

Ciencias Experimentales e Ingeniería

Josefa Ortiz Bustos  
Directora

**LIBRO DE ABSTRACTS**  
VII Jornada de Promoción a la Investigación Básica  
para Estudiantes de Ciencias e Ingenierías

ISBN: 978-84-09-52784-7

## LIBRO DE ABSTRACTS

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

20 y 21 de abril de 2023

Universidad Rey Juan Carlos

## ÍNDICE

<b>COMITÉ ORGANIZADOR</b> .....	4
<b>ENTIDADES ORGANIZADORAS</b> .....	5
<b>PATROCINADOR</b> .....	5
<b>PROGRAMA DE LA JORNADA</b> .....	6
<b>PONENCIAS INVITADAS</b> .....	9
<b>COMUNICACIONES ORALES</b> .....	18
<b>COMUNICACIONES FLASH</b> .....	41
<b>COMUNICACIONES PREMIADAS</b> .....	51

## COMITÉ ORGANIZADOR

- Josefa Ortiz Bustos, directora de la Jornada
- Diana Díaz García, secretaria de la Jornada
  
- Santiago Gómez Ruiz
- Yolanda Pérez Cortés
- Isabel del Hierro Morales
- Sanjiv Prashar
- Miguel Díaz Sánchez
- Javier Álvarez Conde
- José Manuel Méndez Arriaga
- Helena Pérez del Pulgar Villena
- Victoria García Almodóvar
- Carmen Garrido Gómez
- Julia Díaz Magdaleno

## ENTIDADES ORGANIZADORAS

- Universidad Rey Juan Carlos. Vicerrectorado de Comunidad, Campus Cultura y Deporte



- Real Sociedad Española de Química, Sección Territorial de Madrid (RSEQ-STM).



## PATROCINADOR

- Escuela Superior de Ciencias Experimentales y Tecnología.



## PROGRAMA DE LA JORNADA

### Jueves 20 de abril

9:30-9:45 - Presentación de la jornada y apertura. Prof. Alejandro Ureña, Director de la ESCET, Prof. Ernesto de Jesús, Presidente RSEQ-STM, Dra. Josefa Ortiz-Bustos, Directora de la Jornada, Dra. Diana Díaz García, Secretaria de la Jornada.

9:45-10:30 – [MATERIALES PARA LA ADMINISTRACIÓN DE FÁRMACOS](#). Dra. Margarita Darder. Científica Titular del Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid.

10:30-11:15 – [POKÉMOF: ¡CATALIZA CON TODOS!](#) Dr. Sergio Carrasco. Investigador postdoctoral en IMDEA Energía.

11:15-11:45 – **Pausa café**

11:45-12:30 – [TRATAMIENTO DE AGUA Y AGUAS RESIDUALES MEDIANTE PROCESOS DE OXIDACIÓN AVANZADA BASADOS EN RADICALES SULFATO](#). Dr. Jorge Rodríguez-Chueca. Profesor Titular de la Universidad Politécnica de Madrid.

12:30-13:30 – [DESAFÍOS Y OPORTUNIDADES DE COMPLEJOS METÁLICOS EN SISTEMAS BIOLÓGICOS](#). M<sup>a</sup> Concepción Gimeno Floría, Profesora de Investigación del Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea CSIC-UNIZAR. **PONENTE INVITADA PATROCINADA POR LA ESCET.**

13:30-15:30 – **Pausa comida**

15:30-17:15 – SESIÓN DE COMUNICACIONES ORALES

15:30-15:40 – O1: Adrián de la Fuente Ballesteros (Univ. Valladolid - Instituto CINQUIMA)

15:40-15:50 – O2: Andrés Verde Domínguez (Univ. Valladolid)

15:50-16:00 – O3: Alejandro Iglesias Jiménez (UCM)

16:00-16:05 - Turno de preguntas

16:05-16:15 – O4: Irene Gutiérrez Cabello (URJC)

16:15-16:25 – O5: Antonio Andrés García Valdivia (UGR)

16:25-16:35 – O6: Lourdes del Álamo Rodríguez (UCM)

16:35-16:40 – Turno de preguntas

16:40-16:50 – O7: Diego García Matesanz (UCM)

16:50-17:00 – O8: Marianela Gómez Toledo (UCM)

17:00-17:05 – Turno de preguntas

17:05-17:30 – Sesión de Comunicaciones Flash

17:05-17:10 – F1: Irene Villarejo Ávila (URJC)  
17:10-17:15– F2: Andrés Solana Bello (CEU San Pablo)  
17:15-17:20 – F3: Alejandra Galán Carrasco (URJC)  
17:20-17:25 – F4: Natalia de la Torre Gordo (CEU San Pablo)  
17:25-17:30 – Turno de preguntas  
17:30-18:00– SESIÓN DE COMUNICACIONES ORALES  
17:30-17:40 – O9: Miguel Camarillo Sánchez (UCM)  
17:40-17:50 – O10: Óscar González Hervás (UCM)  
17:55-18:00 - Turno de preguntas

### **Viernes 21 de abril**

9:30-10:15 – [EJE INTESTINO-CEREBRO: ABORDAJE PRECLÍNICO DE SUS TRASTORNOS Y DE SUS POSIBLES SOLUCIONES](#). Prof. Raquel Abalo Delgado. Catedrática de Farmacología de la URJC.

10:15-11:00 – [SISTEMAS CATALÍTICOS BASADOS EN NANOPARTÍCULAS: DE LA INVESTIGACIÓN BÁSICA A LA APLICACIÓN](#). Dr. Israel Cano Rico. Profesor Contratado Doctor. Universidad Complutense de Madrid.

11:00-11:30 – **Pausa café**

11:30-12:15 – [EL PAPEL DE LOS MICROORGANISMOS EN EL PACTO VERDE EUROPEO 2030](#). Dra. Natalia González Benítez. Profesora Titular de Microbiología de la Universidad Rey Juan Carlos.

12:15-13:00 – [DERIVADOS DE AZUL DE PRUSIA Y SUS APLICACIONES ELECTROQUÍMICAS EN EL ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA Y LA RECUPERACIÓN DE METALES](#). Dr. Rafael Trócoli. Investigador EMERGIA en la Universidad de Córdoba.

13:00-14:00 – SESIÓN DE COMUNICACIONES ORALES

13:00-13:10 – O11: Serine Soudani (UPM)

13:10-13:20 – O12: Diana Murillo Criado (URJC) y Isabel Serrano Gómez (URJC)

13:20-13:30 – O13: Noelia de la Cruz (UPM)

13:30-13:35 – Turno de preguntas

13:35-13:45 – O14: Samuel Blázquez Fernández (UCM)

13:45-13:55 – O15: Adelina Sonia Petcu (CSIC-UCM)

13:55-14:05 – O16: María Hernández Rivas (Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros)

14:05-14:15 – Turno de preguntas

14:15-15:30 – **Pausa comida**

15:30-16:40 – SESIÓN DE COMUNICACIONES ORALES

15:30-15:40 – O17: Samuel Morales Cámara (UGR)

15:40-15:50 – O18: Lucía Del Castillo González (UPM)

15:50-16:00 – O19: Ángela Campo Peña (ICTP-CSIC)

16:00-16:05 – Turno de preguntas

16:05-16:15 – O20: Gabriel Sánchez Cano (Canal de Isabel II y el Instituto IMDEA Energía)

16:15-16:25 – O21: Alejandro Pérez Domínguez (URJC)

16:25-16:35 – O22: Irene Rincón Lucas (IMDEA Energía)

16:35-16:40 – Turno de preguntas

16:40-17:05 – Sesión de Comunicaciones Flash

16:40-16:45 – F5: Paula Mediavilla Hernández (UCM)

16:45-16:50 – F6: Leonardo Oliveira Amaral (URJC)

16:50-16:55 – F7: Elena Vicente García (UPM / CTB-UPM)

16:55-17:00 – F8: Francisco Aguilar Rico (UAM)

17:00-17:05 – F9: Rubén Serrano (IMDEA Energía)

17:10-17:30 – Clausura de la jornada y entrega de premios



# PONENCIAS INVITADAS

## MATERIALES PARA LA ADMINISTRACIÓN DE FÁRMACOS

**M. Darder**

*Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM), CSIC, c/ Sor Juana Inés de la Cruz 3, 28049 Madrid*

[darder@icmm.csic.es](mailto:darder@icmm.csic.es)

La existencia de enfermedades, causadas por factores externos como los agentes patógenos o por disfunciones internas, han puesto y siguen poniendo en peligro la salud de la población. La farmacología propone combatirlos mediante el uso de productos farmacéuticos (medicamentos) y una de sus ramas, la farmacocinética, estudia cómo se produce la absorción de fármacos y la evolución de su concentración en el organismo. Este punto es clave ya que la concentración de un medicamento en sangre debe mantenerse dentro de lo que se denomina ventana terapéutica, con un límite de concentración superior por encima del cual el fármaco podría causar un efecto tóxico y un límite mínimo bajo el cual el fármaco no muestra eficacia. Desde mediados de los años 50 del siglo pasado, se comenzaron a desarrollar materiales que pudieran servir como vehículo para la administración de fármacos garantizando su liberación controlada [1]. Así, tras la administración de una sola dosis, se produce una liberación gradual del principio activo, manteniendo su concentración dentro del nivel terapéutico por un largo tiempo y minimizando los efectos secundarios. En esta comunicación se pretende mostrar cómo el diseño y la síntesis de materiales pueden ser claves en la optimización de la administración de fármacos a través de distintas rutas. Para ello se han propuesto multitud de materiales y nanomateriales, tanto de origen orgánico como inorgánico, que pueden ser aplicados para la administración de fármacos a través de las rutas más comunes: intravenosa, oral, transdérmica, etc. Además, se presentarán distintos materiales de tipo bionanocomposite desarrollados en el grupo de Materiales Nanoestructurados, Híbridos, Biohíbridos y Porosos del ICMM-CSIC, que están basados en la incorporación de fármacos en arcillas naturales o sintéticas y su posterior encapsulación en matrices biopoliméricas, principalmente polisacáridos (Fig. 1). En estos materiales la liberación del fármaco se produce combinando dos mecanismos: difusión desde el sólido inorgánico y liberación debida a la degradación del biopolímero. Se mostrarán además otros ejemplos de la potencial aplicación de materiales bionanocomposite en el ámbito de la salud como apósitos para heridas, adyuvantes en vacunas o terapia génica [2,3].

