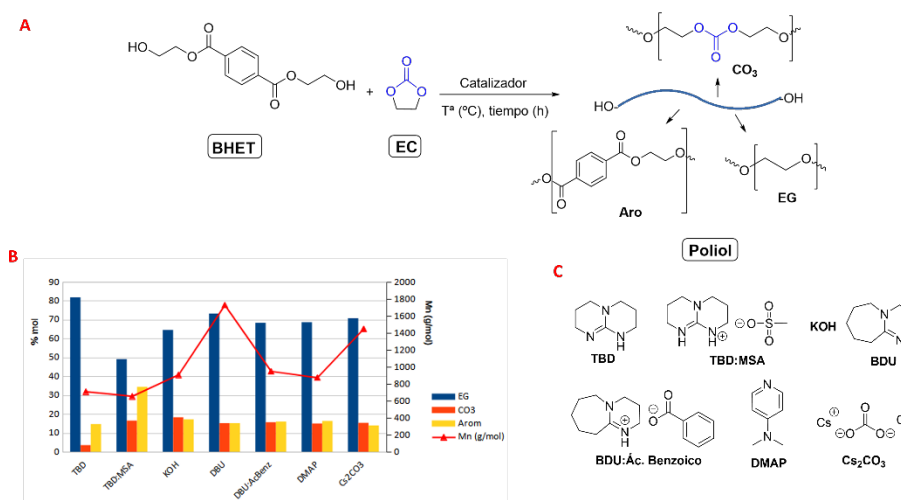


Figura: A) Esquema de síntesis de los polioles obtenidos a partir del BHET procedente de la glicólisis de PET; B) Composición química y peso molecular de los polioles obtenidos mediante el Reciclado Químico del BHET aplicando distintos catalizadores básicos; C) Estructura química de los catalizadores básicos empleados en la síntesis de polioles.

materiales de alto valor añadido mediante la síntesis de poliuretanos.

Los autores agradecen la financiación del proyecto al Ministerio de Ciencia e Innovación (RTI2018-096636-J-100, MAT2017-87204-R y PID2020-119047RB-100), y MDDC agradece al Consejo Superior de Investigaciones Científicas por la JAEINT_20_00798.

- [1] S. Huysman, J. De Schaepmeester, K. Ragaert, J. Dewulf, S. De Meester, Performance indicators for a circular economy: A case study on post-industrial plastic waste, *Resour. Conserv. Recycl.* 120 (2017) 46–54.
- [2] B. Shojaci, M. Abtahi, M. Najafi, Chemical recycling of PET: A stepping-stone toward sustainability, *Polym. Adv. Technol.* (2020) 1–27.
- [3] K. Espinoza García, R. Navarro, A. Ramírez-Hernández, Á. Marcos-Fernández, New routes to difunctional macroglycols using ethylene carbonate: Reaction with bis-(2-hydroxyethyl) terephthalate and degradation of poly(ethylene terephthalate), *Polym. Degrad. Stab.* 144 (2017) 195–206.

Elastómeros termoplásticos para deposición por material fundido

Autores. León-Calero, Marina^{1,2}, Ángel Marcos-Fernández¹, Juan Rodríguez Hernández¹

1. *Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP-CSIC).*

2. marinaleon92@gmail.com

La fabricación aditiva es una tecnología que se encuentra aún en desarrollo, y supone una gran oportunidad para la generación de diseños alternativos. Desde el punto de vista de los materiales, los polímeros se han convertido en un centro de interés para una amplia gama de aplicaciones. Sin embargo, dentro de los polímeros los desarrollos han ido encaminados al uso de termoplásticos con altas propiedades mecánicas, dejando de lado las propiedades elastoméricas [1].

Los TPEs (thermoplastic elastomers) son una mezcla de polímeros (termoplásticos o gomras) o copolímeros que consisten en segmentos duros y blandos lo que le proporcionan las propiedades elásticas que los caracterizan. Se pueden distinguir seis categorías de elastómeros termoplásticos (TPE-U, TPE-S, TPE-O, TPE-V, TPE-A y TPE-E) caracterizadas por su composición química y, por lo tanto, propiedades que ofrecen. Por otro lado, en función de la estructura química, los TPEs pueden clasificarse en dos grandes grupos dependiendo de la estrategia utilizada para la combinación de segmentos duros (termoplástico) y blandos (gomras). Son los conocidos como elastomeric blends y copolímeros de bloque. En el primer caso, las mezclas son aleaciones de matriz plástica y un material elastomérico. En el caso de los copolímeros de bloque, se forman cadenas de moléculas de varios segmentos (X-Y o X-Y-X), que mediante el enfriamiento se organizan en segmentos duros (X) y blandos (Y). Los ejemplos para X son PS, PE o PP; mientras que para Y son PDMS, PB, PI o PEP. La principal ventaja de estas estructuras es que el componente termoplástico puede romperse mediante el calentamiento (fundición) o disolventes, permitiendo que fluya. Una vez enfriado el material, se vuelven a formar enlaces físicos entre el componente termoplástico y elastómero, y el material se endurece. Esto proporciona grandes ventajas para la fabricación aditiva, donde mediante la fundición del material se le da una nueva forma final y adaptada a la aplicación.

Existen diversas tecnologías de fabricación aditiva para la obtención de piezas con propiedades elastoméricas. En este comunicado se busca dar una visión global de los materiales elastómeros comerciales disponibles para fabricación mediante deposición de filamento y grana.



Además, se destacarán los beneficios que puede aportar cada proceso y los problemas encontrados para su fabricación; así como las diversas aplicaciones [2-3] en función de la composición y aditivos, tales como fibras de refuerzo o conductivas.

Referencias

[1] Bakır A.A., Neshani R., Özerinç S. (2021) Mechanical Properties of 3D-Printed Elastomers Produced by Fused Deposition Modeling. In: Dave H.K., Davim J.P. (eds) Fused Deposition Modeling Based 3D Printing. Materials Forming, Machining and Tribology. Springer, Cham. https://doi.org/10.1007/978-3-030-68024-4_6.

[2] Bates, S. R., Farrow, I. R., & Trask, R. S. (2016, April). 3D printed elastic honeycombs with graded density for tailorable energy absorption. In Active and Passive Smart Structures and Integrated Systems 2016 (Vol. 9799, p. 979907). International Society for Optics and Photonics.

[3] Płatek, Paweł; Rajkowski, Kamil; Cieplak, Kamil; Sarzyński, Marcin; Małachowski, Jerzy; Woźniak, Ryszard; Janiszewski, Jacek. 2020. "Deformation Process of 3D Printed Structures Made from Flexible Material with Different Values of Relative Density" Polymers 12, no. 9: 2120. <https://doi.org/10.3390/polym12092120>

Agradecimientos

Los autores agradecen la financiación de esta investigación a la Subvenciones para el desarrollo de proyectos de doctorado industrial de la Comunidad de Madrid (IND2018/IND-9503).

MODIFICACIÓN DE GELES DE FIBRINA DERIVADOS DE PLASMA SANGUÍNEO HUMANO

Autores: **Raúl Sanz-Horta¹**, **Alberto Gallardo¹**, **Juan Rodríguez-Hernández¹**, **Diego Velasco²**,
Pablo Acedo², **Jose Luis Jorcano²**, **Helmut Reinecke¹** y **Carlos Elvira¹**

¹ *Institute of Polymer Science and Technology, Spanish National Research Council (ICTP-CSIC), Department of Applied Macromolecular Chemistry, Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid, Spain*

² *Department of Bioengineering and Aerospace Engineering, Universidad Carlos III de Madrid (UC3M), Spain*

r.sanzhorta@gmail.com

Durante los últimos años, se ha incrementado la demanda de órganos o tejidos tanto para injertos como trasplantes u otras intervenciones de índole quirúrgica. En concreto, ha habido un incremento en la demanda del desarrollo de sustitutos que imiten la piel humana, ya sea para las intervenciones mencionadas anteriormente por ejemplo, en el caso de intervenciones en unidades de grandes quemados, pero también en el testeo de nuevos fármacos y cosméticos.

En nuestro caso se están desarrollando equivalentes dermo-epidérmicos bicapa que contienen fibroblastos primarios humanos en la primera capa, y queratinocitos en la segunda capa más superficial, obtenidos a partir de biopsias. Para el desarrollo y síntesis de estos equivalentes dermo-epidérmicos, se hace uso de hidrogeles basados en materiales de origen natural como es el caso de la fibrina. El hidrogel de fibrina se obtiene a partir de plasma sanguíneo humano de donantes, el cual gelifica mediante la adición de CaCl_2 que desencadena la polimerización de la fibrina a partir de moléculas de fibrinógeno.

A pesar de las buenas propiedades a nivel biológico que presentan los hidrogeles de fibrina para el cultivo y desarrollo de las células en su interior, las bajas propiedades mecánicas, su rápida degradación y su tendencia a la contracción presentan dificultades en el desarrollo de los cultivos celulares a largo plazo y durante la manipulación en el laboratorio.

Es por ello, que en este trabajo se han sintetizado copolímeros funcionalizados para producir matrices mixtas que darán lugar a reacciones suaves con el fibrinógeno y demás proteínas presentes en el plasma, para formar a redes interpenetradas (IPNs). El objetivo de estas redes interpenetradas es dotar de una mayor estabilidad a los hidrogeles naturales de fibrina durante el cultivo aumentando sus propiedades mecánicas y disminuyendo su contracción, sin suprimir las propiedades biológicas aportadas por la fibrina.

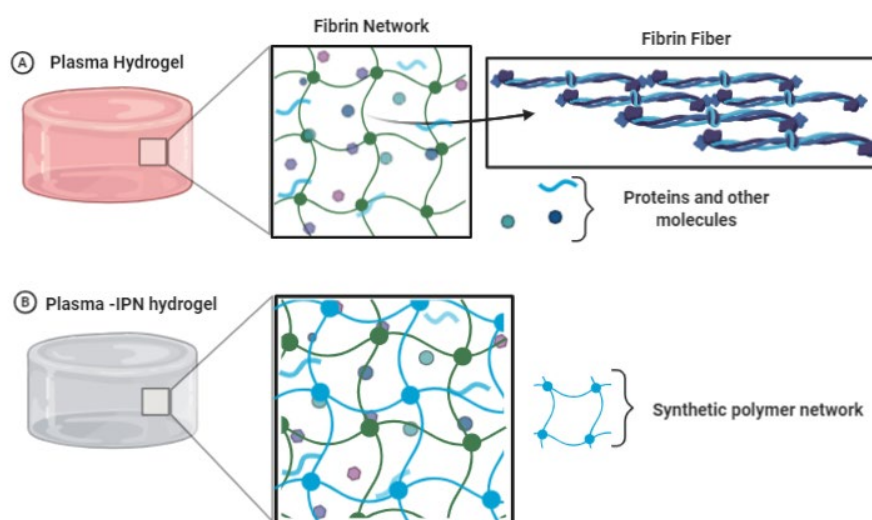


Figura 1. Esquema de la estructura de un hidrogel de fibrina derivado de plasma (A) y de una red interpenetrada (B).

Agradecimientos

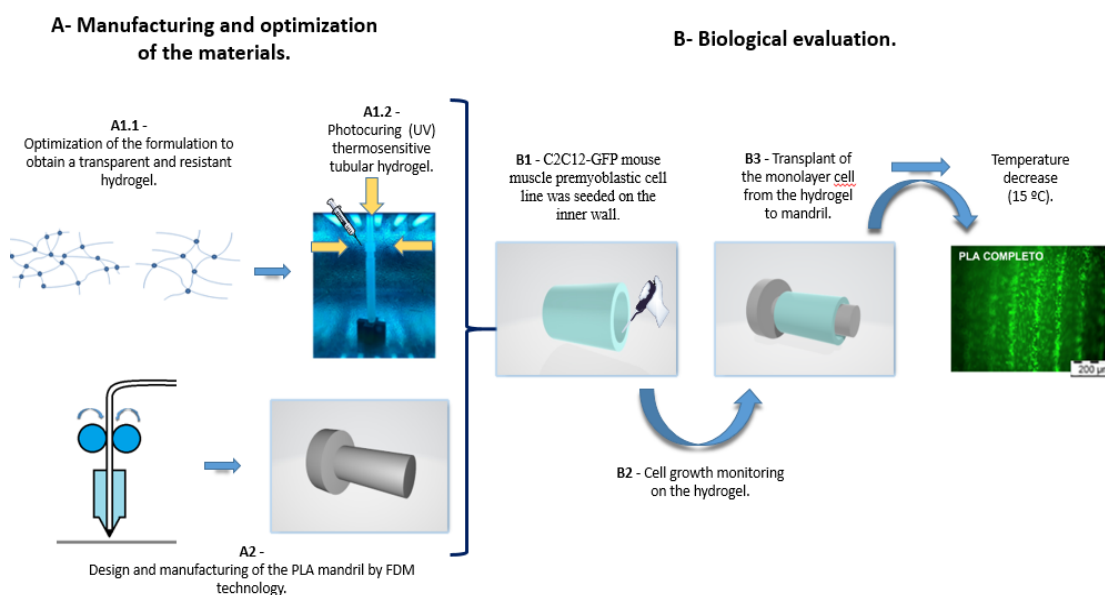
Los autores quieren agradecer la financiación al proyecto Biopieltec-CM S2018/BAA-4480.

CELL SHEET ENGINEERING OF TUBULAR STRUCTURES USING THERMOSENSITIVE HYDROGEL

Rubén García-Sobrino^{1,2}, Alberto Gallardo¹, Juan Rodríguez-Hernández¹, Enrique Martínez-Campos^{1,2,1}

¹*Polymer Functionalization Group. Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros-Consejo Superior de Investigaciones Científicas (ICTP-CSIC), Departamento de Química Macromolecular Aplicada, Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid, Spain.* ²*Tissue Engineering Group; Instituto Pluridisciplinar, Universidad Complutense de Madrid. Associated Unit to the ICTP-CSIC Polymer Functionalization Group. Paseo Juan XXIII, nº 1 28040 Madrid, Spain.*
rubengarciasobrino@gmail.com

Vinyl-caprolactam (VCL) based thermosensitive tubular hydrogels with a volume phase transition temperature, VPTT, around 35 °C, being at hydrophobic state at 37 °C and at hydrophilic state below the VPTT, have been prepared by combining two different crosslinkers, a di-methacrylate and a di-vinyl urea. The molar ratio between the two crosslinkers (for a global crosslinker molar percentage of 1.9) has shown to have a controversial influence on the properties of the hydrogel. The higher the amount of di-vinyl urea, the higher the transparency and the fragility of the material and the lower the extent of the thermosensitivity, that is, the swelling variation upon temperature decrease. Tubes prepared with a selected crosslinker ratio providing a compromise between transparency, thermosensitivity and maneuverability, have been evaluated as cell supports, supporting premyoblastic cell culture in their lumen. The cell growth has been monitored during nine days and eventually the cell sheet was detached with a controlled temperature decrease to a 3D-printed polylactic acid (PLA) collector, showing a new method to obtain tissue constructs with potential applications in vascular grafting field.