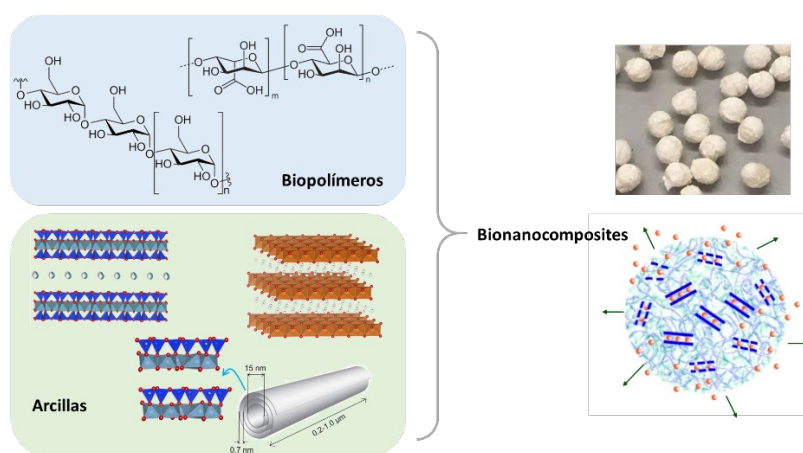


Fig. 1. Materiales bionanocomposite, basados en la combinación de biopolímeros y arcillas, como vehículos para la liberación controlada de fármacos.

### Referencias

- [1] H. Park, A. Otte, K. Park, Evolution of drug delivery systems: From 1950 to 2020 and beyond, *Journal of Controlled Release* 2022, 342, 53–65.
- [2] A.C.S. Alcântara, M. Darder, Building up functional bionanocomposites from the assembly of clays and biopolymers, *Chemical Record*, 2018, 18, 696–712.
- [3] E. Ruiz-Hitzky, M. Darder, B. Wicklein, F.A. Castro-Smirnov, P. Aranda, Clay-based biohybrid materials for biomedical and pharmaceutical applications, *Clays and Clay Minerals*, 2019, 67, 44–58.

## POKÉMOF: CATALYZE WITH 'EM ALL!

**Sergio Carrasco**

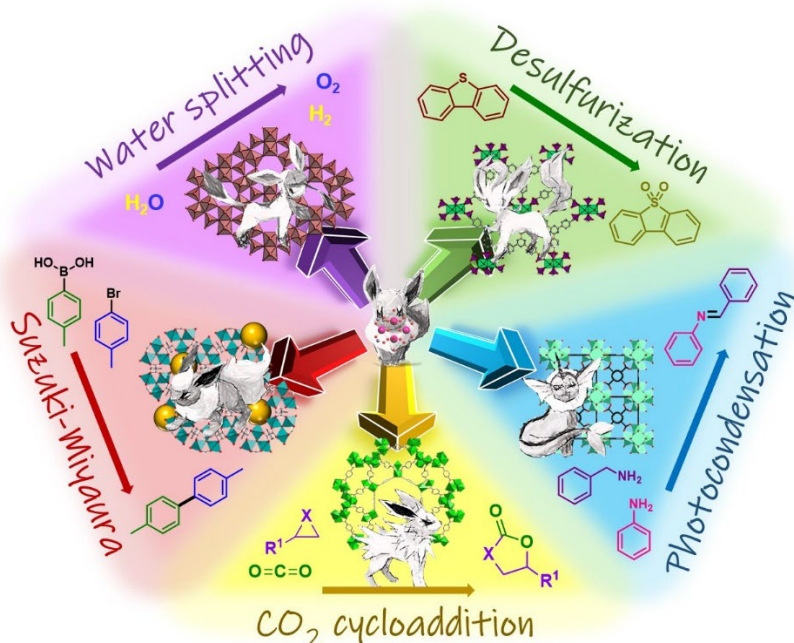
Advanced Porous Materials Unit, IMDEA Energy. Avda. Ramón de la Sagra 3, 28935 Móstoles, Spain

[sergio.carrasco@imdea.org](mailto:sergio.carrasco@imdea.org)

Welcome to the world of pokéMOF. This world is plenty of polymers called pokéMOF. For some people, they are just new metal-organic hybrid structures to collect. Others use them for sensing, storage or biomedicine. Myself...I study pokéMOF as a profession. This presentation is an overview of the most relevant results and contributions of Dr. Carrasco to this world during his scientific adventure.

The general activity of pokéMOF is explored from the point of view of coordinatively unsaturated sites (CUS) as catalytic active centers. In order to improve both the stability and performance of these polymers, different transformations can be considered: a) ligand modification, to introduce new CUS and/or catalytically active moieties; b) impregnation with different species, e.g. cations that can be further reduced to metal nanoparticles within the pores and/or onto their surface; c) decreasing the particle size by modifying synthetic conditions, e.g. using microwave radiation.

A few catalytic reactions of social interest have been selected (Figure 1):<sup>1-3</sup> i) CO<sub>2</sub> capture and conversion using Porous Coordination Networks (PCNs); ii) green H<sub>2</sub> generation from photocatalytic water splitting using IMDEA Energy Frameworks (IEFs); iii) generation of new C-C bonds using a composite based on Pd nanoparticles and Materials Institute Lavoisier (MILs); iv) new C=N bonds with a Pd(II)-modified PCN upon amines condensation; iv) desulfurization of diesel mixtures and oils using a novel Ti-porphyrin pokéMOF.



**Figure 1.** Selected pokéMOF-based catalytic reactions.

- [1] S. Carrasco; *et al.* Fast and robust synthesis of metalated PCN-222 and their catalytic performance in cycloaddition reactions with CO<sub>2</sub>. *Organometallics* **2019**, 38: 3429-3435.
- [2] A. Valiente; S. Carrasco; *et al.* Aerobic homocoupling of arylboronic acids catalyzed by regenerable Pd(II)@MIL-88B-NH<sub>2</sub>(Cr). *ChemCatChem* **2019**, 11: 3933-3940.
- [3] A. Bermejo-López; S. Carrasco; *et al.* Selective synthesis of imines by photo-oxidative amine cross-condensation catalyzed by PCN-222(Pd), *ACS Sustain. Chem. Eng.* **2021**, 9: 14405-14415.

## TRATAMIENTO DE AGUA Y AGUAS RESIDUALES MEDIANTE PROCESOS DE OXIDACIÓN AVANZADA BASADOS EN RADICALES SULFATO

**J. Rodríguez-Chueca**

*Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Universidad Politécnica de Madrid. Calle José Gutiérrez Abascal 2, 28006, Madrid.*

[jorge.rodriguez.chueca@upm.es](mailto:jorge.rodriguez.chueca@upm.es)

La actual crisis del agua ha suscitado en los últimos años un creciente interés por la búsqueda de recursos no convencionales, con el objetivo de reducir el estrés al que están sometidas las masas de agua dulce. En este contexto, la reutilización de aguas residuales regeneradas se considera una alternativa eficaz para aumentar significativamente el volumen de agua disponible. Sin embargo, la aparición de contaminantes de preocupación emergente (CPE) y de contaminantes biológicos (concretamente patógenos y genes de resistencia a los antibióticos (ARG)) en los efluentes tratados por las estaciones depuradoras de aguas residuales (EDAR) convencionales puede suponer un hándicap para su reutilización (1).

En respuesta a este problema actualmente se trabaja en el desarrollo de tratamientos terciarios capaces de abordar la eliminación total o parcial de una manera simultánea tanto de gérmenes patógenos como otros se han desarrollado tratamientos terciarios no convencionales. En los últimos años, los procesos de oxidación avanzada (AOPs) se han convertido en un tratamiento terciario plausible para las EDAR al alcanzar una alta eficiencia en la eliminación de la contaminación orgánica y microbiológica de las aguas residuales. Una de las principales de los AOPs es que no se ha observado formación de concentraciones significativas de subproductos de la desinfección (DBPs) como ocurre en los procesos de desinfección convencionales, como en la cloración. Los AOPs basados en radicales sulfato (SR-AOPs) están demostrando ser una buena alternativa debido a las numerosas ventajas de los radicales sulfato ( $\text{SO}_4^{\cdot-}$ ) respecto a los  $\text{HO}^{\cdot}$ , como un mayor potencial de oxidación (2,5-3,1 V), mayor selectividad y eficiencia, y una reacción eficiente con compuestos orgánicos en un amplio rango de pH de 2-8, así como una mayor vida media de los radicales sulfato de 30-40  $\mu\text{s}$ , lo que les permite tener una transferencia de masa más estable y un mejor contacto con los compuestos diana (2). El peroximonosulfato (PMS;  $\text{HSO}_5^-$ ) es la especie más eficaz para la formación de radicales sulfato. La activación del PMS implica la generación tanto de  $\text{SO}_4^{\cdot-}$  como de  $\text{HO}^{\cdot}$ . Uno de los procesos más eficientes para la activación de PMS es a través de la aplicación de radiación UV, especialmente utilizando una longitud de onda de 254 nm, pero también se ha demostrado ampliamente eficaz el uso de metales de transición tanto en fase homogénea como heterogénea, actuando como catalizadores de la reacción.

El objetivo de este trabajo es profundizar en la aplicación de los SR-AOPs en la minimización de los riesgos que pueden estar asociados a la reutilización de las aguas residuales, como la presencia de gérmenes patógenos, CPEs y ARGs. Para ello se estudia la aplicabilidad de SR-AOPs mediante el uso de diferentes agentes oxidantes y activadores (radiación UV, temperatura, catalizadores homogéneos y heterogéneos), tanto a escala de laboratorio como a escala piloto y escala real,

### Referencias

- (1) Rodríguez-Chueca, J., della Giustina, S. V., Rocha, J., Fernandes, T., Pablos, C., Encinas, Á., Barceló, D., Rodríguez-Mozaz, S., Manaia, C. M., y Marugán, J. (2019). Assessment of full-scale tertiary wastewater treatment by UV-C based-AOPs: Removal or persistence of antibiotics and antibiotic resistance genes? *Sci. Total Environ.*, 652, 1051–1061.
- (2) Wang, J., y Wang, S. (2018). Activation of persulfate (PS) and peroxymonosulfate (PMS) and application for the degradation of emerging contaminants. *Chem. Eng. J.*, 334, 1502–1517.

### Agradecimientos

Jorge Rodríguez Chueca agradece a la Comunidad de Madrid por la financiación a través del acuerdo pluriannual con la Universidad Politécnica de Madrid en la línea de actuación Programa de Excelencia del Profesorado Universitario. Además, al proyecto PHOTORAS (PID2021-128165OA-I00) financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y al proyecto DIGIT4WATER (TED2021-129969A-C32) financiado por MCIN/AEI /10.13039/501100011033 y por la Unión Europea NextGenerationEU/PRTR.

## DESAFÍOS Y OPORTUNIDADES DE COMPLEJOS METÁLICOS EN SISTEMAS BIOLÓGICOS

**M. Concepción Gimeno**

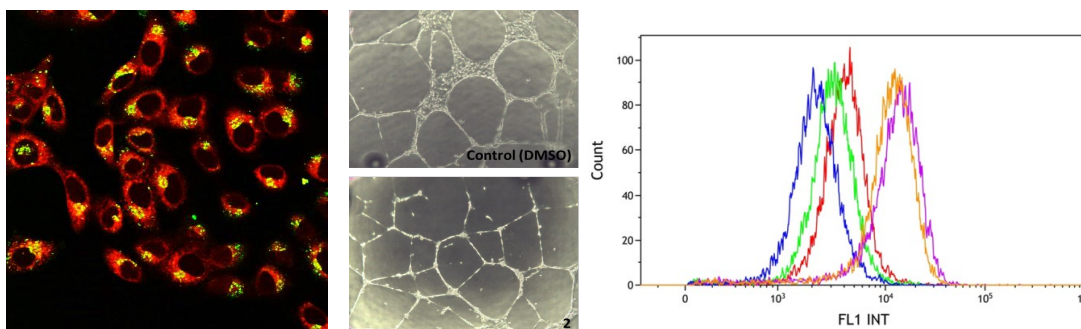
*Instituto de Síntesis Química y Catálisis Homogénea (ISQCH), CSIC-Universidad de Zaragoza, C/Pedro Cerbuna 12, 50009 Zaragoza, España*

[gimeno@unizar.es](mailto:gimeno@unizar.es)

La química biorganometálica ofrece numerosas oportunidades para el diseño de agentes terapéuticos con propiedades biológicas superiores a las que presentan muchos compuestos orgánicos. Aunque el cisplatino se ha convertido en un estándar global en el uso de medicamentos metálicos para tratar varios tumores, tiene varias desventajas como la presencia de efectos secundarios no deseados y el desarrollo de resistencia. Los compuestos de oro han surgido como una alternativa viable debido a sus excepcionales propiedades anticancerígenas que presentan.

Esta presentación destacará el diseño de varios tipos de complejos de oro bioactivos que han sido desarrollados en nuestro grupo. Se han utilizado varias estrategias para lograr una mejor actividad y selectividad. Por un lado, se han utilizado diferentes tipos de ligandos para obtener complejos con mejor estabilidad, solubilidad y actividad. Los aminoácidos y péptidos se han utilizado como ligandos biocompatibles útiles para dirigir el centro de oro(I) a su diana biológica. Por otro lado, la presencia de dos fragmentos metálicos ejerce un efecto cooperativo en la actividad citotóxica y las propiedades de los complejos finales, lo que podría superar la resistencia celular debido a la posibilidad de combinar los diferentes mecanismos intrínsecos de acción de cada fragmento metálico.

Además, la presencia de dos metales distintos con diferentes propiedades podría llevar al desarrollo de agentes teragnósticos. La integración del diagnóstico y la terapia se ha propuesto como una posible manera de facilitar la transformación de la medicina convencional en medicina de precisión o personalizada. Por lo tanto, el diseño de agentes de imagen que se puedan combinar con medicamentos para hacerlos visibles, cuantificables y rastreables a lo largo del tiempo permitirá el desarrollo y la optimización de tratamientos específicos y más efectivos.



### Agradecimientos

Esta investigación ha sido financiada por la Agencia Estatal de Investigación (AEI), PID2019-104379RB-C21 / AEI / 10.13039/501100011033 y Gobierno de Aragón-Fondo Social Europeo (Grupo de investigación E07\_23R).



## EJE INTESTINO-CEREBRO: ABORDAJE PRECLÍNICO DE SUS TRASTORNOS Y DE SUS POSIBLES SOLUCIONES

**Raquel Abalo**

*Depto. CC. Básicas de la Salud, Universidad Rey Juan Carlos (URJC)*

*Grupo de Investigación de Alto Rendimiento en Fisiopatología y Farmacología del Sistema Digestivo (NeuGut-URJC)*

*Unidad Asociada I+D+i del Instituto de Química Médica (IQM) del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC)*

*Grupo de Trabajo de Ciencias Básicas en Dolor y Analgesia de la Sociedad Española del Dolor*

*Grupo de Trabajo de Cannabinoides de la Sociedad Española del Dolor*

[raquel.abalo@urjc.es](mailto:raquel.abalo@urjc.es)

El Grupo de Investigación de Alto Rendimiento en Fisiopatología y Farmacología del Sistema Digestivo de la Universidad Rey Juan Carlos (NeuGut-URJC) estudia las alteraciones que se producen en el funcionamiento del eje intestino-cerebro, asociadas a enfermedades de origen gastrointestinal, cerebral o sistémicas, o debidas a los tratamientos médicos, incluidos los tratamientos farmacológicos. Para ello, NeuGut-URJC emplea modelos animales que tratan de mimetizar dichas alteraciones y evalúa las posibles estrategias que pueden prevenir y/o aliviar dichos trastornos. Estas estrategias incluyen desde modificaciones dietéticas al uso de fármacos y nutracéuticos.

Uno de los parámetros de estudio de más interés para NeuGut-URJC, que es necesario valorar adecuadamente cuando se estudia el eje intestino-cerebro, es la motilidad gastrointestinal (GI). La motilidad GI depende, fundamentalmente, del funcionamiento coordinado de los componentes del tubo digestivo (músculo, neuronas mientéricas, células intersticiales de Cajal), pero esta función se modula por la interacción con el cerebro a través de las conexiones nerviosas y hormonales del eje. Las neuronas mientéricas controlan intrínsecamente la motilidad del tubo digestivo, lo que justifica el estudio de la motilidad de preparaciones aisladas en baño de órganos (*in vitro*). Sin embargo, los estudios *in vivo* no invasivos, como los que NeuGut-URJC realiza usando métodos radiográficos, son especialmente interesantes porque permiten un mejor ajuste a la regla de las 3Rs y son más traslacionales.

Uno de los trastornos del eje intestino-cerebro más prevalentes y difíciles de diagnosticar es el síndrome de intestino irritable (SII), un trastorno muy prevalente caracterizado por dolor abdominal, cambios en el hábito defecatorio (desde estreñimiento a diarrea), mayor permeabilidad de la mucosa intestinal y alteraciones emocionales (depresión, ansiedad). La mayoría de los modelos animales que se han desarrollado son modelos de SII con diarrea, y se basan, o bien en las alteraciones que se producen tras una irritación/inflamación/infección del colon, o bien en las que se producen tras diferentes tipos de estrés en la edad adulta o neonatal. Los escasos modelos disponibles de SII con estreñimiento emplean fármacos opioides o modificaciones dietéticas.

Aunque el SII es más prevalente en mujeres, en preclínica se ha estudiado tradicionalmente en machos. En ausencia de patología, también hay dimorfismo sexual, como NeuGut-URJC ha demostrado recientemente en sus estudios de sensibilidad visceral, motilidad gastrointestinal y comportamiento emocional en rata, aunque los efectos dependen mucho de las condiciones experimentales concretas empleadas. El próximo paso será estudiar estos mismos parámetros en modelos de SII, tanto en machos como en hembras.

El SII es un trastorno muy complejo y, más allá del sexo, hay que considerar el factor género. Aun así, los estudios preclínicos son esenciales para conocer las causas y los mecanismos biológicos de ésta y otras enfermedades, y para ensayar estrategias que puedan prevenirlas y/o tratarlas.

### **Agradecimientos:**

- Grupo NeuGut-URJC, estudiantes de TFG y prácticas externas y colaboradores nacionales e internacionales.
- Proyecto PID2019-111510RB-I00 financiado por MICIN/AEI/ 10.13039/501100011033. Proyecto NACfightsCOVID-19 financiado por la convocatoria COVID-19 URJC-Banco de Santander. Proyecto SC-LEARNING-CM (REACT-CAM-EU) y contratos INVESTIGO-URJC 2023 (AI-37, AI-67, AI-89, AI-93), financiados por la Comunidad de Madrid. Proyectos AEG-ASENEM 2021 y GEMD-Allergan 2017.

## SISTEMAS CATALÍTICOS BASADOS EN NANOPARTÍCULAS: DE LA INVESTIGACIÓN BÁSICA A LA APLICACIÓN

Israel Cano

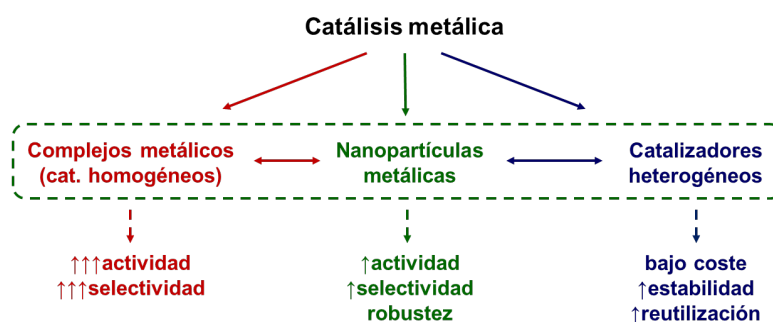
Departamento de Química Inorgánica, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid, Spain.