Acknowledgement

The authors gratefully acknowledge support from the Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). In the same way, it is necessary to express the appreciation for funding through to Garantía Juvenil contract of the Comunidad de Madrid. Equally, this work was financially supported by the Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (RTI2018-096328-B-I00).

MÉTODOS DE DESVULCANIZACIÓN DE CAUCHO OBTENIDO A PARTIR DE NEUMÁTICOS AL FINAL DE SU VIDA ÚTIL

Zenen Zepeda-Rodríguez, J.L. Valentín, F.M. Salamanca, R. Navarro, A. Fernández-Torres, R. Herrero.

Grupo Elastómeros, Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (CSIC), Juan de la Cierva, 3, 28006-Madrid
e-mail: zenen.zepeda90@gmail.com

En este estudio se realizó la desvulcanización y posterior caracterización de caucho reciclado de neumáticos al final de su vida útil, esto se hizo mediante dos métodos: i) Desvulcanización selectiva mediante tratamiento químico con tioles aplicado en caucho natural (NR-S) y a caucho natural cargado con negro de carbono (NR-S-CB) y ii) Desvulcanización aleatoria mediante tratamiento termo-mecánico de polvo de neumático fuera de uso (NFVU) y NFVU con betún como aditivo (RAR-X), en el que, el betún funcionó como un agente facilitador para el reciclado y procesamiento del NFVU.

El método de desvulcanización i) consistió en la inmersión a diferentes tiempos de muestras de NR-S y NR-S-CB en soluciones de propanotiol/hexilamina y hexanotiol/hexilamina y su posterior lavado en tolueno, recuperación y secado. Para el método de desvulcanización ii) el polvo de NFVU y el de RAR-X fueron sometidos a una desvulcanización termo-mecánica en un mezclador interno a alta temperatura y tiempo suficientes para garantizar la rotura de entrecruzamientos y cadenas poliméricas. Posteriormente a dicho polvo desvulcanizado se le incorporó un sistema de vulcanización basado en azufre para reprocesarlo y fabricar probetas para ensayos.

A través de la caracterización estructural de los compuestos de caucho natural, se pudieron establecer los límites de la desvulcanización selectiva, permitiendo establecer la correlación con la teoría de Horikx [1]. Dicha caracterización se realizó a todas las muestras mediante experimentos de resonancia magnética nuclear de doble coherencia cuántica (DQ-RMN) de protones, de esta técnica se obtuvo información de la red elastomérica, así como la cantidad y naturaleza de defectos, entrelazamientos y densidad de entrecruzamientos [2]. De este modo, fue posible determinar el efecto del tratamiento de desvulcanización sobre las muestras estudiadas, el cual fue mayormente selectivo para las probetas de NR-S y aleatorio para el polvo de NFVU. Por otra parte, en las muestras de NFVU desvulcanizado por métodos termo-mecánicos se determinó que presentan un grado menor de entrecruzamiento dado por la rotura de estos y de las cadenas elastoméricas [3]. Además, fue posible cuantificar el contenido de red elastomérica, cantidad de enlaces de polisulfuros y disulfuros y cantidad de defectos (parte extraíble, terminales de cadena, bucles, etc.) estableciendo la selectividad de estos procesos y el efecto del betún sobre la calidad de los compuestos.

Los autores agradecen la financiación del proyecto al Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2020-119047RB-100) y al consejo nacional de ciencia y tecnología (CONACYT-México) por la beca posdoctoral otorgada a ZZR para la realización de este trabajo.

-
- [1] S. Seghar, L. Asaro, N. Aït Hocine, Experimental Validation of the Horikx Theory to be Used in the Rubber Devulcanization Analysis, *J. Polym. Environ.* 27 (2019) 2318–2323. <https://doi.org/10.1007/s10924-019-01513-z>.
- [2] J.L. Valentín, R. Pérez-Aparicio, A. Fernandez-Torres, P. Posadas, R. Herrero, F.M. Salamanca, R. Navarro, L. Saiz-Rodríguez, ADVANCED CHARACTERIZATION OF RECYCLED RUBBER FROM END-OF-LIFE TIRES, *Rubber Chem. Technol.* 93 (2020) 683–703. <https://doi.org/10.5254/rct.20.79963>.
- [3] S. Saiwari, W.K. Dierkes, J.W.M. Noordermeer, Devulcanization of whole passenger car tire material, *KGK Kautschuk Gummi Kunststoffe.* 66 (2013) 20–25.

DIFERENTES ESTRATEGIAS BASADAS EN NANOMATERIALES MULTIFUNCIONALES DE SÍLICE PARA EL TRATAMIENTO DEL CÁNCER DE MAMA

Victoria García-Almodóvar¹, Diana Díaz-García¹, Karina Ovejero Paredes², Sanjiv Prashar¹, Marco Filice^{2,*}, Santiago Gómez-Ruiz^{1,*}

¹ Grupo COMET-NANO. Departamento de Biología y Geología, Física y Química inorgánica, ESCET, Universidad Rey Juan Carlos.

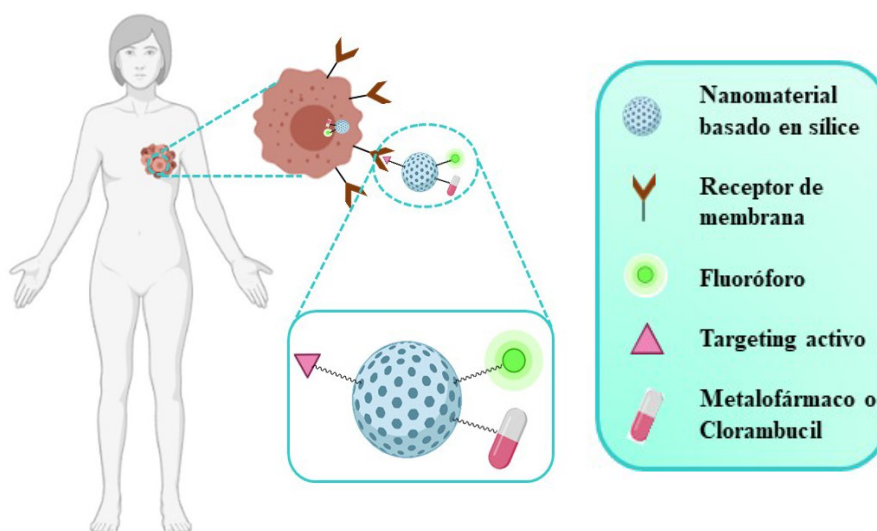
² Grupo Nanobiotechnology for Life Sciences, Departamento de Química en Ciencias Farmacéuticas, Universidad Complutense de Madrid.

victoria.galmodovar@urjc.es

Actualmente el cáncer de mama es el más común en las mujeres a nivel global, con una incidencia del 11.6%. Concretamente, el cáncer de mama triple negativo (TNBC) supone entre el 15-20%, con una gran tasa de mortalidad ya que presenta serias dificultades en su tratamiento al carecer de las dianas comunes que tienen las terapias hormonales actuales¹. Por ello, la búsqueda de un nuevo tratamiento para este tipo de cáncer supone uno de los principales retos de la comunidad científica.

En este contexto, el uso de nanomateriales teranósticos en el campo de la biomedicina, en concreto, los basados en óxido de silicio está en auge, ya que suponen una buena alternativa a los tratamientos convencionales porque poseen propiedades físico-químicas ventajosas como su amplia posibilidad de funcionalización, gran capacidad de carga, tamaño de partícula y poro modificable, biocompatibilidad, etc.²

El objetivo principal de nuestra investigación está centrado en el diseño de diferentes nanopartículas de sílice como: nanopartículas de sílice mesoporosa (MSN), *Santa Barbara Amorphous-15* (SBA-15) o partículas fibrosas de sílice (FSP). Y su posterior modificación multifuncional con diferentes compuestos de interés biológico contra este tipo de cáncer. Estos novedosos sistemas, pueden estar funcionalizados con derivados organometálicos basados en estaño o rutenio, como alternativa al cisplatino en la lucha contra el cáncer. Del mismo modo, pueden incorporarse fármacos aprobados por la FDA como el clorambucil o similares, para estudiar la capacidad sinérgica en los nanosistemas. Para aportar la capacidad de diagnóstico al material nanoestructurado, éste se funcionaliza además con un fluoróforo adecuado para su estudio tanto en *in vitro* como *in vivo*. De forma adicional, se incorporan moléculas *target*, como el ácido fólico, para aumentar la selectividad y acumulación tumoral.³ Esta comunicación presentará los resultados más recientes de nuestro grupo en este campo.



¹ Bray F, et al. *CA Cancer J Clin.* **2018**; 394:424-68. ² Llinàs MC, et al. *Afinidad LXXI.* 2014; 20:31-565. ³ Ovejero Paredes K, et al. *Cancers.* **2020**; 12: 187.

BIOMASS-DERIVED SORBITOL PRODUCTION: ALTERNATIVES COMPARISON AND IMPROVEMENT VIA LIFE CYCLE ASSESSMENT

Authors. **J. Blanco**¹, **J. Moreno**¹, **M. Linares**¹, **J. Iglesias**¹

¹ Chemical & Environmental Engineering Group, Universidad Rey Juan Carlos, Tulipán st., 28933 Móstoles, Madrid
jorge.blanco@urjc.es

In 2004, the National Renewable Energy Laboratory (NREL) published a document listing the top value-added chemicals from biomass [1]. This list included sorbitol as a promising molecule in this context. Sorbitol is a sugar polyol produced by the hydrogenation of glucose, which can be used for multiple applications in different commercial sectors. Besides, it is a precursor of several interesting molecules (e.g., isosorbide, lower alcohols, etc.). Although biomass-based processes represent an alternative to their fossil-based counterparts, improvements in overall sustainability are not easily achieved since these technologies might rely on energy-expensive procedures or resource-consuming raw materials. Life cycle assessment (LCA) is an effective tool to ensure environmental benefits and identify hotspots. Basic science results essential to precisely model process design from the beginning, thus permitting an iterative framework based on empirically guided decisions. This can be done by scale-up of laboratory results. Another common practice is to build a simulation using literature data (e.g., patent).

In this work, sorbitol production starting from corn starch has been evaluated using a cradle-to-gate LCA approach. The objective is to figure out the most impacting operations from an energy and environmental point of view and proposing ways for improving them. Two different alternatives to produce the starting glucose, enzymatic and acid hydrolysis of corn starch, were studied for the first step. In a second stage, a plant for glucose hydrogenation based on a continuous fixed-bed reactor loaded with Raney nickel has also been considered. Finally, the different stages were integrated into a global process to quantify total environmental impacts.

As shown in Figure 1, the analysis evidence that glucose involves an important relative contribution, higher than 60%, to all the environmental impact categories. Interestingly, including biogenic carbon for calculations makes that CO₂ fixed during corn cultivation almost compensates the emissions of the rest of the process steps, highlighting the importance of using autotrophic biomass as raw materials.

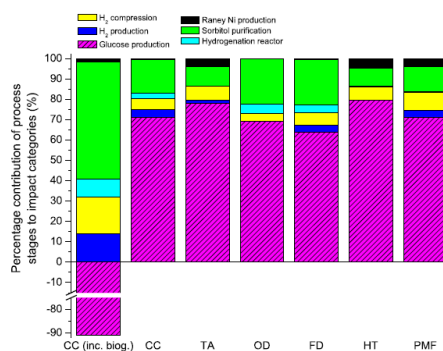


Figure 1. Relative contribution of process stages to environmental impact categories.

Finally, based on these LCA results, technological alternatives for improving sorbitol environmental performance have been proposed and detailed.

References

- [1] T. Werpy y G. Petersen, «Top Value Added Chemicals from Biomass: Volume I -- Results of Screening for Potential Candidates from Sugars and Synthesis Gas», DOE/GO-102004-1992, 15008859, ago. 2004. DOI: 10.2172/15008859.

Acknowledgements - Financial support from the Spanish Ministry of Science, Innovation and Universities (project RTI2018-094918-B-C4). J. Blanco kindly acknowledges the Universidad Rey Juan Carlos for the research contract (C1PREDOC2020-049).

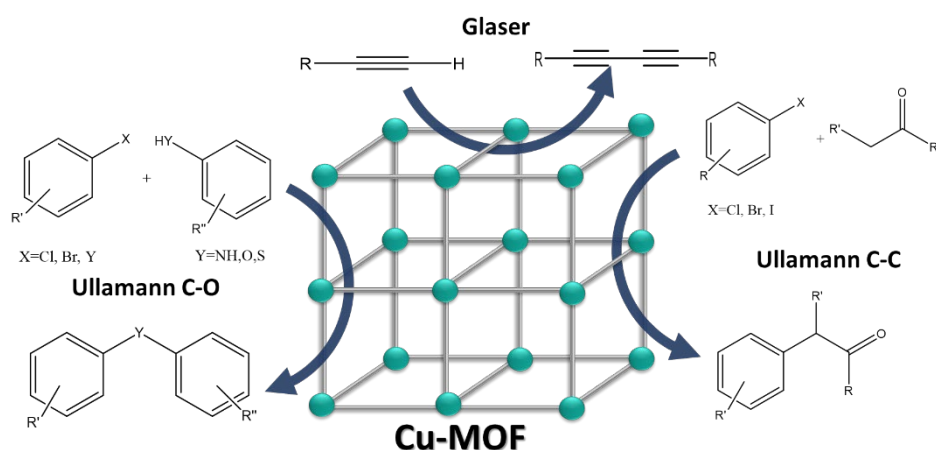
COPPER-MOFs FOR EFFICIENT C-C AND C-O COUPLING REACTIONS

Elena García-Rojas¹, Pedro Leo², Gisela Orcajo¹, Carmen Martos¹

¹Department of Chemical, Energy and Mechanical Technology, ²Department of Chemical and Environmental Technology. University Rey Juan Carlos, Tulipán s/n, Móstoles, 28933, Spain

elena.garcia.rojas@urjc.es

Homogeneous copper-based catalysts have emerged as cheaper alternative for coupling reactions over noble metal-contained catalysts. Copper-mediated coupling reactions for C-C and C-O bonds in complex organic molecules have elicited a great deal of interest from the pharmaceutical industry and present versatile possibilities in organic chemistry. A considerable number of publications reporting impressive applications in coupling reactions, such as Ullmann coupling, has been published and reviewed¹. In addition, Glaser coupling products are useful in areas of non-linear optics and organic conductors to build up polymers with biological activities². In any case, these processes could improve their sustainability and efficiency with the use of heterogeneous catalysts since they would provide several advantages like easy-handling, reusability and facile separation from the organic products³. Therefore, the development of efficient heterogeneous copper catalysts undoubtedly represents a niche of opportunity.



Metal Organic Frameworks (MOFs) are porous materials with a great diversity in chemical and physical properties that make them interesting for heterogeneous catalysis in organic chemistry and can be implemented in multigram scale and industrial processes. These materials provide a widespread platform of tunable hybrid inorganic-organic frameworks for the inclusion of specific metals with different coordination environments and functional groups in the organic linkers.

The aim of this work is to assess the catalytic activity of different copper-based MOF, including some developed in our research group for the first time, like Cu-MOF-74 and URJC-1. These MOFs have been carefully selected to study the effect of their organic functionalities on the yield of the reactions, so the best physicochemical MOFs characteristics for these catalytic systems were found out. They have been also compared to homogeneous copper catalysts in terms of conversion and selectivity to desired products. In addition, catalyst stability and reusability were studied over several reaction cycles.

Usa esta plantilla para mandar el resumen de investigación escrito en castellano o inglés.

REFEREENCES:

1. Corbet J-P, Mignani G. Chem Rev. 2006;106(7):2651-2710.
2. Kuhn P, Alix A, Kumarraja M, Louis B, Pale P, Sommer J. European J Org Chem. 2009;(3):423-429.
3. Drake T, Ji P, Lin W. Acc Chem Res. 2018;51(9):2129-2138.

DETERMINACIÓN DE DIAGRAMAS DE FASE SÓLIDO-LÍQUIDO COMBINANDO CALORIMETRÍA DIFERENCIAL DE BARRIDO E INTEGRACIÓN NUMÉRICA

Autores. Igor de las Heras¹, B. Coto¹, J. Dufour^{1,2}

¹ *Departamento de Tecnología Química, Energética y Mecánica, Universidad Rey Juan Carlos, Madrid, España*

² *Unidad de Análisis de Sistemas, IMDEA, Madrid, España*

igor.heras@urjc.es

Los equilibrios sólido-líquido (S-L) son datos de ciencia básica de compuestos puros y mezclas, necesarios en diversas aplicaciones industriales [1-3] como las aleaciones metálicas, el almacenamiento térmico de energía, el aseguramiento de flujo en fracciones petrolíferas, etc. Los diagramas de fase S-L son la manera de representar estos equilibrios y poder así, observar el comportamiento de fase. Éstos, son tradicionalmente determinados mediante calorimetría diferencial de barrido (CDB).

La CDB es una técnica termoanalítica que mide la cantidad de energía que una muestra absorbe o expulsa. En una mezcla binaria de comportamiento eutéctico, en la que ocurre un cambio de fase de fusión, el termograma muestra dos picos, a partir de los cuales se obtienen dos temperaturas de transición de fase, la de la mezcla a composición eutéctica y la de uno de los compuestos puro. En la figura 1.a) se puede observar un termograma en el que ocurre la fusión de una mezcla binaria.

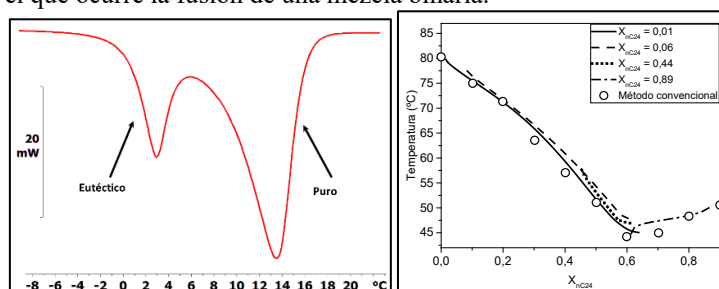


Figura 1. a) Termograma de CDB en calentamiento de una mezcla binaria. b) Diagrama S-L determinado por método experimental y por el propuesto.

Para poder obtener un diagrama S-L de calidad, hay que realizar entre 5 y 20 análisis de CDB, lo que requiere de una inversión de tiempo, energía, reactivos y dinero.

Este trabajo muestra el desarrollo de un método de determinación de los diagramas de equilibrio S-L, que aúna, la técnica de CDB y la integración numérica. La relación directa entre la cantidad de energía absorbida por una muestra y, la masa fundida de ella, teniendo en cuenta otros parámetros, permite calcular la masa fundida en cada punto del análisis, así como la composición de la fase líquida de la muestra, obteniendo la curva que representa el diagrama de equilibrio S-L. En la figura 1.b) se puede observar un diagrama de fase S-L del sistema Naftaleno/Tetracosano, obtenido por el método convencional y, el propuesto en el presente trabajo. Este método puede determinar, de manera rigurosa, el diagrama de equilibrio S-L utilizando dos análisis de CDB. Por lo tanto, este método permite disminuir el uso de recursos y reducir el tiempo dedicado a la experimentación, como mínimo, en un 50%

Referencias

- [1] M.C. Costa, L.A.D. Boros, J.A.P. Coutinho, M.A. Krähenbühl, A.J.A. Meirelles, Low-temperature behavior of biodiesel: Solid-liquid phase diagrams of binary mixtures composed of fatty acid methyl esters, *Energy and Fuels*. 25 (2011) 3244–3250. <https://doi.org/10.1021/ef2004199>.
- [2] D. Mondieig, F. Rajabalee, V. Metivaud, H.A.J. Oonk, M.A. Cuevas-Diarte, n-Alkane Binary Molecular Alloys, *Chem. Mater.* 16 (2004) 786–798. <https://doi.org/10.1021/cm031169p>.
- [3] G. Alva, X. Huang, L. Liu, G. Fang, Synthesis and characterization of microencapsulated myristic acid–palmitic acid eutectic mixture as phase change material for thermal energy storage, *Appl. Energy*. 203 (2017) 677–685. <https://doi.org/10.1016/j.apenergy.2017.06.082>.

EFFECTO DE LA INCORPORACIÓN DE CeO₂ EN EL REFORMADO OXIDATIVO DE ÁCIDO ACÉTICO

A. Morales*, A. Carrero, A.J. Vizcaíno, J.A. Calles, P.J. Megía

Universidad Rey Juan Carlos (Departamento de Tecnología Química y Energética), Móstoles (Madrid), España

(*) anabel.morales@urjc.es

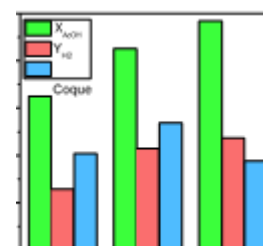
En las últimas décadas, el uso masivo de combustibles fósiles ha provocado graves problemas medioambientales debido a los productos que se generan en su combustión. Para solventarlos se trabaja en la búsqueda de alternativas sostenibles como es el caso del hidrógeno, que se trata de un vector energético limpio que solo genera agua y calor en su combustión. Una de las vías más atractivas para la producción de H₂ verde es la pirolisis de biomasa que produce bioaceite cuya fracción acuosa puede revalorizarse mediante un proceso de reformado catalítico. En ese sentido, el reformado oxidativo con vapor ofrece la ventaja frente al reformado con vapor de reducir las necesidades energéticas del proceso debido al carácter exotérmico de la oxidación parcial de hidrocarburos y compuestos oxigenados [1]. La ecuación general que representa este proceso es la siguiente: $C_nH_mO_k + pO_2 + (2n - k - 2p)H_2O \rightarrow nCO_2 + (2n + m_2 - k - 2p)H_2$

En el reformado oxidativo, es crucial el empleo de catalizadores que minimicen los procesos de desactivación siendo el CeO₂ un buen soporte ya que mejora la movilidad de oxígeno [2]. Debido a la complejidad que presenta la fase acuosa del bioaceite, muchos autores escogen como alimento compuestos modelo presentes en alta concentración. Entre ellos, se encuentra el ácido acético que suele suponer en torno al 20% p/p en dichas fracciones acuosas. Por todo lo mencionado, el objeto de este trabajo es la síntesis de nuevos catalizadores soportados o modificados con Ce (Ni/CeO₂, Ni/CeO₂-mesoporoso y Ni/CeO₂-SBA15) para el reformado oxidativo de ácido acético.

Los soportes empleados para la síntesis de catalizadores fueron (i) CeO₂ comercial; (ii) SBA-15 modificado con Ce (10% p/p) mediante impregnación a humedad incipiente; y (iii) CeO₂ mesoporoso obtenido por el método de nanocasting [3]. La fase activa Ni (7% p/p) se incorporó mediante el método de impregnación a humedad incipiente. Los catalizadores se caracterizaron por TGA, ICP-AES, DRX, H₂-TPR y adsorción de N₂. Las reacciones fueron realizadas en un lecho fijo en una unidad Microactivity-Pro a 500°C y presión atmosférica. Previo a la reacción, los catalizadores se redujeron en corriente de H₂ acorde a los resultados obtenidos en el análisis H₂-TPR. Las condiciones de reacción fueron las siguientes: GHSV ~ 1000 h⁻¹; WHSV = 30,1 h⁻¹, relación molar H₂O/C = 2 y relación molar O₂/AcOH = 0,075.

El catalizador Ni/CeO₂-SBA-15 exhibió los mayores valores de propiedades texturales (SBET = 430 m²/g y Dp = 7,3 nm), seguido del catalizador Ni/CeO₂-m (SBET = 110 m²/g y Dp = 7,3 nm). En DRX, los catalizadores Ni/CeO₂-SBA-15 y Ni/CeO₂-m revelaron una mayor dispersión de las partículas de níquel con tamaños de cristales de NiO alrededor de los 12 nm.

Respecto a los ensayos catalíticos, como se muestra en la figura, el catalizador Ni/CeO₂-m fue el más prometedor al presentar una mayor actividad catalítica. Además, este catalizador reveló una mayor estabilidad que el Ni/CeO₂-SBA-15 debido al mayor contenido en Ce que presenta permitiendo una mayor movilidad del oxígeno. El catalizador no estructurado Ni/CeO₂ mostró los peores resultados catalíticos dada la mala dispersión de la fase activa en el catalizador.



Referencias

- [1] Greluk, M., Slowik, G., Rotko, M., & Machocki, A. (2016). Steam reforming and oxidative steam reforming of ethanol over PtKCo/CeO₂ catalyst. *Fuel*, 183, 518-530.
- [2] Rodríguez, C., Moreno, S., & Molina, R. (2019). Oxygen mobility and its relationship with the oxidative steam reforming of ethanol (OSRE). *Applied Surface Science*, 485, 293-303.
- [3] Martínez-Díaz, D., del Monte, D. M., García-Rojas, E., Alique, D., Calles, J. A., & Sanz, R. (2021). Comprehensive permeation analysis and mechanical resistance of electroless pore-plated Pd-membranes with ordered mesoporous ceria as intermediate layer. *Separation and Purification Technology*, 258, 118066.

Agradecimientos

Este trabajo se ha realizado con el apoyo financiero de la Comunidad de Madrid (Proyecto S2018/EMT-4344) y del Ministerio de Economía y Competitividad (Proyecto ENE2017-83696-R).

FOTODEGRADACIÓN DE CONTAMINANTES EMERGENTES EN AGUAS

Autores. Miriam Abán¹

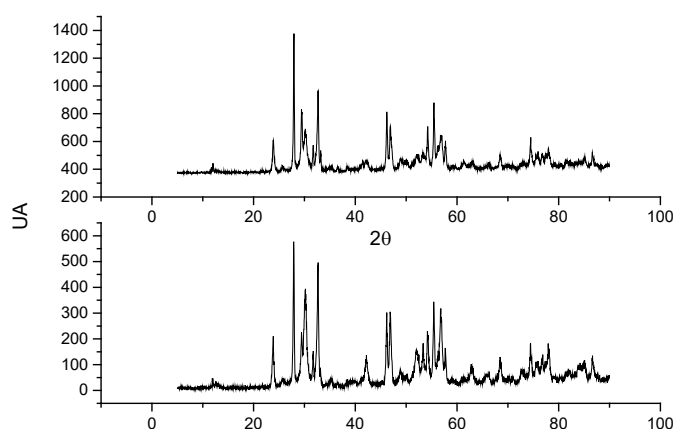
Yolanda Pérez^{1,2}, Josefa Ortiz-Bustos¹, Helena Pérez del Pulgar¹, Isabel del Hierro¹.

¹Departamento de Biología y Geología, Física y Química Inorgánica, Universidad Rey Juan Carlos, 28933, Móstoles, C/ Tulipán s/n 28933 Móstoles (Madrid)

²Advanced Porous Materials Unit, IMDEA Energy, Av. Ramón de la Sagra 3, 28935, Móstoles, Madrid, Spain
m.aban.2017@alumnos.urjc.es

La elevada demanda de recursos hídricos se ha convertido en un problema en la actualidad, por ello el tratamiento de las aguas residuales es una necesidad crucial para la sociedad. Los contaminantes emergentes son contaminantes desconocidos cuya presencia en el medio ambiente puede no ser reciente, pero sí la preocupación por el efecto que su presencia puede tener en el medio ambiente y la salud pública. Son especialmente problemáticos ya que las técnicas de eliminación convencionales no son capaces de retirarlos de las aguas. Por ello se han desarrollado nuevas técnicas de descontaminación entre la que destaca la fotocatalisis heterogénea, basada en la presencia de un material semiconductor permite degradar y eliminar compuestos de diferente naturaleza en presencia de la luz (ultravioleta y visible).

En este trabajo se han diseñado y sintetizado diversos fotocatalizadores basados en la fase tetragonal del óxido de bismuto ($\beta\text{-Bi}_2\text{O}_3$), que es la fase activa, con la presencia del carbonato de bismuto ($\text{Bi}_2\text{O}_2\text{CO}_3$) con el que forma un composite. También se ha estudiado el efecto de la adición del hidróxido de colina en los materiales y su actividad como fotocatalizadores. Los materiales sintetizados se han caracterizado usando diversas técnicas fisicoquímicas. Además, se ha evaluado su actividad fotocatalítica para la degradación de dos fármacos sulfametoxazol y ciprofloxacina.



Referencias:

- Drache, M., Roussel, P., & Wignacourt, J. (2007). Structures and oxide mobility in Bi– Ln– O materials: heritage of Bi_2O_3 . *Chemical Reviews*, 107(1), 80-96.
- Hao, Y., Deng, Z., Zhao, Z., & Song, X. (2020). A facile synthesis of a highly efficient $\beta\text{-Bi}_2\text{O}_3/\text{Bi}_2\text{O}_2\text{CO}_3$ heterojunction with enhanced photocatalytic NO oxidation under visible light. *New Journal of Chemistry*, 44(26), 10989-10993.
- Zhou, H., Zhong, S., Shen, M., & Yao, Y. (2019). Composite soft template-assisted construction of a flower-like $\beta\text{-Bi}_2\text{O}_3/\text{Bi}_2\text{O}_2\text{CO}_3$ heterojunction photocatalyst for the enhanced simulated sunlight photocatalytic degradation of tetracycline. *Ceramics International*, 45(12), 15036-15047.