[iscano@ucm.es](mailto:iscano@ucm.es)

La catálisis es un área con una enorme importancia en la industria química. De hecho, actualmente, 2/3 de los productos químicos y ~90% de los procesos químicos implican reacciones catalíticas. Así, la catálisis se divide tradicionalmente en tres subcampos: homogénea, heterogénea y biocatálisis. No obstante, existen catalizadores como las nanopartículas (NPs) que son difíciles de incluir únicamente en uno de estos grupos. Las NPs son partículas con un diámetro comprendido entre 1 y 100 nm. Se observan dos efectos de superficie fundamentales al reducir el tamaño de un material a escala nanométrica: un incremento del área superficial relativa y un aumento en el número de átomos superficiales. Como consecuencia, se produce un aumento en la reactividad química de un material al reducir su tamaño a la nanoescala, lo cual está directamente relacionado con la actividad catalítica. Además, hay que considerar que, en muchas ocasiones, la formación de nanopartículas metálicas (MNPs) requiere del uso de estabilizantes que se unen a su superficie y previenen la aglomeración. De este modo, la superficie de las MNPs se puede funcionalizar con estabilizantes que permiten ajustar sus propiedades, entre ellas las catalíticas.<sup>1</sup>

¿Y dónde ubicamos las nanopartículas en la clasificación de catalizadores? ¿Dentro de los catalizadores homogéneos o heterogéneos? Pues, realmente, en ninguno de los dos. De hecho, existen fundamentalmente 3 tipos de catalizadores metálicos: complejos metálicos (catalizadores homogéneos), partículas metálicas inmovilizadas en soportes sólidos (catalizadores heterogéneos) y MNPs:<sup>2</sup>

- Complejos metálicos: Elevadas actividades y selectividades debido a su facilidad de modificación con ligandos.
- Partículas metálicas inmovilizadas en soportes sólidos: Baratos, estables y reutilizables, pero más difícil modificación. El comportamiento está influenciado por el soporte, su acidez y el tamaño de partícula.
- MNPs: En la frontera entre ambas áreas. En cierto modo, “combinan” las propiedades de los catalizadores homogéneos y heterogéneos: actividad, selectividad, estabilidad y ajuste del comportamiento catalítico mediante el uso de ligandos.



¿Es esto cierto? Es decir, ¿Se encuentran las MNPs en la frontera entre la catálisis homogénea y heterogénea y combinan propiedades de ambos tipos de catalizadores? Con el fin de averiguarlo, vamos a realizar una comparación entre diferentes sistemas catalíticos que nos permitirá establecer las características principales de los catalizadores basados en nanopartículas metálicas. Una vez hayamos ubicado las MNPs dentro del área de la catálisis, describiremos cómo los investigadores consiguen ajustar las propiedades catalíticas de éstas. De este modo, mostraremos en qué consiste la investigación básica centrada en el uso de MNPs como catalizadores, y en cómo conecta con las aplicaciones catalíticas reales de las mismas.

### Referencias

1. I. Cano, L.M. Martínez-Prieto, B. Chaudret, P.W.N.M. van Leeuwen, *Chem. Eur. J.* **2017**, *23*, 1444.
2. I. Cano, P.W.N.M. van Leeuwen. In: *Recent Advances in Nanoparticle Catalysis (book series: Molecular Catalysis I)*. Chapter 11 – *Selective Hydrogenation of Aldehydes and Ketones*. Springer, 2020. ISBN: 978-3-030-45822-5.

### Agradecimientos

Prof. Pedro Pérez, Prof. Piet W.N.M. van Leeuwen, Prof. Bruno Chaudret, Prof. Jairton Dupont, Prof. Rafael Valiente.

## EL PAPEL DE LOS MICROORGANISMOS EN EL PACTO VERDE EUROPEO 2030

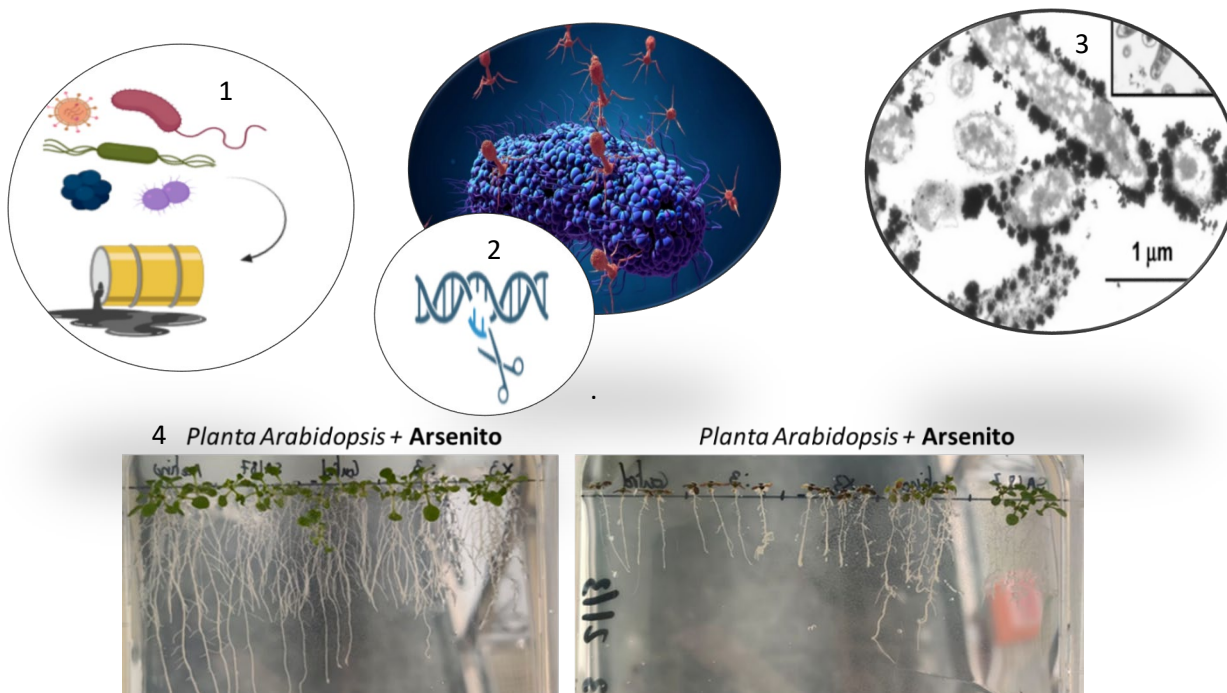
Natalia González-Benítez<sup>1</sup>, M<sup>a</sup> del Carmen Molina<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Área de Biodiversidad. ESCET. URJC

[natalia.gonzalez@urjc.es](mailto:natalia.gonzalez@urjc.es)

En el contexto actual de Cambio Climático y degradación permanente del medio ambiente, la Unión Europea ha planteado mediante el Pacto Verde Europeo que nuestro continente tenga un crecimiento circular y sostenible basado en una economía climáticamente neutra. En este escenario, los servicios ecosistémicos que pueden ofrecer los microorganismos son prioritarios. La amplia versatilidad metabólica microbiana y su fácil manipulación genética hacen que los microorganismos sean una buena herramienta ecológica y biotecnológica en diferentes ámbitos como la agricultura sostenible, la recuperación de zonas contaminadas y la biosíntesis de productos en el campo de la medicina y la industria en general.

En este trabajo se presentan algunos ejemplos centrándonos en la interacción microbioma-plantas. Desde la biología de sistemas, las plantas se consideran metaorganismos complejos constituidos por su genoma, el metagenoma microbiano y las interacciones entre ambos. El objetivo de la presentación aborda cómo la microbiología puede modificar el fenotipo y la respuesta de las plantas permitiendo su adaptación a las condiciones ambientales cambiantes y de estrés.



Con la bacteria *Acinetobacter* Sin la bacteria *Acinetobacter*  
 1.-Biodegradación microbiana de contaminantes. 2.- Enzimas microbianas para la edición génica en el campo de la medicina. Recuperación de metales mediante microorganismos. Biometalurgia. 4. Recuperación de plantas en zonas contaminadas inoculadas con bacterias promotoras del crecimiento (PGPB).

### Agradecimientos

Proyecto del Ministerio PID2021-127841OA-I00. Adaptación a la sequía en parientes silvestres de los cultivos: Una aproximación integradora.



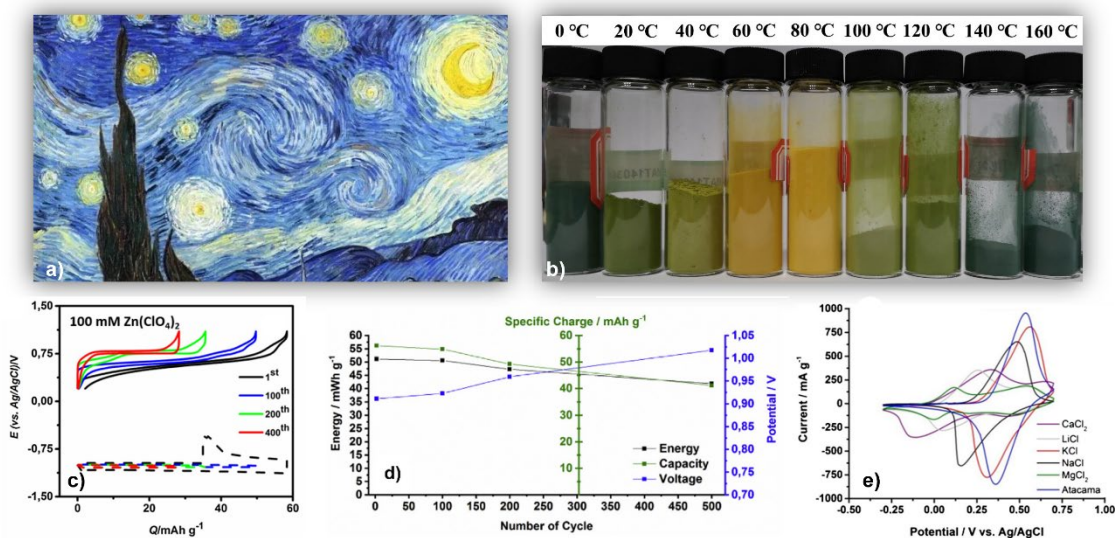
## **DERIVADOS DE AZUL DE PRUSIA Y SUS APLICACIONES ELECTROQUÍMICAS EN EL ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA Y LA RECUPERACIÓN DE METALES**

**Rafael Trócoli**

<sup>1</sup> *Departamento de Química Inorgánica e Ingeniería Química, Instituto Químico para la Energía y el Medioambiente (IQUEMA). Facultad de Ciencias, Universidad de Córdoba, Campus de Rabanales, 14071 Córdoba (Spain)*

[iq2trjir@uco.es](mailto:iq2trjir@uco.es)

Since the rediscovering of Prussian Blue Analogues (PBAs) as cathode materials for aqueous batteries by Colin D. Wessells et al. in 2011, these materials have attracted the attention of the scientific community mainly because of their excellent performances as cathode electrodes in sodium and potassium batteries. However, the potential applications of PBAs as insertion electrodes are vast and could be employed in alternative battery chemistries and other cations electrochemical insertion-based applications. In this communication, we briefly revisited the historical uses of Prussian Blue (Analogues). The last ten-year efforts carried out by our group to wider the PBAs applications and our contribution to improving the understanding of their electrochemical performances as Zinc/Magnesium cathode electrodes, their use for lithium recovery, or their capacity to intercalated Nickel/Cobalt for battery recycling are also presented. PBAs compositions ( $A_xM_1[M_2(CN)_6]_y \cdot zH_2O$ ) can be modified by using a different transition metal as  $M_1$ . Water content, vacancy presence, oxidation state, and morphological appearance can also be modified by controlling the synthesis conditions (chelating agent, temperature, flow...). Here, we report on preparing four different PBAs ( $M_1 = Cu, Mn, Ni, Co$ ) and their utilization in multiple electrochemical applications. Classic battery parameters like specific capacity, capacity fade, efficiency, or rate performance are analyzed. Less common properties like selectivity, cations coadsorption, structural/electrolyte cations exchange, or proton effect in the electrochemical behavior are studied in detail. Multiple structural characterization techniques, XRD, STEM-EDX, XPS, ICP-MS... were employed to unequivocally correlate the electrochemical profiles obtained with the desired cation intercalation into the structure.