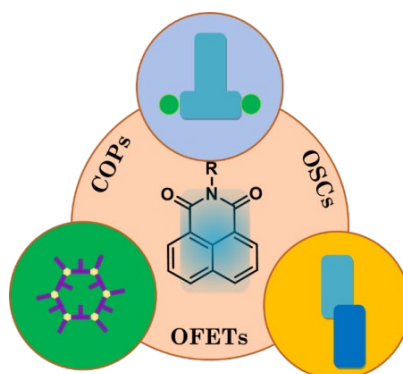
SEMICONDUCTORES ORGÁNICOS BASADOS EN 1,8-NAFTALIMIDA. DE MOLÉCULAS A MATERIALES.

Matías-Jesús Alonso Navarro^{1,2}, M. Mar Ramos², José L. Segura¹.

¹Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemistry, Complutense University of Madrid, Madrid 28040, Spain.

²Chemical and Environmental Technology Department, Rey Juan Carlos University, Móstoles, Madrid 28933, Spain.

E-mail: matiasjesus.alonso@urjc.es



En esta comunicación se describe el diseño, síntesis y caracterización de una nueva familia de semiconductores orgánicos basados en ensamblajes moleculares derivados de unidades electroactivas de tipo 1,8-naftalimida.

Estos derivados electroactivos han sido combinados con diferentes unidades de tipo dador o de tipo aceptor para la formación de estructuras planas y conjugadas mediante anillos conectores, en todos los casos, con una gran rigidez. Estos nuevos materiales π conjugados, debido al control preciso de la estructura química y de su topología de orbitales moleculares, poseen unas grandes propiedades de absorción, incluso llegando al infrarrojo cercano para algunos derivados, así como unos valores de potenciales adecuados para su uso como capa activa en la formación de dispositivos (opto)electrónicos. [1,2]

Además, estos sistemas dador-aceptor basado en unidades de oligotiofeno-naftalimida se han utilizado, por primera vez, en la formación de nuevos sistemas poliméricos con una conjugación extendida, actuando como fotocatalizador heterogéneo en la degradación de contaminantes emergentes en agua. [3]

Referencias

- [1] M. J. Alonso-Navarro, A. Harbuzaru, P. de Echegaray, I. Arrechea-Marcos, A. Harillo-Baños, A. de la Peña, M. M. Ramos, J. T. López Navarrete, M. Campoy-Quiles, R. Ponce Ortiz and J. L. Segura, *J. Mater. Chem. C*, **2020**, 8, 15277-15289.
- [2] M. J. Alonso-Navarro, A. Harbuzaru, M. Martínez, P. Pérez Camero, J. Teodomiro López Navarrete, M. M. Ramos, R. Ponce Ortiz, J. L. Segura, *J. Mater. Chem. C*, **2021**, 9, 7936-7949.
- [3] M. J. Alonso-Navarro, J. Barrio, S. Royuela, N. Karjule, M. M. Ramos, J. I. Martínez, M. Shalom and J. L. Segura, *RSC Advances*, **2021**, 11, 2701-2705.

Agradecimientos

El trabajo realizado ha sido financiado a través de los proyectos de investigación MAT2016-77608-C3-2-P del Ministerio de Economía y Competitividad (MINECO) y el proyecto de investigación PID2019-106268GB-C33 del Ministerio de Ciencia e Innovación (MICINN). Además, MJAL agradece a la Universidad Rey Juan Carlos el contrato predoctoral con el que se ha llevado a cabo esta investigación.

TRANSPORTADORES DE FÁRMACOS BASADOS EN COMPUESTOS DE DIRRUTENIO

I. Coloma¹, M. Cortijo¹, B. Desvoves², C. Gutiérrez², A. Terán¹ y S. Herrero¹

¹Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, España

²Centro de Biología Molecular Severo Ochoa, CSIC-UAM, 28049 Madrid, España
 iscoloma@ucm.es

En un trabajo reciente del grupo de investigación, se han preparado distintos carboxilatotris(formamidinato)dirrutenio complejos con estructura tipo *paddlewheel*, que incluyen en su estructura una hormona vegetal (auxina), a modo de carboxilato puente (ver figura 1). Se han realizado estudios de liberación *in vivo* de estas fitohormonas de los complejos en plantas transgénicas de *Arabidopsis thaliana* en distintas condiciones de pH. Estos estudios han demostrado que los complejos son prácticamente inertes a pH fisiológico, sin embargo, en un medio ligeramente ácido sí se liberan las auxinas [1]. Con estos resultados se ha concluido que este tipo de complejos podrían emplearse como transportadores de fármacos anticancerígenos funcionalizados con un grupo carboxilato, ya que los tumores sólidos presentan una ligera acidosis extracelular, pudiendo liberar el fármaco de manera selectiva en el tejido tumoral.

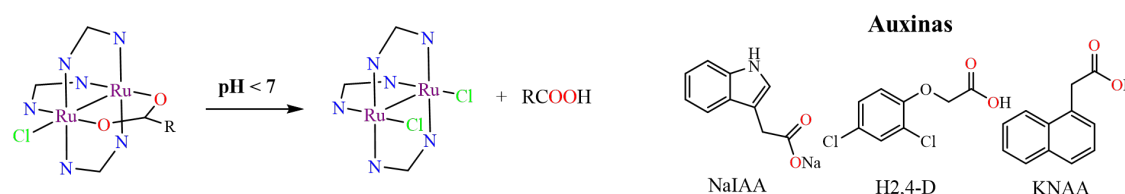


Figura 1. Esquema de liberación de las auxinas de los complejos de dirrutenio (izquierda); estructura de las auxinas empleadas en este trabajo (derecha).

Una vez realizada con éxito la prueba de concepto, se ha seleccionado el 5-fluorouracilo como fármaco para coordinar a los complejos de dirrutenio. Esta especie presenta una gran actividad anticancerígena, pero una elevada toxicidad, por lo que es crucial la selectividad a la hora de liberar el fármaco para no dañar los tejidos sanos. Para poder llevar a cabo la estrategia planteada ha sido necesario funcionalizar el 5-fluorouracilo con un ácido carboxílico antes de proceder a la síntesis del complejo (ver figura 2). Los estudios de liberación del fármaco y su selectividad se realizarán próximamente en células de mamíferos.

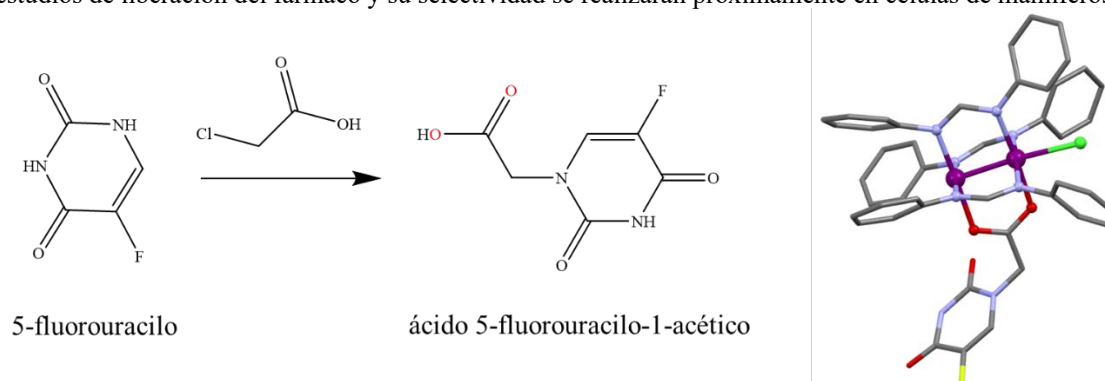


Figura 2. Síntesis del ácido 5-fluorouracilo-1-acético (izquierda); simplificación de la estructura cristalina del complejo de dirrutenio con el 5-fluorouracilo-1-acetato (derecha).

Referencias

[1] Coloma, I.; Cortijo, M.; Fernández-Sánchez, I.; Perles, J.; Priego, J. L.; Gutiérrez, C.; Jiménez-Aparicio, R.; Desvoves, B.; Herrero, S. pH- and Time-Dependent Release of Phytohormones from Diruthenium Complexes. *Inorg. Chem.* **2020**, *59*, 7779–7788.

DISEÑO DE MATERIALES HÍBRIDOS CERÁMICOS-POLIMÉRICOS EN ALEACIONES DE MAGNESIO PARA IMPLANTES ORTOPÉDICOS

L. Moreno¹, M. Mohedano¹, R. Arrabal¹, J. Rodríguez-Hernández², E. Matykina¹

¹ Departamento de Ingeniería Química y de Materiales, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid, Spain

² Funcionalización de Polímeros FUPOL. Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros.*

Laramo01@ucm.es

En las últimas décadas los implantes ortopédicos biodegradables han tenido un gran interés debido a que se puede evitar una segunda intervención tras el proceso de reconstrucción del hueso. Dentro de los materiales más empleados en este campo, las aleaciones de magnesio son de gran interés debido a que interviene en numerosas reacciones del metabolismo, es ligero, y presenta propiedades mecánicas muy parecidas a las del hueso, pero su alta velocidad de degradación dirige al implante a su prematuro fallo. En este proyecto de tesis, fueron diseñados materiales híbridos jerárquicos con el objetivo de reducir la velocidad de degradación de las aleaciones de magnesio. Los recubrimientos están constituidos por un recubrimiento interno poroso cerámico $\sim 10 \mu\text{m}$ de MgO , el cual está constituido por los principales componentes del hueso, como es el calcio, fósforo y silicio, fabricado por el método de la oxidación electrolítica por plasma (OEP). A su vez, hay una capa externa porosa polimérica de $\sim 40 \mu\text{m}$ de ácido poliláctico (PLA) o policaprolactona (PCL), fabricados por la combinación de dos métodos, Breath Figures y Dip Coating. Ambos materiales poliméricos facilitan la adhesión celular y la vascularización del tejido durante el proceso de regeneración ósea, además de proporcionar una protección adicional contra la corrosión. La morfología/composición superficial, la rugosidad, la microestructura y la porosidad del recubrimiento híbrido desarrollado se evaluaron mediante SEM/EDS, XRD, perfilometría óptica y análisis de imágenes. El comportamiento frente a la corrosión del material base y de los recubrimientos se evaluaron mediante mediciones de evolución de hidrógeno durante 2 semanas de inmersión en α -MEM inorgánico a 37°C y pH 7,4 bajo un flujo de CO_2 regulado. Los recubrimientos desarrollados se consideran candidatos adecuados para su posterior funcionalización mediante la incorporación de fármacos antiinflamatorios y/o antibióticos.

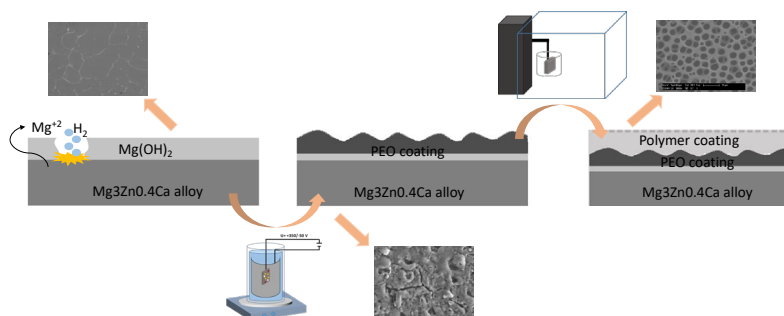


Figura 2. Esquema de las etapas llevadas a cabo para obtener los materiales híbridos en aleaciones de Mg para implantes.

Agradecimientos

Agradezco a mis directores de tesis, Endzhe Matykina y Juan Rodríguez Hernández por darme la oportunidad de poder llevar a cabo este proyecto en un campo tan multidisciplinar como son los materiales. También agradezco a Adímat por financiar este proyecto.

DEVELOPMENT OF A SPE-GC-MS METHOD FOR DETERMINING THE MOST CONSUMED NSAIDs IN WASTEWATER

Rodrigo de Miguel-Salado, Emma Gracia-Lor, Jon Sanz-Landaluze

Analytical Chemistry department of Chemical Sciences Faculty in Complutense University of Madrid.
rodemi01@ucm.es

The aim of work is to analyze the impact and the daily intake of new emergent pollutants, specifically NSAIDs in wastewaters via GC-MS technique. Due to its increasing consumption¹, ibuprofen, clofibric acid, salicylic acid, acetylsalicylic acid, paracetamol, naproxen, and diclofenac were chosen to be potential analytes.

Chromatographic analysis was carried out by using an Agilent GC instrument Mod. 7890A Series (Agilent Technologies, Madrid, Spain) equipped with a HP 7683B Series autoinjector and a mass spectrometry HP 5975C VL MSD detector (Agilent Technologies S.A., Madrid, Spain) operated by a ChemStation computer software (Agilent Technologies SA, Madrid, Spain). The GC system was equipped with a polydimethylsiloxan (95 %) cross-linked ZB-5 capillary column (30 m × 0.25 mm I.D., 0.25- μ m film thickness) from Phenomenex (Madrid, Spain), using Helium as carrier gas. The oven temperature was held at 70 °C for 1 min, and then, a temperature gradient was applied at a rate of 17 °C/min to 120 °C and increased at a rate of 5 °C/min to 200 °C and a third increase to 280 °C at 20 °C/min maintaining up to 3 min at 280 °C temperature. Each chromatogram required 26.94 min. For the mass spectrometer conditions, ion source temperatures were of 230 and 150 °C, for the quadrupole and 290 °C for the transfer line; the scan range was from 50 to 550 m/z and the solvent delay time was 10 min.

Given that the selected analytes are not volatile enough, derivatization needed to be carried out by comparing several derivatization reagents as possible candidates for our analysis, including trifluoroacetic anhydride (TFAA), heptafluorobutyrylimidazole (HFBI), Bis(trimethylsilyl)acetamide (BSA), N,O-Bis(trimethylsilyl)trifluoroacetamide (BSTFA) and N-(tert-butyltrimethylsilyl)-N-methyltrifluoroacetamide (MTBSTFA) in 1 mg/L concentrations, concluding that MTBSTFA is the most suitable candidate for our analysis with an optimized volume of 20 μ L for the derivatization reagent in acetone up to a volume of 100 μ L. The reaction required 30 minutes in a temperature of 80°C. LODs ranged from 5.3 to 8.5 ng/mL. Calibration curves were linear in a wide range from 1 to 500 ng/mL with an $R^2 > 0.99$, except paracetamol, which due to a keto-enol tautomerisation in its amide group, several drawbacks were found in its quantification and linearity studies.

As pharmaceuticals are found in wastewater at levels ranging from μ g/L to ng/L, a pre-concentration step is needed. A detailed study of the most relevant parameters which affect the solid-phase extraction (SPE) -such as type of adsorbent, pH value of the sample and elution condition- that could affect the recovery of the compounds selected, has been carried out. After optimization, best recoveries have been achieved using Extrabond EB2 (Scharlau) with a pH of conditioning stage of 7 and eluting our analytes with methanol. After elution, the evaporation step was optimized by heating our methanol extracts in a temperature of 30°C with a gentle flow of N₂ until dryness. Before injecting the samples, a reconstitution step was achieved by adding acetone, which resuspended our analytes, and derivatizing the resuspended extracts following the aforementioned conditions of derivatization. This method has been verified on wastewater samples using the optimized conditions.

References:

¹ Agencia Española de Medicamentos y Productos Sanitarios. Informe. Utilización de medicamentos antiinflamatorios no esteroideos en España durante el periodo 2013-2016. <https://www.aemps.gob.es/medicamentosUsoHumano/observatorio/docs/antiinflamatorios-AINEs-periodo-2013-2016.pdf?x88630> (Access: 16/07/2021).

Acknowledgements:

This work has been supported by the Madrid Government (Comunidad de Madrid- Spain) under the Multiannual Agreement with Complutense University in the line Program to Stimulate Research for Young Doctors (Reference PR65/19-22432).

SÍNTESIS DE PUNTOS CUÁNTICOS DE CARBONO POR LÁSER PULSADO

C. Agudo¹, A. Ribeiro González¹, D. García-Fresnadillo¹, N. Martín^{1,2}.

¹ *Departamento Química Orgánica, Facultad de CC. Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid*

² *IMDEA-Nanociencia, C/ Faraday 9, Campus de Cantoblanco, 28049 Madrid*

caragudo@ucm.es

Los puntos cuánticos de carbono (*carbon quantum dots, CQDs*) son nanomateriales de forma cuasi-esférica constituidos principalmente por carbono, además de otros elementos de la tabla periódica que pueden introducirse en su estructura.¹ Sus extraordinarias propiedades ópticas, con una intensa absorción en la región UV-Visible del espectro electromagnético y una emisión de fluorescencia dependiente de la longitud de onda de excitación, unidas a su baja toxicidad, biocompatibilidad y facilidad de síntesis, han generado recientemente un enorme interés en los investigadores.² Debido a estas propiedades, es posible desarrollar aplicaciones en diferentes áreas científico-tecnológicas, como son la optoelectrónica, formando parte de dispositivos LEDs; la biomedicina, como agentes de contraste en bioimagen; o como sensores para la detección de determinados cationes, aniones y pequeñas moléculas, entre otras aplicaciones posibles.³ Para la síntesis de estas nanopartículas se ha empleado un láser Nd:YAG que se pulsa a una frecuencia de 10 Hz, irradiando a 532 nm un reactor fotoquímico en el que se encuentra un precursor orgánico molecular sencillo. Se trata de un novedoso método de síntesis *bottom-up* (de abajo a arriba), realizado en un único paso sintético y que permite obtener CQDs funcionalizados químicamente en su superficie. Además, este método permite la incorporación de metales y otros elementos químicos que mejoran las prestaciones y modifican las características finales de los CQDs, al añadir nuevas propiedades como son la quiralidad y el magnetismo a sus ya interesantes propiedades ópticas.

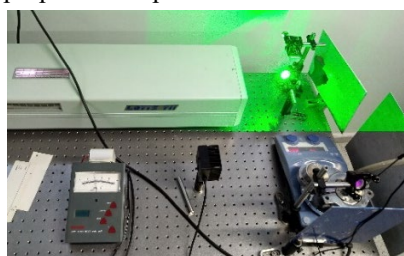


Figura 3. Síntesis de CQDs por láser pulsado.

Las nanopartículas obtenidas pueden ser caracterizadas por diferentes técnicas microscópicas y espectroscópicas para comprender las características tanto estructurales como ópticas. Una vez caracterizados los nanomateriales se comenzará el desarrollo de aplicaciones específicas en los campos anteriormente mencionados.

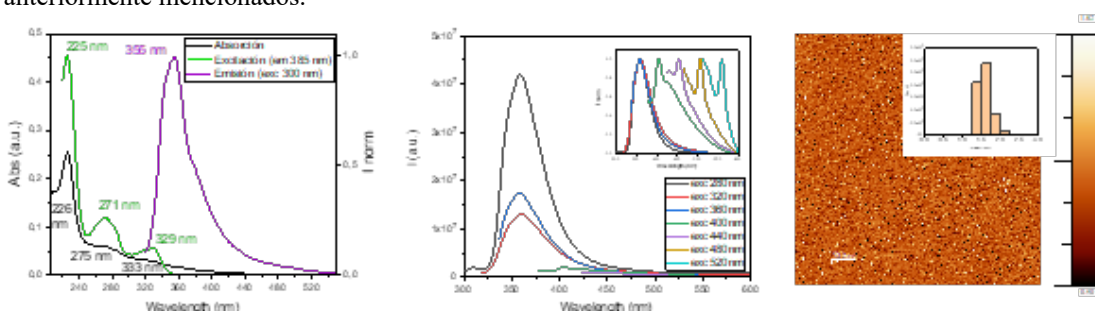


Figura 4. Caracterización de CQDs obtenidos a partir de 2-naftol y $\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$: izquierda, espectros de absorción, excitación y emisión en 2-propanol (0,05 mg/mL); centro, espectros de emisión a diferentes longitudes de onda de excitación en 2-propanol (0,05 mg/mL); derecha, imagen AFM junto a su distribución de tamaño.

Referencias

- [1] Hagiwara, K.; Horikoshi, S.; Serpone, N. *Chem. Eur. J.* **2021**, *27*, 9466-9481.
- [2] Vithalani, R.; Patel, D.; Modi, C. K.; Suthar, D. H. *J. Mater. Sci.* **2020**, *55*, 8769-8792.
- [3] Sciortino, A.; Canizzo, A.; Messina, F. *C* **2018**, *4*, 67.

Agradecimientos

Comisión Europea (ERC Synergy Grant 2020, ERC-2020-SyG: TOMATTO), MINECO de España (CTQ2017-83531-R), Comunidad de Madrid (FOTOCARBON-CM S2013/MIT-2841).

SILICA-BASED FIBROUS NANOPARTICLES AS MULTIFUNCTIONAL PLATFORM FOR ADVANCED THERANOSIS OF TRIPLE NEGATIVE BREAST CANCER.

K. Ovejero Paredes,^{1,2} D. Díaz-García,³ M. Marciello,¹ L. Lozano Chamizo,^{1,2} Y. Luengo Morato,¹ S. Prashar,³ I. Mena-Palomo,³ S. Gómez-Ruiz,^{3*} and M. Filice.^{1,2,*}

¹ Nanobiotechnology for Life Sciences Group, Department of Chemistry in Pharmaceutical Sciences, Faculty of Pharmacy, Universidad Complutense de Madrid (UCM), Plaza Ramón y Cajal s/n, E-28040 Madrid, Spain.

² Microscopy and Dynamic Imaging Unit, Fundación Centro Nacional de Investigaciones Cardiovasculares Carlos III (CNIC), Calle Melchor Fernandez Almagro 3, E-28029 Madrid, Spain.

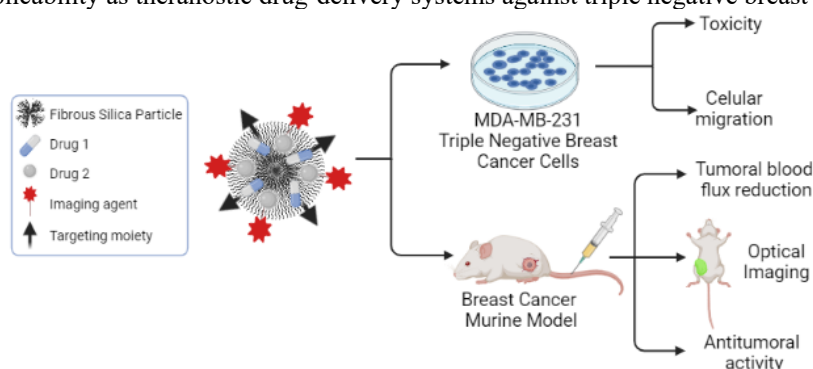
³ COMET-NANO Group. Department of Biology and Geology, Physics and Inorganic Chemistry, ESCET, Universidad Rey Juan Carlos, Calle Tulipán s/n, E-28933 Móstoles (Madrid), Spain.

kovejero@ucm.es

Keywords: Fibrous silica particles, triple negative breast cancer, theranosis, molecular imaging, nanomedicine, nanobiotechnology, metallodrugs.

Breast cancer is the leading diagnosed cancer and the most common cancer-related death in women worldwide.¹ Several chemotherapeutic drugs are used in the treatment of breast cancer to reduce or suppress the growth of cancerous cells although some of them also show different side effects, thus, hampering their usefulness. Toward this scope, the simultaneous administration of different drugs in a combined therapy expecting the use of a less toxic anticancer drug could represent an interesting strategy able to promote the synergistic antitumoral activity of selected drugs while reducing their intrinsic unwanted side effects. In order to achieve this simultaneous administration, to improve their bioavailability at the human body and to reduce side effects -possibly enhancing also diagnostic activity meanwhile (theranosis concept)- a proper drug carrier must be used and the nanosized materials as silica nanoparticles represent the most proper candidates.²

Thus, in this work, a novel multifunctional silica material based on fibrous nanoparticles has been synthesized and decorated with i) two different representative drugs (with two different action mechanisms and toxicity profiles), ii) a targeting molecule (to selectively target triple negative breast cancer) and a iii) molecular imaging agent (to enable their tracking both *in vitro* and *in vivo*). The theranostic nanodrugs showed promising results both *in vitro* (with MDA-MB-231 triple negative breast cancer cells) and *in vivo* in murine models, permitting their *in vivo* follow up (diagnostic ability), the tumoral mass reduction together with an antiangiogenic activity (therapeutic activity) and a reduced side toxicity in comparison with the same drugs administered alone. In sum, this novel silica based nanoplatform showed a highly promising applicability as theranostic drug-delivery systems against triple negative breast cancer.



References

¹ M. Schmidt, Chemotherapy in early breast cancer: when, how and which one?. *Breast Care*, 9(3)(2014) 154-60.

² K. Ovejero Paredes, et al., Multifunctional Silica-Based Nanoparticles with Controlled Release of Organotin Metallodrug for Targeted Theranosis of Breast Cancer. *Cancers*, 12(1) (2020). DOI: 10.3390/cancers12010187.

Acknowledgments

M.F. and K.O.P. acknowledges the Comunidad Autonoma de Madrid for research project no. 2017-T1/BIO-4992 ("Atracción de Talento" Action) also cofunded by Universidad Complutense de Madrid. M.M, M.F. AND Y.L.M. are grateful to the Comunidad Autonoma de Madrid and FEDER for the I+D collaborative Programme in Biomedicine NIETO-CM (Project reference B2017-BMD3731).

HYBRID CHITOSAN BASED NANOPARTICLES FOR WOUND TREATMENT AND SKIN REGENERATION

L. Lozano Chamizo^{1,2,3}, Y. Luengo Morato¹, K. Ovejero Paredes^{1,2}, M. Filice^{1,2}, M. Marciello^{1*}

¹Nanobiotechnology for Life Sciences Lab., Department of Chemistry in Pharmaceutical Sciences, Faculty of Pharmacy, Universidad Complutense de Madrid (UCM), Plaza Ramón y Cajal s/n, E-28040 Madrid, Spain.

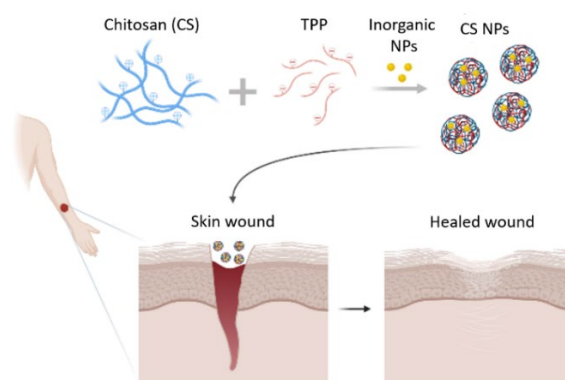
²Microscopy and Dynamic Imaging Unit, Fundación Centro Nacional de Investigaciones Cardiovasculares Carlos III (CNIC), Calle Melchor Fernández Almagro 3, E-28029 Madrid, Spain.

³Atrys Health, Madrid, Spain.

laurloza@ucm.es

Keywords: chitosan, nanoparticles, hybrid, wound healing, antibacterial properties

The skin, the largest organ of human body, is highly exposed to the external environment and so vulnerable to a variety of damages and lesions, such as chronic wounds and deep burns of difficult healing. In order to treat these lesions, it is necessary to achieve wound closure and skin regeneration while avoiding bacterial infections. In this context, nanomedicine provides interesting and effective new tools to achieve this purpose (1). Specifically, chitosan (CS) based nanoparticles (NPs) are promising candidates for skin damage treatment. CS is a natural polymer that shows interesting intrinsic properties such as biocompatibility, biodegradability, no antigenicity, mucoadhesive behaviour, anti-inflammatory and antibacterial abilities, becoming an attractive material for wound healing applications, in addition to promoting and accelerating tissue repair and regeneration processes (2). Furthermore, its combination with inorganic NPs, such as silver (Ag), gold (Au) or iron oxide (Fe₃O₄) NPs, showing intrinsic therapeutic properties and the possibility of surface functionalization, could be an interesting approach to increase antibacterial and regeneration properties. Besides, the encapsulation of these inorganic NPs inside the CS, decreases eventual toxic side effects related to their nature (3). Thus, this study is focused on the preparation of different hybrid CS-inorganic NPs in order to evaluate their antibacterial and skin regeneration properties. In more details, after a deep physical chemical characterization, these nanohybrids have been assessed *in vitro* to evaluate their toxicity, antibacterial and wound healing properties in comparison with CS and inorganic NPs alone.



References

1. Wang W, Lu KJ, Yu CH, Huang QL, Du YZ. Nano-drug delivery systems in wound treatment and skin regeneration. *J Nanobiotechnology*. 2019;17(1):82.
2. Pelegrino MT, Seabra AB. Chitosan-Based Nanomaterials for Skin Regeneration. *AIMS Medical Science*. 2017;4(3):352-81.
3. You C, Li Q, Wang X, Wu P, Ho JK, Jin R, et al. Silver nanoparticle loaded collagen/chitosan scaffolds promote wound healing via regulating fibroblast migration and macrophage activation. *Sci Rep*. 2017;7(1):10489.

Acknowledgments: M.M. and L.L.C. acknowledge the Comunidad Autónoma de Madrid for research project with reference IND2020/BIO-17523 (“Doctorados Industriales”).