**Fig.1** (a) Starry Night by Van Gogh painted with Prussian Blue, (b) Color evolution of Nickel Prussian Blue Analogue upon synthesis temperature. (c) Effect of Zn electrolyte solvent in the CuHCF stability, (d) Main battery properties upon cycling an aqueous CuHCF-Zn battery, and (e) Cyclic voltammetry of NiHCF in different aqueous electrolytes showing preference  $Na^+/K^+$  intercalation.

**Acknowledgments:** The author thanks the funding for the projects Emergia\_0153 and ProyExcel\_00330, PAIDI 2020 (Junta de Andalucía), and the project TED2021-129314A-100 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and European Union NextGenerationEU/PRTR.

# COMUNICACIONES ORALES

## **O1: POTENTIAL MIGRATION OF ACARICIDES FROM STAMPED BEESWAX TO HONEY: A PILOT CASE STUDY**

**A. Fuente-Ballesteros, A.M Ares, J. Bernal**

*Analytical Chemistry Group (TESEA), I.U. CINQUIMA, University of Valladolid, Paseo de Belén, 5, 47011, Valladolid (Spain)*

[adrian.fuente.ballesteros@uva.es](mailto:adrian.fuente.ballesteros@uva.es)

There is no denying that the use of stamped wax helps the bees to build honeycombs. However, there is evidence that, in most cases, beeswax sheets have substantial amounts of residues of xenobiotics, which are mainly acaricide compounds used against the *Varroa destructor* mite. For this reason, it is necessary to control the quality of the wax sheets that are placed into the beehive. Nowadays, there are some manufacturers who supply decontaminated wax sheets, although, previous studies have shown that acaricide residues were found in these waxes. Not only does this problem affect the bees, but there is also another issue concerning the migration of pesticides from stamped wax to other bee products, particularly, honey. This implies that honey could be contaminated, which would represent a potential risk to food safety. To determine the degree to which acaricides can be transferred from the stamped wax to the honey, a pilot migration study has been carried out. An experiment was designed consisting of placing beeswax spiked with acaricides in contact with commercial honey in an incubator, setting temperature and agitation conditions, and examining the residues present in both matrices over time. The isolation of the analytes from wax involved the use of liquid-liquid extractions, and special sorbents to remove the lipids present in the wax that causes noteworthy matrix effects. The extracts were then analyzed by gas chromatography with mass spectrometry detection. Monitoring of the samples showed that the initial concentration level present in the contaminated beeswax significantly influences the transfer to honey. It was observed that coumaphos was the only acaricide that migrated from the beeswax to the honey, but not significantly, since the concentration found was lower than the maximum residue limit allowed by the European Union in bee products.

### **Acknowledgments**

Authors gratefully acknowledge financial support from the National Plan for Scientific and Technical Research and Innovation 2013–2016, National Institute for Agricultural and Food Research and Technology-INIA–FEDER (Spain), grant number RTA2017-00004-C02-02. Adrián Fuente-Ballesteros thanks the University of Valladolid (Spain) for his PhD grant.

## 02: THE DUPLICATION OF THE MICROSOLVATED COMPLEXES OF *para*-ANISALDEHYDE

A. Verde<sup>1</sup>, J.C. López<sup>1</sup>, S. Blanco<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química Física y Química Inorgánica, IU CINQUIMA, Facultad de Ciencias, Universidad de Valladolid, 47011 Valladolid, España.

[andres.verde@estudiantes.uva.es](mailto:andres.verde@estudiantes.uva.es)

Anisaldehydes are natural products found in the anise seed (*Pimpinella anisum* L.), being frequently used in the pharmaceutical, food and cosmetic industries. These compounds consist of a phenyl ring substituted with an aldehyde and a methoxy functional groups. The case of the *para* isomer is extremely interesting because the functional groups are located on opposite sides of the ring, allowing a better understanding of the importance of each group. To evaluate the activity- structure relationship of this biomolecule, the conformational panorama of *p*-anisaldehyde (paa) has been experimentally investigated in the gas phase using Fourier transform microwave spectroscopy techniques in combination with supersonic jets. Two rotamers have been detected in the 2 to 8 GHz rotational spectrum and unambiguously assigned to the two possible relative orientations of the functional groups. The detection of the <sup>13</sup>C and <sup>18</sup>O isotopologues of both conformers allowed the determination of their experimental structures.

In addition, the paa-(H<sub>2</sub>O)<sub>1-3</sub> complexes have been investigated to better understand how this compound is found in nature and the importance of water in its biological functions. A total of eight microsolvated complexes, four for each conformer, have been detected in the 2 to 8 GHz rotational spectrum, reflecting the preference of water binding to the aldehyde group instead of the methoxy one. A conscious analysis of the intermolecular interactions that stabilized the complexes has been done employing high level quantum chemical calculations. It comes out that the addition of water molecules increase the interacting energy of the hydrogen bonds and decrease the distance between the atoms involved. This behavior reflects the effect of  $\sigma$ -bond cooperativity, which appears in complexes that present groups acting as proton donor and acceptor.<sup>1</sup>

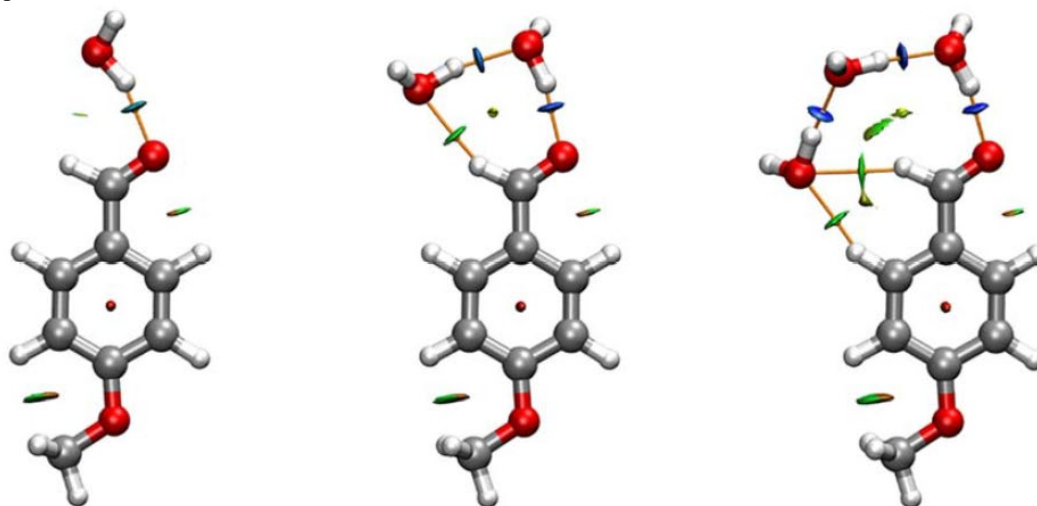


Figure 1: Non-covalent interactions and Bader's quantum of atoms in molecules analysis for three of the microsolvated complexes detected for the most stable paa conformer.

### References

<sup>1</sup> S. Blanco, P. Pinacho, J.C. López, "Hydrogen Bond Cooperativity in Formamide<sub>2</sub>-Water, a Model for Water Mediated Interactions" *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2016**, 128, 9477-9481.

### O3: NANOPARTÍCULAS DE SELENIO PARA POTENCIAR LAS TERAPIAS CONTRA EL CÁNCER BASADAS EN CISPLATINO

**A. Iglesias<sup>1</sup>, G. Artiaga<sup>1</sup>, E. Moreno<sup>1</sup>, M. Gómez<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Dpto. de Química Analítica, Facultad de CC. Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Av. Complutense s/n, 28040 Madrid

[alejandroi Iglesias@ucm.es](mailto:alejandroi Iglesias@ucm.es)

Los efectos secundarios asociados a la administración clínica del cisplatino limitan en gran medida su eficacia como medicamento anticancerígeno. Entre ellos, cabe destacar el daño renal o nefrotoxicidad que acaba desarrollando cerca del 30% de pacientes y que, en ocasiones, incluso obliga a interrumpir el tratamiento. Tras muchos años de investigación para encontrar alternativas, actualmente el cisplatino continúa siendo insustituible en la mayoría de casos [1, 2]. Por ello, es prioritario desarrollar estrategias protectoras que permitan su empleo y, a la vez, una disminución de la toxicidad renal sin que se pierda eficacia antitumoral, una de las principales dificultades de cara a resolver el problema.

En este trabajo se ha evaluado el potencial nefroprotector de las nanopartículas de selenio (SeNPs) como coadyuvante junto con el cisplatino, tratando de aprovechar la biocompatibilidad de este elemento y su poder antioxidante intrínseco, que podría ayudar a minimizar el estrés oxidativo inducido por el fármaco en las células renales [3]. Como modelo de estudio, se emplearon dos líneas celulares humanas: RPTEC (células epiteliales sanas de túbulo proximal de riñón) y HeLa (células de cáncer de cuello de útero). Se prepararon cultivos con cisplatino y con SeNPs, y se determinó la viabilidad celular en todos los casos mediante ensayos MTT. También se analizaron los efectos de los agentes sobre la morfología y la estructura ultracelular utilizando microscopía electrónica de transmisión (TEM) acoplada con espectroscopia de dispersión de energía de rayos X (XEDS). Por otro lado, se cuantificó el contenido de Pt y de Se interiorizados por las células a través de medidas con espectrometría de masas con plasma de acoplamiento inductivo (ICP-MS). Asimismo, se llevó a cabo un estudio de especiación de Pt y Se a nivel intracelular mediante cromatografía de exclusión molecular (SEC) y cromatografía de intercambio aniónico (AEC) acopladas con ICP-MS y UV-Vis.

Los resultados demostraron que ambas líneas celulares eran capaces de internalizar las SeNPs, que fueron localizadas en el citoplasma y diferentes orgánulos. Además, la incubación con SeNPs provocó cambios en la proporción de selenoespecies intracelulares encontradas, sugiriendo que parte del Se podría ser destinado a la síntesis de selenoaminoácidos y selenoproteínas. En relación al cisplatino, la presencia de SeNPs no tuvo influencia en la cantidad de fármaco absorbido por las células, un aspecto clave para preservar su acción anticancerígena. Por último, el análisis de viabilidad reveló que la coadministración de cisplatino y SeNPs hacía incrementar el grado de mortalidad en las células HeLa respecto a cuando se empleaba el fármaco solo, sin que esto se tradujera en un aumento del daño en las células renales. En base a esto, el uso combinado de cisplatino y SeNPs podría permitir reducir la dosis del primero sin perder poder antitumoral, consiguiendo así una disminución del riesgo de nefrotoxicidad. Considerando todo lo expuesto, y a falta de más estudios que lo corroboren, las SeNPs podrían ser una opción prometedora en el futuro para mejorar la eficacia y la seguridad de los tratamientos con cisplatino.

#### Referencias

- [1] Duan Z, Cai G et al. Cisplatin-induced renal toxicity in elderly people. *Therapeutic Advances in Medical Oncology*. 2020;12.
- [2] Artiaga G, Iglesias-Jiménez A et al. Differences in binding kinetics, bond strength and adduct formation between Pt-based drugs and S- or N-donor groups: A comparative study using mass spectrometry techniques. *Eur J Pharm Sci*. 2019 Apr 30;132:96-105.
- [3] Tan HW, Mo HY et al. Selenium Species: Current Status and Potentials in Cancer Prevention and Therapy. *Int J Mol Sci*. 2018 Dec 25;20(1):75.

## O4: DISEÑO DE NUEVOS PROTOCOLOS SINTÉTICOS DE SÍLICES MESOPOROSAS Y SU RECUBRIMIENTO EN APLICACIONES BIOLÓGICAS

I. Gutiérrez-Cabello,<sup>1</sup> V. García-Almodóvar,<sup>1</sup> D. Díaz-García,<sup>1</sup> S. Gómez-Ruiz<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Grupo COMET-NANO, Departamento de Biología y Geología, Física y Química Inorgánica, ESCET, Universidad Rey Juan Carlos, C/Tulipán s/n, 28933 Móstoles, España

[i.gutierrez.2016@alumnos.urjc.es](mailto:i.gutierrez.2016@alumnos.urjc.es)

Actualmente el uso de nanoterapias está aumentando, con el objetivo de dirigir sistemas de tamaño nanométrico activos que incluyan elementos de reconocimiento para actuar, transportar o liberar específicamente fármacos en las células o regiones afectadas, evitando dañar las células sanas circundantes y consiguiendo un tratamiento más efectivo que disminuya los efectos secundarios de los tratamientos convencionales.<sup>1</sup>

Debido a las propiedades físico-químicas, las altas capacidades de carga y sus amplias posibilidades de modificación, las sílices mesoporosas son unas de las nanopartículas más interesantes para su aplicación en biomedicina, ya que pueden ser utilizadas como vehículo transportador de fármacos con gran especificidad ante una enfermedad. Desde el descubrimiento de las propiedades antitumorales del cisplatino, se han estado investigando otros metales alternativos al platino con el fin de encontrar complejos metálicos que produzcan menores efectos secundarios.<sup>1,2</sup>

Por otro lado, el alcohol polivinílico (PVA) se utiliza en muchas aplicaciones biomédicas a causa de su biocompatibilidad, poca toxicidad y pequeña inclinación a unirse a proteínas. Al recubrir un nanosistema con PVA, aumenta la biodisponibilidad del material y se evita el estrés considerable al que se somete el núcleo del nanosistema, evitando problemas relacionados con la fragmentación y la erosión del núcleo. Por esta razón se han utilizado como recubrimientos en fármacos de liberación controlada.<sup>3</sup>

Por todo ello, en este estudio se ha realizado la síntesis de nanopartículas de sílice mesoporosa (MSN) y sistemas basados en manganeso (MSN-Mn) como material con potencial para imagen en medicina, su posterior funcionalización con un complejo organoestaño(IV), agente que actúa como fármaco, y finalmente el recubrimiento con alcohol polivinílico para mejorar la biodistribución.

Tras la optimización de la síntesis de los sistemas basados en manganeso y del recubrimiento de los materiales con PVA, todos los materiales sintetizados fueron caracterizados por medio de diversas técnicas físico-químicas: infrarrojo (IR), ultravioleta visible en estado sólido (UV-Vis), difracción de rayos X en polvo (DRX), fluorescencia de rayos X (FRX), fisisorción de gases en sólidos (BET), microscopía electrónica de transmisión (TEM) y espectroscopía de emisión atómica de plasma acoplado por inducción (ICP-AES).

En pocas palabras, se puede confirmar que los resultados obtenidos en este trabajo de investigación muestran cualidades que pueden ser óptimas de cara a estudios biológicos futuros, como, por ejemplo, analizar los materiales en sistemas biológicos simulados, el estudio de los sistemas basados en manganeso como aplicación médica de diagnóstico y/o el estudio de los distintos materiales en varios ensayos *in vitro*.

### Referencias

<sup>1</sup> Lechuga, L. M. Nanomedicina: aplicación de la nanotecnología en la salud. (Grupo 5, 2011).

<sup>2</sup> Gómez-Ruiz, S. Evolución y desarrollo de complejos metálicos con aplicación potencial como agentes antitumorales. Anales de Química de la RSEQ 13–21 (2010).

<sup>3</sup> Hernández B., E., Cruz R., R., Robledo S., F. & Santoyo M., L. Caracterización del alcohol polivinílico usado en recubrimientos de base acuosa. Revista Mexicana de Ciencias Farmacéuticas 38, 15–25 (2007).



## O5: NUEVOS MATERIALES HÍBRIDOS BASADOS EN Cu-MOF Y DIFERENTES NANOPARTÍCULAS METÁLICAS PARA LA MEJORA DE PROPIEDADES CATALÍTICAS

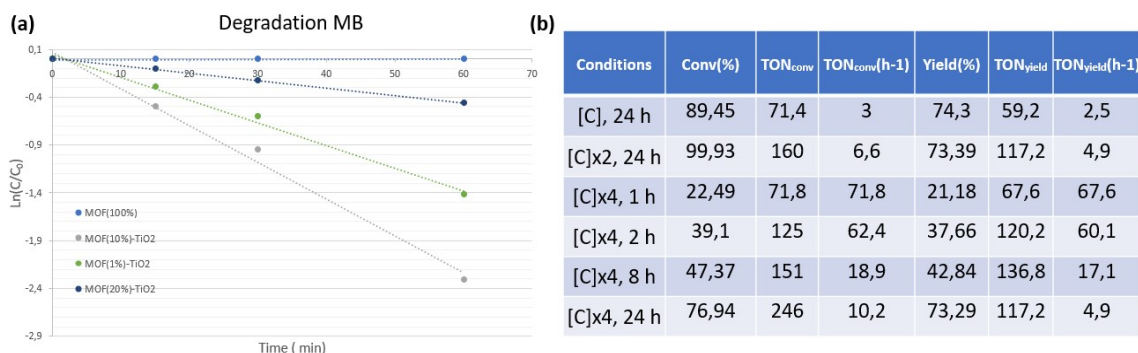
**Antonio A. García-Valdivia,<sup>1,2</sup> José M. Méndez Arriaga,<sup>2</sup> Antonio Rodríguez-Diéguez,<sup>1</sup> Santiago Gómez-Ruiz.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Universidad de Granada, Facultad de Ciencias, Dept. Química Inorgánica, Avenida Fuentenueva s/n, 18071, Granada, España,

<sup>2</sup> Universidad Rey Juan Carlos, Campus de Móstoles, Dept. Biología y Geología, Física y Química Inorgánica, C/ Tulipán s/n, 28933, Móstoles, Madrid, España

[antonioagv@ugr.es](mailto:antonioagv@ugr.es)

Los materiales híbridos son ampliamente utilizados como compuestos con gran potencial, capaces de competir con catalizadores heterogéneos tradicionales. Con esto en mente, hemos sintetizado nuevos materiales basados en un MOF poroso de Cobre.<sup>1</sup> El MOF precursor fue dopado con 2 tipos de nanopartículas diferentes en diferentes concentraciones con el objetivo de cubrir diferentes procesos catalíticos. MOF@TiO<sub>2</sub> muestra propiedades interesantes en la degradación de contaminantes tipo (Azul de Metileno). Por su parte, el material híbrido MOF@Pd presenta excelentes propiedades catalíticas para reacciones de acoplamiento C-C.



**Figura 1.** (a) Efecto de diferentes relaciones MOF/TiO<sub>2</sub> bajo luz UV (36W) en la degradación catalítica del azul de metileno. (b) Efecto de los materiales MOF@Pd como catalizadores en la reacción de acoplamiento C-C (Suzuki-Miyaura) frente a diferentes concentraciones de reactivos.

### Referencias

[1] J. M. Seco, D. Fairen-Jimenez, A.J. Calahorra, L. Méndez-Liñán, M. Pérez-Mendoza, N. Casati, E. Colacio, A. Rodríguez-Diéguez. *Chem. Comm*, **2013**, *49*. 11329-11331.

### Agradecimientos

Al Contrato Margarita Salas dado por la Universidad de Granada y Ministerio de Universidades. Gobierno de España. Financiado con Fondos Next- Generation EU de la Unión Europea.