SÍNTESIS FOTOQUÍMICA DE 3-(ARILSULFONIL)BUT-3-ENALES A PARTIR DE α -ALENOLES, SALES DE DIAZONIO Y DIÓXIDO DE AZUFRE

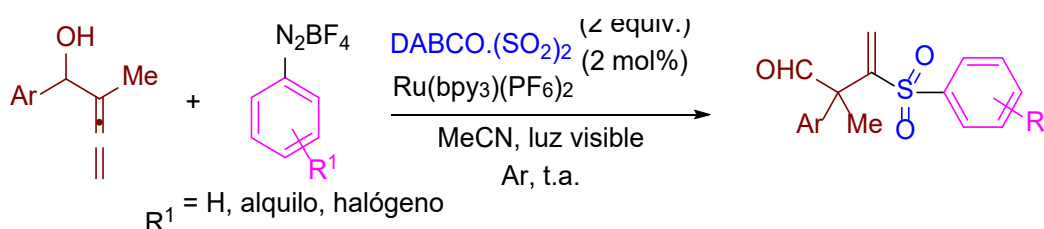
Fernando Herrera¹, Pablo Esteban¹, Pedro Almendros², Amparo Luna¹

¹Grupo de Lactamas y Heterociclos Bioactivos, Departamento de Química Orgánica, Unidad Asociada al CSIC, Facultad de Química, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid, España. ²Instituto de Química Orgánica General, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, IQOG-CSIC, Juan de la Cierva, 3, 28006, Madrid, España.

fernandhe@uclm.es

El grupo SO₂ se puede encontrar en sulfonas y sulfonamidas, compuestos que presentan una elevada actividad biológica y farmacológica¹. El dióxido de azufre es un gas muy tóxico con un característico olor irritante, resultando difícil de manejar. Debido a ello, recientemente se han investigado varias fuentes alternativas de este compuesto más fáciles de manejar como el DABSO, que puede ser utilizado como una fuente de SO₂ estable. Por su parte, la catálisis foto-redox es un tipo de catálisis fotoquímica en la que están involucrados procesos de transferencia de un electrón (SET, *single-electron transfer*), cuya investigación ha experimentado un auge en los últimos años. Todo ello ha permitido llevar a cabo reacciones que resultaban complejas o no eran factibles mediante métodos convencionales.²

En el presente trabajo, se ha investigado la reactividad de α -alenoles en presencia de sales de diazonio y el compuesto orgánico DABCO.(SO₂)₂ como fuente de dióxido de azufre. La reacción tiene lugar en condiciones foto-redox y el proceso implica un mecanismo radicalario con inserción de SO₂Ar y una migración 1,2 de arilo. Este acoplamiento es el primer ejemplo descrito en la bibliografía que utiliza alcoholes α -alénicos como materiales de partida para la preparación de sulfonas por métodos fotoquímicos.³



Referencias:

¹ a) Ezabadi, I. R.; Camoutsis, C.; Zoumpoulakis, P.; Geronikaki, A.; Soković, M.; Glamočilija, J.; Ćirić, A. *Bioorg. Med. Chem.* **2008**, *16*, 1150. b) Artico, M.; Silvestri, R.; Pagnozzi, E.; Bruno, B.; Novellino, E.; Greco, G.; Massa, S.; Ettore, A.; Loi, A. G.; Scintu, F.; La Colla, P. *J. Med. Chem.* **2000**, *43*, 1886.

² a) Narayanam, J. M. R.; Tucker, J. W.; Stephenson, C. R. J. *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 8756. b) Nicewicz, D. A.; MacMillan, D. W. C. *Science* **2008**, *322*, 77. c) Ischay, M. A.; Anzovino, M. E.; Du, J.; Yoon, T. P. *J. Am. Chem. Soc.* **2008**, *130*, 12886.

³ Herrera F.; Luna, A.; Almendros, P. *Org. Lett.* **2020**, *22*, 9490.

Agradecimientos

Proyecto (PGC2018-095025-B-I00) y F. H. por Contrato predoctoral UCM (Referencia CT27/16-CT28/16).

N-GLYCOSYLATION PATTERN OF RECOMBINANT GAS1 ANALYZED BY NMR

Diego HERAS MÁRQUEZ¹, Ana MANZANO², Álvaro MARTÍNEZ-DEL-POZO¹, M^a Ángeles CANALES MAYORDOMO², Sara GARCÍA LINARES¹

¹Departamento de Bioquímica y Biología Molecular, Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid, 28040, Spain

²Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas. Universidad Complutense de Madrid, 28040, Spain.

dheras01@ucm.es

GAS1 (Growth Arrest-Specific protein 1) is a monomeric GPI (glycosylphosphatidylinositol)-anchored plasma membrane protein which carries out different functions, highlighting among them its role as coreceptor of Sonic Hedgehog ligand¹. In animal cells, this signaling pathway plays an essential role in embryogenesis and stem cells homeostasis in adult tissues. The alteration or absence of GAS1 has been related to the appearance and severity of a disease called holoprosencephaly, which is characterized by an incomplete division of the forebrain². Nowadays, there is not a high-resolution three-dimensional structure available for GAS1. With this purpose, we have cloned and produced the soluble domain of GAS1 in the yeast recombinant expression system *Pichia pastoris* and purified it. The purified protein was characterized through SDS-PAGE, Western blot, glycosylation analysis by concanavalin A binding, circular dichroism, mass spectrometry, and N-terminal sequencing. This characterization revealed the existence of two different species: The complete form of the soluble domain and a proteolytic processed variant, composed of residues 103-278, and lacking the glycosylation site of this protein, located in Asn 78. The purified protein was also subjected to an analysis of the glycosylation pattern by NMR. Monodimensional ¹H and bidimensional homonuclear TOCSY and NOESY spectra were acquired. Based on the spectra obtained³ we concluded that the main *N*-oligosaccharide attached to GAS1 is a high-mannose composed of nine mannoses. More experiments are required for a better structural characterization of the *N*-oligosaccharide and for resolving the protein soluble structure. For that purpose, in future experiments we aim to produce the soluble domain labeled with stable isotopes (¹³C and ¹⁵N).

Referencias – Máximo 3 referencias

- (1) Wierbowski, B. M.; Petrov, K.; Aravena, L.; Gu, G.; Xu, Y.; Salic, A. Hedgehog Pathway Activation Requires Coreceptor-Catalyzed, Lipid-Dependent Relay of Sonic Hedgehog_Sl. *Dev. Cell* **2020**, *55* (4), 450-468.e8.
- (2) Seppala, M.; Depew, M. J.; Martinelli, D. C.; Fan, C. M.; Sharpe, P. T.; Cobourne, M. T. Gas1 Is a Modifier for Holoprosencephaly and Genetically Interacts with Sonic Hedgehog. *J. Clin. Invest.* **2007**, *117* (6), 1575–1584. <https://doi.org/10.1172/JCI32032>.
- (3) Díaz, D.; Canales-Mayordomo, A.; Javier Cañada, F.; Jiménez-Barbero, J. Solution Conformation of Carbohydrates: A View by Using NMR Assisted by Modeling. *Methods Mol. Biol.* **2015**, *1273*, 261–287. https://doi.org/10.1007/978-1-4939-2343-4_19.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el proyecto PR87/19-22556 UCM-Banco Santander.

BUSCANDO NUEVOS ÁNODOS PARA BATERÍAS DE ION POTASIO

Elena Sánchez Ahijón¹

A. Gómez-Herrero², E. Castillo-Martínez¹

¹ Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid

² CNME, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid
elensa06@ucm.es

Debido al crecimiento de la población y al incremento en la demanda de energía, es crucial encontrar sustitutos para la fuente de energía más usada: los combustibles fósiles. Las baterías recargables de ion litio son buenas candidatas. Sin embargo, debido a su alta demanda en el mercado y al limitado acceso del litio, se enfrentan a problemas de sostenibilidad. Las baterías de ion potasio (KIBs) parecen buenos sustitutos. Con toda la información que se puede extraer de las baterías de ion litio (LIBs) y las baterías de ion sodio (NIBs), el reto actual de las KIBs es conseguir un ánodo adecuado que inserte iones K^+ de forma reversible sin una gran expansión volumétrica y con buena ciclabilidad.^{1,2}

Este trabajo se centra en la búsqueda de ánodos con estructuras rígidas en 3D que presentan túneles o cavidades suficientemente grandes como para alojar los iones K^+ . En base a este requisito, y algunos otros enumerados en la Fig. 1, se han estudiado tres materiales: el óxido $(Cs,K)AlTiO_4$ con estructura tipo tridimita y los NASICONES $K_2VTi(PO_4)_3$ y $NbTi(PO_4)_3$. Todos ellos tienen en común el uso del par redox Ti^{4+}/Ti^{3+} para la inserción y desinserción de potasio a bajos potenciales. Los NASICONES, adicionalmente, cuentan con otros dos pares redox (V^{3+}/V^{2+} y Nb^{5+}/Nb^{4+} , respectivamente) capaces de insertar iones K^+ incluso a más bajos potenciales.

La tridimita $KAlTiO_4$ se ha intentado sintetizar por rutas directas (método cerámico y citratos) y por rutas indirectas (intercambio iónico químico y electroquímico que usan $CsAlTiO_4$ como material de partida. Por otro lado, el nuevo material $K_2VTi(PO_4)_3$ se ha obtenido mediante el método de los citratos con un recubrimiento de carbono. La fase de este compuesto resultó ser cúbica ($P213$) en vez de tipo NASICON ($R-3c$) como su análogo de sodio. En cuanto al NASICON $NbTi(PO_4)_3$ se consigue sintetizar con éxito mediante el método cerámico convencional, confirmando su estructura mediante refinamiento Rietveld. La electroquímica de estos compuestos se ha estudiado mediante cronopotenciometría cíclica para evaluar su potencial como ánodos. En esta comunicación se discutirá la síntesis, caracterización estructural y comportamiento electroquímico de estos candidatos a ánodos para KIBs.

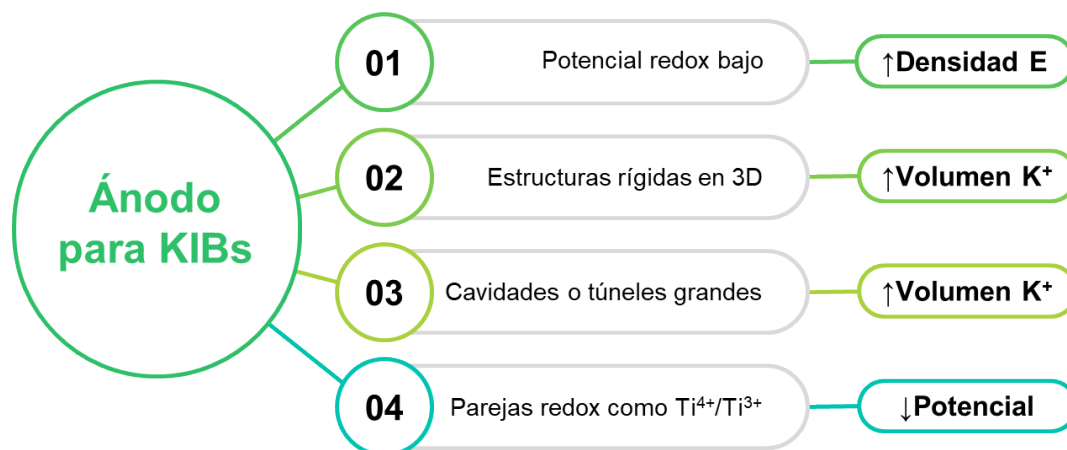


Fig. 1. Esquema de los requisitos necesarios para encontrar un buen candidato a ánodo para baterías de ion potasio (KIBs).

Referencias

[1] Rajender Boddula I, M. Asiri A. *Potassium-Ion Batteries*. First Edit. (Rajender Boddula I, M. Asiri A, eds.).

Scrivener Publishing; 2020. doi:10.1002/9781119663287

[2] Kubota K, Dahbi M, Hosaka T, Kumakura S, Komaba S. Towards K-Ion and Na-Ion Batteries as “Beyond Li-Ion.”

Chem Rec. 2018;18:1-22. doi:10.1002/tcr.201700057

ELECTROCHEMICAL IMMUNOSENSING OF GROWTH ARREST-SPECIFIC 6 IN HUMAN PLASMA

C. Muñoz-San Martín¹, V. Pérez-Ginés¹, R. Torrente-Rodríguez¹, M. Gamella¹, G. Solís-Fernández², A. Montero-Calle², M. Pedrero¹, V. Serafin¹, N. Martínez-Bosch³, P. Navarro^{3,4,5}, P. García de Frutos^{4,5}, M. Batlle^{5,6}, R. Barderas², J. Pingarrón¹, S. Campuzano¹.

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de CC. Químicas, Universidad Complutense de Madrid, E-28040, Madrid, Spain. ²Chronic Disease Programme, UFIEC, Carlos III Health Institute, Majadahonda, Madrid 28220, Spain. ³Cancer Research Program, Hospital del Mar Medical Research Institute (IMIM), Unidad Asociada IIBB-CSIC, Barcelona, Spain. ⁴Departamento de Muerte y Proliferación Celular, Instituto de Investigaciones Biomédicas de Barcelona – Centro Superior de Investigaciones Científicas (IIBB-CSIC), 08036, Barcelona, Spain. ⁵Institut d'Investigacions Biomèdiques August Pi i Sunyer (IDIBAPS), Barcelona, Catalonia, Spain. ⁶Centro de Investigación Biomédica en Red de Enfermedades Cardiovasculares (CIBERCV), Instituto de Carlos III, Madrid, Spain.

vicper05@ucm.es

Growth arrest-specific 6 (GAS6) is a vitamin K-dependent protein which acts as ligand of the tyrosine kinase receptors Axl, Tyro3 and MerTK, whose signaling is involved in cell adhesion, migration, growth and survival. Thus, GAS6 plays a key role in processes related to proliferation, inflammation, angiogenesis and atherosclerotic plaque formation. In the last few years, it has been found that serum levels of GAS6 are related to cancer prognosis and to other serious pathologies, such as heart failure (HF) or sepsis. For this reason, we propose the development of an electrochemical immunoplatfrom capable of quantitatively determining the GAS6 protein in serum samples of patients with severe diseases.

The developed biosensor is based on the selective capture of the target protein (GAS6) by micromagnetic immunoconjugates, and its subsequent sandwiching with a biotinylated secondary antibody further labelled with a streptavidin-horseradish peroxidase (Strep-HRP) conjugate. The electrochemical detection is carried out by amperometry at screen-printed carbon electrodes (SPCEs) using the hydroquinone (HQ)/HRP/H₂O₂ system [1].

Once the effect of key experimental variables was evaluated, the analytical and operational characteristics were established, reaching a linear concentration range from 0.09 to 7.50 ng mL⁻¹ and a detection limit as low as 27 pg mL⁻¹, well below the serum levels found for the target protein in healthy subjects (13 – 28 ng mL⁻¹) and in patients with acute coronary syndrome (5.7 – 27.5 ng mL⁻¹) and oral squamous cell carcinoma (28 ± 7 ng mL⁻¹). Moreover, the immunosensor presented high fabrication and operational reproducibility (CV = 3.9 %, n = 10) and a reduced time of analysis of 75 min. The excellent characteristics of the developed biotool made possible its application to the analysis of plasma samples from patients with HF and pancreatic cancer, providing results in good agreement with those achieved with the conventional ELISA methodology but at lower cost and in less time. The simplicity of the protocol along with the possibility of building a portable and multiplexed system allow the developed biosensor to be implemented as a *Point-of-Care* (POC) device in order to improve the diagnosis and subsequent monitoring of different diseases even in ambulatory settings.