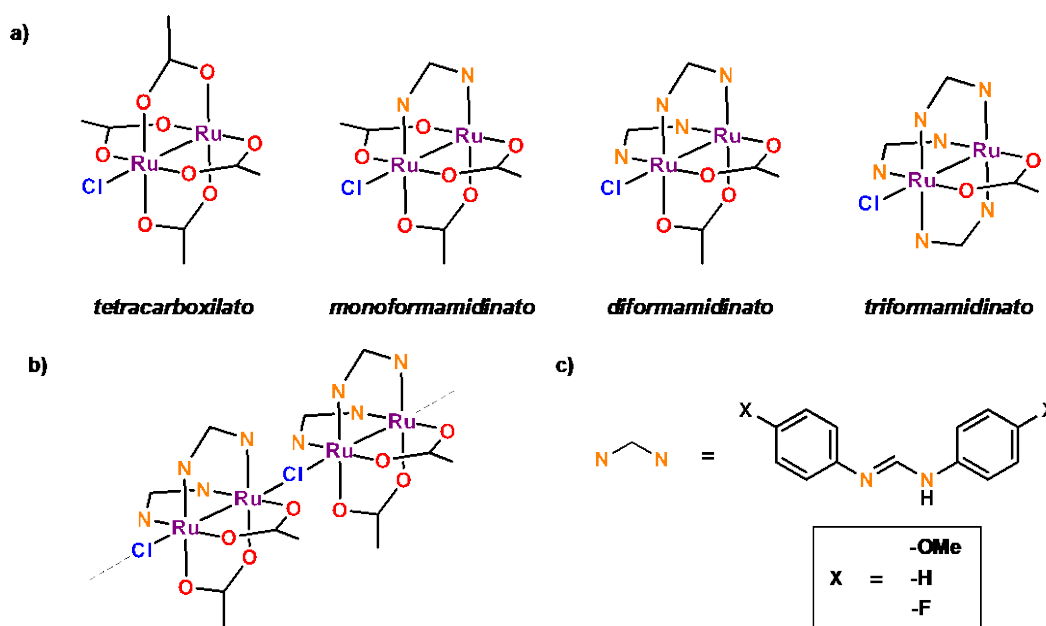
## O6: AUTO-ENSAMBLAJE SUPRAMOLECULAR DE ESPECIES CON ENLACE METAL-METAL

**L. del Álamo, I. Coloma, A. Terán, A. Inchausti, M. J. Mayoral y S. Herrero**

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

[loudejal@ucm.es](mailto:loudejal@ucm.es)

Aquellos compuestos de dirrutenio que presentan las características estructurales apropiadas permiten el estudio de procesos de auto-ensamblaje supramolecular. La síntesis de estos compuestos es posible utilizando como compuesto de partida  $[\text{Ru}_2\text{Cl}(\mu\text{-O}_2\text{CCH}_3)_4]$  y, a partir de este, la sustitución controlada de ligandos acetato por ligandos formamidinato para la obtención de compuestos más estables del tipo  $[\text{Ru}_2\text{Cl}(\mu\text{-N,N}')_x(\mu\text{-O}_2\text{CCH}_3)_{4-x}]$  ( $x = 1 - 4$ ; N,N' = ligandos formamidinato).<sup>1</sup> Con este objetivo, se han sintetizado compuestos de dirrutenio con diferente grado de sustitución para el estudio de su auto-ensamblaje supramolecular a través de la posición axial. Además, sería posible estudiar la fortaleza de asociación supramolecular cambiando el carácter dador de los ligandos formamidinato. La existencia de estos procesos de auto-ensamblaje supramolecular para estos compuestos en disolución se ha determinado mediante dos técnicas: espectroscopia electrónica y, a pesar de la naturaleza paramagnética de estos compuestos, resonancia magnética nuclear. En ambos casos, se ha utilizado como estímulo para formar el agregado supramolecular una variación en la concentración.<sup>2,3</sup>



**Figura 1.** a) Compuestos de dirrutenio ordenados en orden creciente de sustitución de los ligandos carboxilato por formamidinato. b) Auto-ensamblaje supramolecular de dos monómeros unidos por un cloruro puente. c) Ligandos formamidinato.

### Referencias

- [1] M. Cortijo, R. Gonzalez-Prieto, S. Herrero, J. L. Priego, R. Jiménez-Aparicio. *Coord. Chem. Rev.*, **2019**, 400, 213040.
- [2] M. J. Mayoral, C. Montoro-García, D. González-Rodríguez. *Comprehensive Supramolecular Chemistry II* (Ed.: J. Atwood), **2017**, Elsevier, Oxford, Vol. 4, 191-257.
- [3] A. Inchausti, A. Terán, A. Manchado-Parra, A. de Marcos-Galán, J. Perles, M. Cortijo, S. Herrero, R. Jiménez-Aparicio. *Dalton Trans.*, **2022**, 51, 9708-9719.



## O7: CONJUGATED DIENES: A REGIO- AND STEREOSELECTIVE METHOD TO SYNTHESIZE THESE INTERESTING COMPOUNDS

**D. G. Matesanz<sup>1</sup>, L. Gamarra<sup>1</sup>, T. Martínez del Campo<sup>1</sup>, P. Almendros<sup>\*2</sup>, and S. Cembellín<sup>\*1</sup>**

<sup>1</sup> Group of Chemistry of Unsaturated Systems and Bioactive Heterocycles, Unidad Asociada al CSIC, Departamento de Química Orgánica, Facultad de Química, Universidad Complutense de Madrid, 28040-Madrid, Spain

<sup>2</sup> Instituto de Química Orgánica General, IQOG-CSIC, Juan de la Cierva 3, 28006-Madrid, Spain

[digarc20@ucm.es](mailto:digarc20@ucm.es)

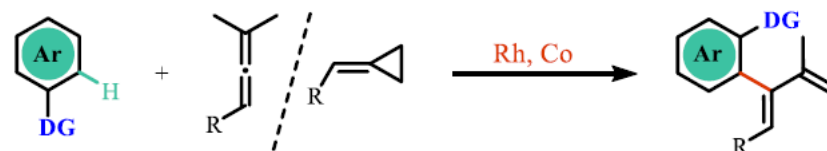
**Keywords:** diene synthesis, C–H activation, Mn-based catalysis, regioselective insertion

Conjugated dienes are important motifs not only for organic synthesis but also for polymer industry and medicinal chemistry. In fact, these valuable scaffolds appear in a broad variety of natural products and bioactive molecules such as  $\beta$ -carotenes or the antibiotic Linearmycin A. In the literature we can find numerous synthetic routes for the preparation of 1,3-dienes; however, most of the traditional approaches, like Wittig-type olefination or cross-coupling reactions, require the use of hazardous reagents and precursors with structural limitations. These disadvantages make a perfect starting point for the development of novel methods of synthesis that can improve former strategies.[1]

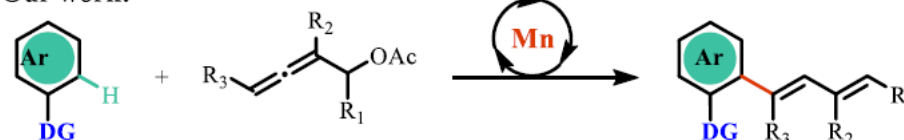
On the other hand, over the last decade transition metal catalyzed C–H activation has emerged as an environmentally benign and economically attractive tool, avoiding the employment of prefunctionalized substrates and improving the efficiency of organic synthesis. Taking advantage of this strategy, several research groups have used metal-catalyzed C–H activation of C(sp<sup>2</sup>)-substrates to synthesize 1,3-dienes. However, in all cases branched dienes were obtained, occurring always the insertion at the central carbon of both coupling partner used: allenes and alkylidenecyclopropanes. Surprisingly, no dienylation has been described to date through manganese-catalyzed C–H activation, despite its significant advantages as the high abundance, low price, low toxicity and the unique reactivity of the metal.[2]

Therefore, in this work we develop a highly selective method to synthesize linear 1,3-dienes via manganese(I)-catalyzed C–H activation of aromatic and heteroaromatic compounds using acetylated allenols as coupling partners (Figure 1). The final compounds were obtained as sole regioisomers with high stereoselectivity, being the *E,E*-diene the major product of the reaction. Moreover, the regioselectivity observed is generated thanks to the insertion at the terminal carbon of the coupling partner, in contrast to the previous works.[3]

**Previous works:**



**Our work:**



**Figure 1.** Previous works of conjugated diene synthesis and current work.

### References:

- [1] a) M. De Paolis, I. Chataigner, J. Maddaluno. *Topics in Current Chemistry* **2012**, 327, 87–146. b) R. G. Soengas, H. Rodríguez-Solla. *Molecules* **2021**, 26, 249.  
 [2] a) H. Wang, B. Beiring, D.-G. Yu, K.D. Collins, F. Glorius, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, 52, 12430–12434. b) R. K. Shukla, A. M. Nair, S. Khan, C. M. R. Volla, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, 59, 17042–17048. c) T. Dalton, T. Faber, F. Glorius. *ACS Cent. Sci.* **2021**, 7, 245–261. d) G. Xu, Q.Chen, F. Wu, D. Bai, J. Chang, X. Li, *Org. Lett.* **2021**, 23, 2927–2932.  
 [3] Manuscript in preparation.

**Acknowledgements:** This work was supported by MCIN/AEI /10.13039/501100011033/FEDER (Projects PID2021-125982OA-I00 and PID2021-122183NB-C21).