References

[1] C. Muñoz-San Martín et al., *Electrochem. Sci. Adv.* **2021**, e2100096. <https://doi.org/10.1002/elsa.202100096>

Acknowledgements

This work is part of the POSITION-II project funded by the ECSEL Joint Undertaking under grant number Ecsel-783132-Position-II-2017-IA; www.position-2.eu, and PCI2018-093067 (Spanish Ministerio de Ciencia e Innovación). The financial support of RTI2018-096135-B-I00 (Spanish Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades) and PID2019-103899RB-I00 (Spanish Ministerio de Ciencia e Innovación), Research Projects, PI17CIII/00045 and PI20CIII/00019 grants from the AES-ISCI program and the TRANSNANOAVANSENS- CM Program from the Comunidad de Madrid (Grant S2018/NMT-4349) are also acknowledged. Other acknowledgements: A.M.-C. (FPU predoctoral contract by the Spanish Ministerio de Educación, Cultura y Deporte), G.S.-F. (predoctoral contract, grant number 1193818N supported by The Flanders Research Foundation FWO), C.M.-S.M. (predoctoral contract from Complutense University of Madrid), R.M.T.-R. (Talento-Contract from Comunidad de Madrid, 2019-T2/IND-15965).

ESTUDIO DEL ELECTRURO DE MAYENITA COMO MATERIAL TERMOELÉCTRICO

M. Tabuyo-Martínez¹, O. Juan Durá,² J. Prado-Gonjal¹

¹ Dpto. Química Inorgánica, Universidad Complutense de Madrid, Ciudad Universitaria s/n, Madrid 28040, España

² Dpto de Física Aplicada, Universidad de Castilla la Mancha, E-13071 Ciudad Real, Spain.

marinata@ucm.es

La generación de energía de forma eficiente y sostenible es esencial debido a la crisis climática y al incremento mundial en la demanda de energía. Tanto en los procesos de generación de energía como en multitud de procesos industriales se producen grandes cantidades de calor residual. Los materiales termoeléctricos, que transforman un gradiente de temperatura en electricidad, ofrecen una gran oportunidad para convertir este calor residual en electricidad aumentando la eficiencia energética del proceso.

Actualmente, los materiales termoeléctricos se emplean en misiones espaciales. Sin embargo, su implementación en otros ámbitos se ve limitada por la baja eficiencia de conversión, en torno a un 6 %. [1] Además, la mayor parte de los materiales termoeléctricos actualmente comerciales son tóxicos, caros, están compuestos por elementos escasos y tienen baja estabilidad al aire.

Este trabajo se centra en el estudio del electruro de mayenita (representación esquemática en la figura 1a) como óxido termoeléctrico, por su carácter no tóxico, su bajo coste, estar compuesto por elementos abundantes y presentar elevada estabilidad al aire. Se investiga la posible reducción de la mayenita al sinterizarse por SPS mediante espectroscopía Raman, difracción de neutrones y medidas de resistividad eléctrica y coeficiente Seebeck. Asimismo, se estudian distintos composites grafeno-mayenita por la gran conductividad eléctrica del grafeno. Algunas de las muestras preparadas se muestran en la figura 1b.

Se observa que la sinterización por SPS y la incorporación de grafeno permiten aumentar en unos 12 órdenes de magnitud la conductividad eléctrica del material a 320 K, mientras que la conductividad térmica no se ve notablemente afectada, como se observa en la figura 1c. Se logra, así, desacoplar las propiedades eléctricas y térmicas, haciendo que el electruro de mayenita sea un material con propiedades termoeléctricas prometedoras.

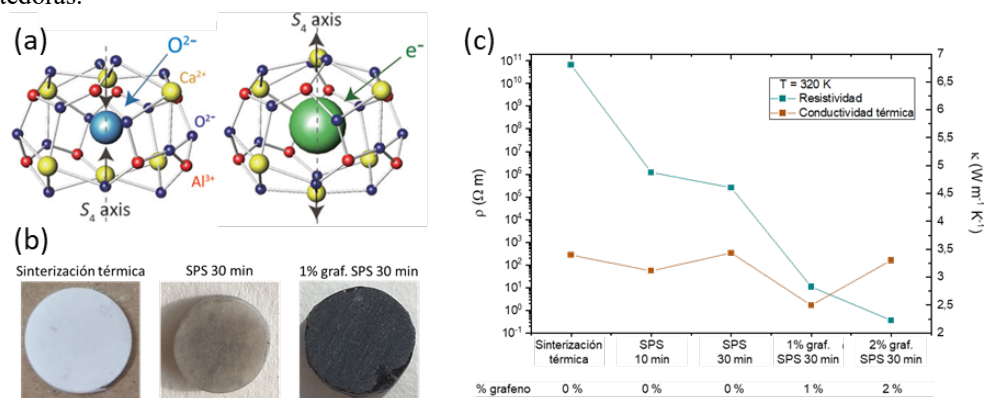


Figura 1. (a) Representación esquemática de una cavidad de la estructura cristalina de la mayenita con el ion oxígeno libre y un electrón (electruro), a izquierda y derecha, respectivamente. [2] (b) Imágenes de algunas de las muestras preparadas. (c) Variación de la conductividad térmica y eléctrica en las distintas muestras.

Referencias

- [1] Ma, Z.; Wei, J.; Song, P.; Zhang, M.; Yang, L.; Ma, J.; Liu, W.; Yang, F.; Wang, X. Review of Experimental Approaches for Improving ZT of Thermoelectric Materials. *Mater. Sci. Semicond. Process.* **2021**, *121*.
- [2] Kim, S. W.; Hosono, H. Synthesis and Properties of $12CaO \cdot 7Al_2O_3$ Electride: Review of Single Crystal and Thin Film Growth. *Philos. Mag.* **2012**, *92* (19–21), 2596–2628.

Agradecimientos

Este trabajo está financiado por el Gobierno de Madrid (Comunidad de Madrid-España) bajo el Acuerdo Multianual con la Universidad Complutense en la línea del Programa para Estimular la Investigación de Jóvenes Doctores en el contexto del V PRICIT (Programa Regional de Investigación Científica e Innovación Tecnológica). Proyecto PR65/19-22459.

PREPARACIÓN ULTRARRÁPIDA DE SnQ (Q= S, Se) CON APLICACIÓN EN ALMACENAMIENTO Y CONVERSIÓN DE ENERGÍA

Marta María González Barrios¹, Óscar Juan Durá², David Ávila Brande¹, Elizabeth Castillo Martínez¹, Jesús Prado Gonjal¹

¹Departamento de Química Inorgánica, Universidad Complutense de Madrid, E-28040 Madrid, España

²Departamento de Física Aplicada, Universidad de Castilla—La Mancha, E-13071 Ciudad Real, España

martam57@ucm.es

Actualmente, existe un gran interés en el desarrollo y mejora de sistemas de almacenamiento y conversión de energía respetuosos con el medio ambiente y capaces de alcanzar altos rendimientos. Los calcogenuros metálicos, especialmente SnQ (Q =S, Se), presentan ciertas características que los hacen atractivos como componentes de dichos sistemas. Ambos son materiales semiconductores que exhiben una estructura dispuesta en capas constituidas por enlaces covalentes a lo largo de las dos dimensiones, e interacciones débiles de tipo Van de Waals a lo largo de la tercera dimensión (Figura 1). Esta estructura facilita la intercalación, convirtiéndolos en buenos candidatos para aplicaciones destinadas al almacenamiento de energía, como las baterías de ion litio o ion potasio [1]. Asimismo, la fuerte anarmonicidad de sus enlaces junto con su baja conductividad térmica, hacen que estas fases tengan gran interés como materiales termoeléctricos, capaces de convertir el calor residual en energía eléctrica. En 2014, un extraordinario valor de figura de mérito ($ZT=2.6$ a lo largo del eje b a 923 K) fue reportado para SnSe en forma de monocristal, sin embargo, aún no se han logrado valores similares para los materiales en forma policristalina [2].

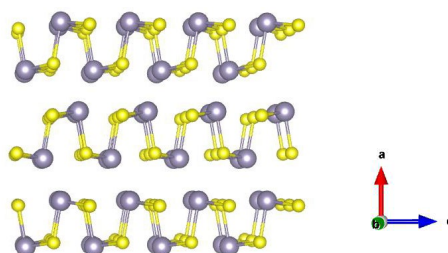


Figura 5. Estructura cristalina de SnQ (Q = S,Se). Átomos de Sn representados por esferas violetas y S/Se por esferas amarillas.

En este trabajo, se han preparado las fases $\text{SnS}_{1-x}\text{Se}_x$ ($x = 0, 0.1, 0.2, 1$) mediante el método hidrotermal asistido por microondas. Este método alternativo de síntesis ha permitido la preparación ultrarrápida de fases cristalinas puras (1 minuto de reacción) mediante la irradiación de microondas. Además, esta ruta sintética provoca la generación de vacantes de estaño distribuidas aleatoriamente en la estructura cristalina, tal y como se ha determinado mediante difracción de rayos X. Este fenómeno produce una influencia significativa en las propiedades físicas de los compuestos, puesto que modifica la concentración y movilidad de los portadores de carga.

En esta comunicación, se comentarán los detalles del procedimiento sintético y de la caracterización tanto estructural como microestructural. Además, se analizarán las propiedades electroquímicas y termoeléctricas de los materiales sintetizados para su empleo en baterías y dispositivos termoeléctricos.

Referencias:

- [1] Y. Jung, Y. Zhou, and J. J. Cha, "Intercalation in two-dimensional transition metal chalcogenides," *Inorg. Chem. Front.*, vol. 3, 2016, doi: 10.1039/c5qi00242g.
- [2] L. D. Zhao et al., "Ultralow thermal conductivity and high thermoelectric figure of merit in SnSe crystals," *Nature*, vol. 508, no. 7496, pp. 373–377, 2014, doi: 10.1038/nature13184.

Agradecimientos

Este trabajo se ha financiado gracias a los proyectos PR65/19-22459 (Comunidad de Madrid – UCM), RTI2018-094550-A-I00, MAT2017-84385-R (Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades). Asimismo, agradecer a la Comunidad de Madrid la concesión del contrato de Ayudante de investigación PEJ-2020-AI/IND-17706, a través del Programa Operativo de Empleo Juvenil y la Iniciativa de Empleo Juvenil.

ELECTROCHEMICAL IMMUNOSENSOR FOR DIAGNOSIS OF NEURODEGENERATIVE DISEASES

B. Arévalo¹, A. Valverde¹, V. Serafin¹, A. Montero-Calle², R. Barderas², P. Yáñez-Sedeño¹, S. Campuzano¹, J. M. Pingarrón¹

¹ *Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemistry, University Complutense of Madrid, Ciudad Universitaria s/n, 28040, Madrid, Spain.*

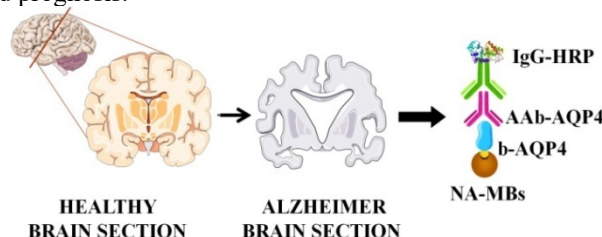
² *Chronic Disease Programme, UFIEC, Institute of Health Carlos III, 28220, Majadahonda, Madrid, Spain*
Beaare01@ucm.es

The immune system protects the organism from potentially harmful substances by attacking them with antibodies. Unfortunately, some of these biomolecules (auto-antibodies, AAbs) sometimes recognise self-proteins becoming harmful to the organism and leading to autoimmune diseases. Neurodegenerative processes, such as Alzheimer's disease, characterised by a progression of neuronal degeneration and death, affecting human capacities and leading to loss of autonomy have an important autoimmune component that exacerbates the disease. Although this autoimmune response is not well understood, there are autoantibody targets disease-specific, such as the specific association of anti-AQP4 autoantibodies (AAbs-AQP4) to Alzheimer's disease, and in a minor extent to neuromyelitis optica and aggressive cancers. AQP4 is a water-selective transport protein with relatively high single-channel permeability, able to exclude ions and small solutes. It is expressed in astrocytes in contact with microvessels and synapses of the central nervous system. It facilitates cell migration, neuronal signal transduction and also exerts a neuroinflammatory role, being the main water transporter. One of the causes of Alzheimer's derives from amyloid aggregation in the brain when this protein is overexpressed. This overexpression leads to the production of anti-AQP4 autoantibodies, which circulate in the blood, becoming Alzheimer's disease potential biomarkers.

This communication describes the development of the first immunosensing platform based on the use of Streptavidin-modified magnetic microbeads functionalized with biotinylated-AQP4 for the selective capture of the specific AAbs, which were detected using a HRP-labeled secondary anti-human antibody (IgG-HRP). The electrochemical measurements were performed by amperometry at -200 mV (vs. Ag pseudo-reference electrode) upon magnetic capture of the modified-MBs on the working electrode surface of the SPCEs in the presence of the hydroquinone/H₂O₂ system.

The developed immunosensor demonstrated attractive analytical characteristics, highlighting its high selectivity and sensitivity, with a LOD value of 8.8 pg mL⁻¹ and a linear calibration range between 29 and 2500 pg mL⁻¹ for AAbs-AQP4 standards. The obtained results confirm the suitability of the developed bioplatfom for the accurate determination of endogenous AAbs-AQP4 levels in sera from AD patients.

The promising analytical performance, affordable cost, simple operation, disposable SPCE format and feasibility to be transferred to the determination of other disease-relevant autoantibodies, together with the feasibility to be implemented onto multiplexed biotools usable by non-specialized personnel, make the developed bioplatfom a very attractive alternative for developing POCT-devices to assist autoimmune prediction, diagnosis and prognosis.



Referencias

[1] Arévalo, B.; Serafin, V.; Sánchez-Paniagua, M.; Montero-Calle, A.; Barderas, R.; López-Ruiz, B.; Campuzano, S.; Yáñez-Sedeño, P.; Pingarrón, J. M. Fast and sensitive diagnosis of autoimmune disorder through amperometric biosensing of serum anti-dsDNA autoantibodies. *Biosens. Bioelectron.* **2020**, *160*, 112233 (10.1016/j.bios.2020.112233)

Agradecimientos

RTI2018-096135-B-I00; PID2019-103899RB-I00; AES-ISCIH/FEDER, PI20/00625; AES-ISCIH/FEDER, PI17CIII/00045 and PI20CIII/00019S2018/NMT-4349

El cuidado de nuestros hijos, por medio del control de calidad de su alimentación

S. Pradana-López¹, A.M. Pérez-Calabuig¹, J.C. Cancilla², L. Otero³, J.S. Torrecilla¹

¹ *Departamento de Ingeniería Química y de Materiales, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid, España*

² *Scintillon Institute, San Diego, CA, USA*

³ *Instituto de Ciencia y Tecnología de Alimentos y Nutrición (ICTAN), 28040, Madrid, España*
spradana@ucm.es

La leche es un alimento esencial en la dieta, y rica en componentes bioactivos, por lo que es considerado un alimento completo para los recién nacidos. Además, gracias a su composición, es un factor importante a la hora de prevenir enfermedades, como la osteoporosis o la caries dental.

En los países en desarrollo o subdesarrollados, la falta de controles de calidad permite que la leche sea fácilmente adulterada. Algunos de los adulterantes con los que se lleva a cabo esta práctica fraudulenta, son compuestos como el 2,4,6-triamino-1,3,5-triazina (melamina), entre otros. Este compuesto puede provocar graves problemas de salud, o incluso la muerte [2]. Un ejemplo de ello ocurrió en China en el año 2008, donde la adulteración de leche en polvo, destinada a lactantes, con melamina provocó la muerte de 8 niños de corta edad. Tras este suceso, la Comisión Europea y la Administración de Alimentos y Medicamentos de Estados Unidos decidieron establecer un límite de 2.5 mg/kg a la presencia de melamina en alimentos para adultos, y de 1.0 mg/kg en alimentos destinados a lactantes [3].

En este trabajo, se presenta un método basado en algoritmos inteligentes para detectar la presencia de melamina en muestras de leche en polvo. Se decidió emplear 3 tipos de leche, leche entera (Asturiana), leche desnatada para niños mayores de 6 meses (Nestlé) y leche desnatada para niños menores de un mes (Nestlé Sveltesse). En base a la legislación establecida, se fotografiaron concentraciones de 0.5, a 10 mg/kg. Las condiciones de toma de fotografías se mantuvieron constantes a lo largo de todo el trabajo.

El modelo inteligente se diseñó por medio de 3100 imágenes. Posteriormente, este modelo se validó con un conjunto de muestras ciegas. Clasificándose correctamente 321 imágenes de las 331 fotografías totales. Consiguiéndose un porcentaje de acierto de 97.0%. Estos prometedores resultados abren la puerta a sistemas sencillos y rápidos de detección de adulteraciones que atentan contra la vida de los más desprotegidos.

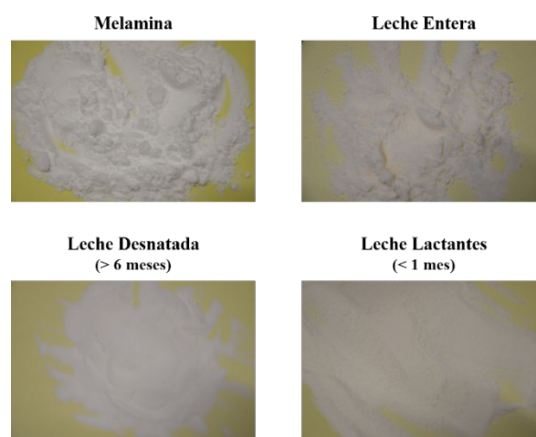


Figura 1. Imágenes de las muestras de las distintas leches en polvo y de melamina empleadas en la realización del estudio.

Referencias

- [1] Gurr, M.I., 1992. Milk products: contribution to nutrition and health. *Journal of the Society of Dairy Technology*, 45(3), 61-67.
- [2] Azhad, T.; Ahmed, S., 2016. Common milk adulteration and their detection techniques. *International Journal of Food Contamination*, 3(22), 1-9.
- [3] Lawley, R., 2013. Melamine. *Food Safety Watch*, 2016.

Las cervezas sin gluten, un placer seguro también para los celíacos

Autores. Nombre del autor que presenta el trabajo subvavado

A. M. Pérez¹, S. Pradana¹, S. López¹, J.C. Cancilla², J. S. Torrecilla¹

¹*Departamento de Ingeniería Química y de Materiales, Universidad Complutense de Madrid, 28040-Madrid, Spain.*

²*Scintillon Institute, San Diego, CA, USA.*

anampe08@ucm.es

La cerveza es una de las bebidas más consumidas en el mundo, solo por detrás del agua, té y café. Debido a este hecho, las empresas cerveceras se han visto en la obligación de crear cervezas sin gluten para aquellos potenciales consumidores que sufren celiaquía, enfermedad que en España sufren el 1'5% de la población. La elaboración de esta cerveza se basa en el uso de cereales que no contenga gluten. Pero esta materia prima redonda en características organolépticas que no agradan a los consumidores, ya que se consigue una cerveza con sabores distintos de las cervezas convencionales. Además, no se podría considerar cerveza por la legislación². Por ello, las empresas optan por degradar los epítomos alergénicos del gluten mediante una enzima o una hidrólisis, hasta llegar a una concentración mínima de 20 ppm a la cual se puede etiquetar un alimento como libre de gluten². Sin embargo, a pesar de todas las medidas, es posible que ocurra una contaminación cruzada en el proceso, poniendo en peligro la salud de los consumidores de estas cervezas.

En este trabajo, se presenta un método para poder detectar concentraciones de trazas de cerveza con gluten en cerveza etiquetada como sin gluten en dos marcas de cerveza españolas. Las muestras adulteradas se realizaron mediante diluciones. Para ello, se realizó conjuntamente la toma de fotografías junto con su tratamiento con algoritmos inteligentes. Se realizaron instantáneas a dos velocidades de obturación distintas en un recipiente aislado e iluminado por un foco. Una a 1/30 para simular una situación de luz, apta para el consumidor, y la otra a 1/250 para simular condiciones de oscuridad para el productor. Se obtuvieron un total de 2000 imágenes para cada velocidad, analizándolas por separado. Durante el proceso de validación interna el modelo inteligente ofrece unos resultados prometedores. Por lo que se realiza una validación ciega. Los resultados del testeo a ciegas para las dos velocidades de obturación empleadas fueron de 91'1% y 87'1%, a 1/30 y 1/250 s, respectivamente. Estos resultados abren la puerta al desarrollo de este tipo de tecnología para el diseño de metodologías rápidas para la detección de gluten en cervezas etiquetadas como sin gluten; ofreciendo una vía de protección a los enfermos celíacos y de control de calidad de la cerveza durante su elaboración y en su cadena de distribución.

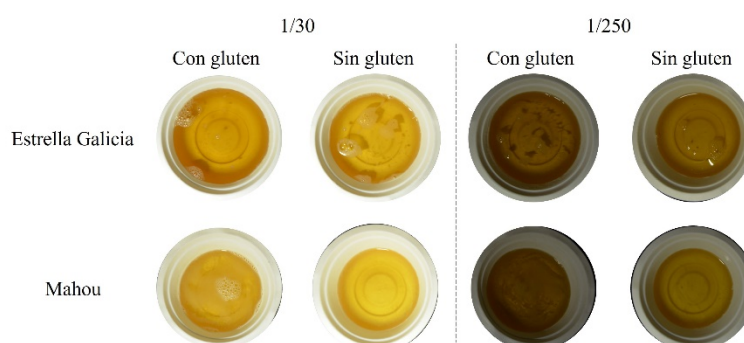


Figura 1. Representación de las cervezas españolas etiquetadas como con y sin gluten para las dos velocidades de obturación, 1/30 (izquierda) y 1/250 (derecha).

Referencias

(1) Real Decreto 678/2016, de 16 de diciembre, por el que se aprueba la norma de calidad de la cerveza y de las bebidas de malta. Boletín Oficial del Estado, nº 304, 88520-88524.

(2) Reglamento de Ejecución nº 828/2014, 2014, relativo a los requisitos para la transmisión de información a los consumidores sobre la ausencia o la presencia reducida de gluten en los alimentos. Diario Oficial de la Unión Europea, L 228/5-L 228/8.

Liposomes as a cellular model to study of colloidal dynamics in confined and crowded environment

Irene Abelenda-Núñez¹, Francisco Ortega^{1,2}, Ramón G. Rubio^{1,2}, Eduardo Guzmán^{1,2}

¹*Departamento de Química Física, Universidad Complutense de Madrid, Ciudad Universitaria s/n, Madrid, Spain.* ²*Instituto Pluridisciplinar, Universidad Complutense de Madrid, Paseo Juan XXIII, Madrid, Spain.*

Email:

irenabel@ucm.es

The high complexity of cells arises in part from the fact that many biological relevant process, e.g. biochemical reactions, signal transmission, gene expression or molecular recognition occurs under conditions in which the accessible free space is strongly reduced due to the emergence of macromolecular crowding and confinement [1]. The combination of crowding and confinement leads to anomalous motions that cannot be always easily rationalized in terms of the approaches used for describing the dynamics of free colloids. This affects the understanding of different biophysical-chemical aspects related to cellular processes, but also on the basis of many processes of scientific and technological interest. Therefore, the importance of the understanding of the dynamic response in biological systems has prompted the development of theoretical models and calculations that allow an accurate description of the mechanistic aspects associated with the motion of colloids and proteins within the cellular environment. This makes necessary a rational design of experimental tools to mimic the intracellular environment for obtaining a support that allows deepening on the understanding of the molecular bases governing the change of the dynamics of colloids within highly dense systems, that is, the dynamics in conditions that combine confinement and macromolecular crowding. Therefore, the study of diffusion in systems that mimic a cell can help to understand the diffusion of biomacromolecules within the cell cytoplasm. This can be done by analyzing the motion of spherical colloidal microparticles within the internal cavity of giant vesicles obtained by the electroformation method [2], which can be used as simplified cell models. Herein, the impact of three different aspects on the diffusion of the particles will be analyzed:

- (i) the available free volume;
- (ii) the chemical nature of the vesicle membrane, and
- (iii) the chemical nature of the encapsulated volume.

Figure 1 shows a sketch summarizing the main concepts of the here presented work.

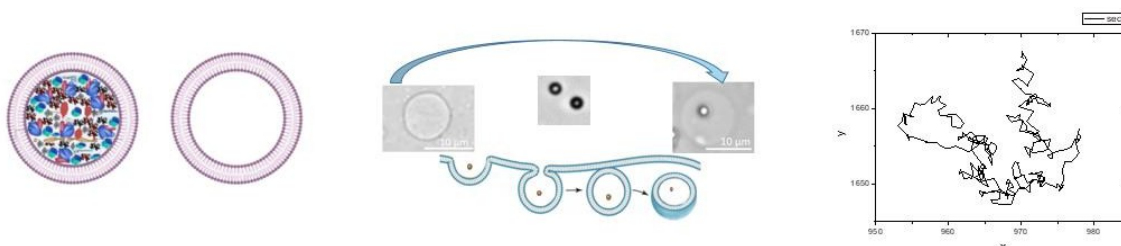


Figure 1. Sketch summarizing the different aspects involved in the work presented in this communication.

References

- [1] Zhou HX, Rivas G, Minton AP. Macromolecular crowding and confinement: biochemical, biophysical, and potential physiological consequences. *Ann. Rev. Biophys.* 37 (2008) 375-397.
- [2] Politano, T. J., Froude, V. E., Jing, B., & Zhu, Y. AC-electric field dependent electroformation of giant lipid vesicles. *Colloids Surf. B* 79 (2010) 75-82.

INVESTIGACIÓN DE SUSTANCIAS PSICODÉLICAS PARA LA SALUD MENTAL Y CONTROL DEL ESTRÉS

Autores. Danko Denchuk

email: d.denchuk.2019@alumnos.uric.es

Este proyecto gira en torno al estudio de sustancias psicoactivas y sus análogos que han sido prohibidas injustamente durante la guerra contra las drogas iniciada en los años 80 en EE. UU. y se extendió internacionalmente por razones políticas, aparición de la contracultura. Este miedo se debe a la creencia generalizada de que dichas sustancias no tienen potencial terapéutico y eran empleadas por personas de forma recreativa. A pesar de la fuerte represión se siguieron vendiendo en la calle. Causaron muertes por falta de control en la calidad del producto y mentiras acerca de las sustancias vendidas tras escapar de los laboratorios. Ganándose así una, no merecida, mala reputación.

El objetivo consiste en crear un diálogo abierto en la sociedad para el desarrollo de fármacos del futuro y apertura hacia una nueva forma de tratar afecciones como la depresión, la ansiedad crónica, trastorno de estrés postraumático, entre otras. No sólo legalizar las que mejor funcionan, también desarrollar mejores drogas, con menos efectos secundarios, más accesibles. En lugar de meter a todos en el mismo saco como hace Gran Bretaña o Países Bajos con su prohibición general y listas negras, darle un enfoque razonable. Por ejemplo, Ámsterdam tímidamente permite el uso de ciertos psicotrópicos, Portugal no criminaliza el uso de algunos o Harvard que tiene clubs universitarios dedicados a su estudio. Es absurdo tener que ir a otro país para experimentar, deberíamos poder disfrutarlo, incluso en el paisaje metropolitanomoderno de Madrid.

También tienen potencial de ayudar con la dependencia a otras drogas como el alcohol y el tabaco, ya que los psicodélicos, por lo general, no causan adicción ni dependencia. En unas pocas sesiones, incluso en una sola, se podrían apreciar mejoras drásticas en la vida de las personas. Con el apoyo de un terapeuta, psiquiatra, que serían las personas responsables con acceso a estas moléculas, se puede ayudar a los pacientes a tener una recuperación más rápida. Muy importante para el estado de ánimo de las personas tras el confinamiento, otros científicos ya las proponen como solución.

Además, debido a la toxicidad prácticamente nula de algunas de ellas (LSD o psilocibina, por ejemplo) se pueden emplear de forma recreativa, ayudando a disfrutar de experiencias nuevas en ciertos lugares que podrían ser fácilmente acondicionados para su uso seguro. Sin embargo, pueden ser abusadas como cualquier otra sustancia, legal, ilegal o con prescripción, pero debido a su naturaleza inofensiva, es difícil o incluso imposible sufrir una sobredosis, como mucho un susto. La tolerancia y la profundidad de los efectos limita su uso de forma natural.

Como estudiante de ingeniería de tecnologías industriales tengo cierta base científica. He dedicado gran parte de mi tiempo libre durante el último año a la investigación con cierto rigor y profundidad de estas sustancias. Estoy escribiendo un trabajo más extenso con los resultados obtenidos. Se trata de sustancias sintéticas o semisintéticas que pueden ser producidas de forma sostenible, siendo accesibles y seguras para la gran mayoría de personas.

Hoy en día vivimos desconectados de los productos que compramos y consumimos a diario, incluida la abundante información que recibimos, todo está contenido detrás de una cortina de humo y es fácil de manipular en detrimento del consumidor. *Hay que democratizar la química.*

Referencias

- PiHKAL: A Chemical Love Story. Alexander Shulgin, Ann Shulgin. 1991.
- TiHKAL: The Continuation. Alexander Shulgin, Ann Shulgin. 1997.

Agradecimientos

Hamilton Morris, Albert Hoffman y Alexander Shulgin como principales desencadenantes de este estudio. Chemical Planet EU por proveer las muestras analizadas durante la investigación.