## O8: ESTUDIO DE LA RELACIÓN ESTRUCTURA-COMPOSICIÓN-PROPIEDADES EN MATERIALES INORGÁNICOS A TRAVÉS DE CÁLCULOS DFT

**M. Gómez Toledo<sup>1</sup>, M. E. Arroyo de Dompablo**

<sup>1</sup> *Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid*

[mgom09@uclm.es](mailto:mgom09@uclm.es)

El progreso hacia un sistema energético descarbonizado, flexible y eficiente se sustenta, entre otras, en tecnologías de producción y de almacenamiento de energía. Para el desarrollo de las citadas tecnologías, es imprescindible disponer de materiales eficientes, baratos y basados en elementos químicos abundantes y no tóxicos. Las técnicas de simulación computacional tienen un papel muy activo en el diseño de nuevos materiales. Existen múltiples técnicas computacionales que permiten simular distintos sistemas (moleculares, fluidos, sólidos, o incluso dispositivos) a escala macroscópica y/o microscópica. Para estudiar los materiales a nivel “atómico”, se puede utilizar la metodología químico-cuántica basada en la Teoría del Funcional de la Densidad (Density Functional Theory, DFT), que permite estudiar la relación existente entre la estructura cristalina, la composición y las propiedades de los sólidos<sup>1</sup>. Con la metodología DFT es posible examinar las propiedades magnéticas, eléctricas, ópticas y/o catalíticas de los materiales, incluso antes de ser sintetizados y, por lo tanto, se pueden anticipar sus posibles prestaciones de cara a una aplicación concreta. Entre los materiales para la energía más estudiados actualmente, se pueden citar los óxidos de metales de transición que presentan una estructura tipo perovskita ( $ABX_3$ ) y materiales con estructuras derivadas de esta, como son las fases de Ruddlesden-Popper o las perovskitas dobles<sup>2</sup>. Dentro de este grupo, la familia de conductores de iones óxido  $YSr_2Cu_2FeO_{8-\delta}$  cuenta con particularidades electrónicas que suponen un reto desde el punto de vista de la metodología DFT<sup>3</sup>. La existencia de una transición metal-aislante, así como la variación del comportamiento magnético con el contenido en oxígeno complica la predicción de sus propiedades. En este trabajo, se ha llevado a cabo un estudio computacional con diferentes aproximaciones DFT (funcionales de intercambio-correlación) de las propiedades magnéticas y electrónicas, así como de la conductividad de iones óxido en el sistema  $YSr_2Cu_2FeO_{8-\delta}$  ( $0 < \delta < 1$ ), con vistas a su aplicación en dispositivos para la generación de energía.

### Referencias – Máximo 3 referencias

1. Butler, K. T.; Frost, J. M.; Skelton, J. M.; Svane, K. L.; Walsh, A., Computational materials design of crystalline solids. *Chem Soc Rev* **2016**, *45* (22), 6138-6146.
2. López-Paz, S. A.; Marin-Gamero, R.; Martínez de Irujo-Labalde, X.; Sánchez-Marcos, J.; Perez-Coll, D.; Alario y Franco, M. Á.; García-Martín, S., YBaCuO-type perovskites as potential air electrodes for SOFCs. The case of  $YSr_2Cu_2FeO_{7+\delta}$ . *Journal of Materials Chemistry A* **2021**, *9* (13), 8554-8560.
3. Gómez-Toledo, M.; López-Paz, S. A.; García-Martín, S.; Arroyo-de Dompablo, M. E., Metal-to-Insulating Transition in the Perovskite System  $YSr_2Cu_2FeO_{8-\delta}$  ( $0 < \delta < 1$ ) Modeled by DFT Methods. *Inorganic Chemistry* **2023**, *62* (8), 3445-3456.

### Agradecimientos

Las autoras agradecen a MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y “NextGenerationEU”/PRTR por la financiación de los proyectos PID2019-106662RB-C44 y TED2021-130452B-C21, a la Universidad Complutense de Madrid por la financiación del proyecto FEI-EU-22-01-4129585, a la Comunidad de Madrid por el contrato PEJ-2020-AI/IND-18065 del programa “Ayudas para la contratación de Ayudantes de Investigación y Técnicos de Laboratorio”, y a Dr. Sara López Paz y Dr. Susana García Martín por el planteamiento y desarrollo de la parte experimental de este trabajo.

## O9: ESTUDIO DEL EFECTO DEL DESAJUSTE DE LA RED CRISTALINA EN LA NUCLEACIÓN HETEROGÉNEA DEL HIELO

**M. Camarillo<sup>1</sup>, E. Sanz<sup>1</sup>, M.M. Conde<sup>2</sup>, J. Ramirez<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>*Departamento de Química Física I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid, España.*

<sup>2</sup>*Departamento de Ingeniería Química Industrial y Medio Ambiente, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Universidad Politécnica de Madrid, 28006, Madrid, España.*

[micama01@ucm.es](mailto:micama01@ucm.es)

La nucleación consiste en la formación de una nueva fase a partir de una fase metaestable. El fenómeno de nucleación es un proceso activado, esto supone que para que ocurra la transformación de la fase metaestable en la fase estable es necesario superar una barrera de energía. Existen dos tipos de nucleación: nucleación homogénea y nucleación heterogénea. En la naturaleza el tipo de nucleación más común es la heterogénea ya que, la fase creciente es ayudada por las impurezas presentes en el sistema, las cuales mejoran las condiciones para que se formen núcleos, por lo que la temperatura de nucleación es mayor que en el caso de nucleación homogénea.

En este trabajo se van a presentar resultados preliminares del estudio de nucleación heterogénea del agua a partir de diferentes grados de desajuste sustrato sólido-hielo mediante simulaciones en LAMMPS utilizando el modelo de agua mW [1].

Para realizar este estudio se ha recurrido a implantar en el centro de una caja que contiene agua subenfriada unos pozos de potencial, cada uno con una molécula de agua en su interior [2], con el objetivo de analizar el crecimiento del cristal desde dicha barrera. Los pozos se ubican en las posiciones de uno o varios planos cristalinos de hielo con una distorsión o desajuste controlado con respecto a la red de equilibrio del hielo. De esta manera podemos estudiar de manera sistemática la capacidad de esta red de hielo desajustada de nuclear hielo sobre su propia superficie a partir del agua subenfriada en contacto con la misma.

El procedimiento que se ha llevado a cabo ha sido fundir el sistema mediante una simulación NVT y a continuación, mediante simulación NPT a temperaturas inferiores a la de fusión, se analiza el crecimiento del hielo. En concreto, medimos la temperatura a la que aparece hielo en función del grado de desajuste de la red de hielo subyacente fijada por el sistema de pozos.

### Referencias

- [1] Valeria Molinero and Emily B. Moore. Water Modeled As an Intermediate Element between Carbon and Silicon. *J. Phys. Chem. B* 2009, 113, 4008–4016
- [2] J.R. Espinosa, C. Vega, and E.Sanz. The mold integration method for the calculation of the crystal-fluid interfacial free energy from simulations. *J. Chem. Phys.* 141, 134709-134714 (2014).

## **O10: MEGACARIOCITOS Y PLAQUETAS EN INFECCIÓN RESPIRATORIA POR *S. pneumoniae*. PAPEL DE TLR4**

**Ó. González<sup>1</sup>, I. Cortegano<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Universidad Complutense de Madrid

<sup>2</sup> Instituto de Salud Carlos III

[osegon02@ucm.es](mailto:osegon02@ucm.es)

Las enfermedades respiratorias suponen actualmente uno de los mayores problemas de salud a nivel mundial. La neumonía es una enfermedad del tracto respiratorio inferior ocasionada por una infección del parénquima pulmonar, que produce como consecuencia la inflamación de este. El principal causante de la neumonía comunitaria es *Streptococcus pneumoniae* (Musher *et al.*, 2014); por lo que se trata de un patógeno de gran importancia sanitaria.

Las plaquetas son un descubrimiento reciente como elementos pertenecientes al sistema inmune innato. Las plaquetas son capaces de liberar diferentes citoquinas, tanto pro-inflamatorias como anti-inflamatorias, además de interleucinas, permitir la extravasación de leucocitos, aumentar la permeabilidad del endotelio, la activación de macrófagos, asociarse con otras células del sistema inmune innato como neutrófilos para formar la “NET” extracelular, ayudar en la activación y diferenciación de linfocitos B y T, entre otras muchas funciones. De la misma manera, las plaquetas expresan varios tipos de receptores de reconocimiento de patógenos (PRRs), entre ellos TLR4 (Dib *et al.*, 2020)<sup>2</sup>. Este receptor reconoce lipopolisacáridos de membrana de bacterias gram-negativas. Además, varios estudios indican que puede tener un papel importante en infecciones de bacterias gram-positivas como *S. pneumoniae* mediante el reconocimiento, entre otros, de lipoproteínas.

En este trabajo, hemos querido comprobar la acción de las plaquetas y sus progenitores (megacariocitos), así como la importancia de TLR4 en un modelo de infección respiratoria por *S. pneumoniae* en ratones “Wild Type” y TLR4 KO en sangre periférica, médula ósea y pulmón. Nuestro estudio muestra resultados diferentes en la activación plaquetaria, en ausencia de TLR4, en sangre y pulmón. En sangre, la activación plaquetaria aumenta en ratones “Wild Type” tras la infección, mientras que en ratones TLR4 KO ocurre lo contrario. En pulmón, sin embargo, ambas aumentan, aunque el porcentaje de plaquetas en ratones TLR4 KO disminuye. Además, hemos comprobado que la ausencia de TLR4 influye negativamente en la megacariopoyesis y en la trombopoyesis de megacariocitos tanto en médula ósea como en pulmón.

**Referencias** <sup>1</sup> Musher DM, Thorner AR. Community-acquired pneumonia. N Engl J Med. 2014 Oct 23;371(17):1619-28 <sup>2</sup> Dib PRB, Quirino-Teixeira AC, Merij LB, Pinheiro MBM, Rozini SV, Andrade FB, Hottz ED. Innate immune receptors in platelets and platelet-leukocyte interactions. J Leukoc Biol. 2020 Oct;108(4):1157-1182.

**Agradecimientos;** Agradecemos especialmente a M<sup>a</sup> Isabel Cortegano Jimeno por su tutela y haber hecho posible este trabajo. Darle las gracias a todo el laboratorio de inmunobiología y a todas sus excelentes investigadoras.

## O11: SEED PRIMING: AN EPIGENETIC TOOL FOR IMPROVING PLANT DISEASE TOLERANCE

**S. Soudani<sup>1</sup>, C. Poza-Carrión<sup>1,3</sup>, N. De la Cruz Gómez<sup>1</sup>, A. González-Coloma<sup>2</sup>, M. F. Andrés<sup>2</sup>, M. Berrocal-Lobo<sup>1\*</sup>**

(1) School of Forestry Engineering and Natural Resources, Department of Systems and Natural Resources, Polytechnical University of Madrid, Spain

(2) Instituto de Ciencias Agrarias, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Madrid.

(3) Current address: Centro Nacional de Biotecnología, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Madrid.

[\\*m.berrocal@upm.es](mailto:m.berrocal@upm.es)

In agriculture, seed priming has long been employed as a method to enhance seed germination. Recently, there has been growing interest in plant essential oils (EOs) as biopesticides for crop protection [1]. Here, we demonstrate that seed priming can also boost plant tolerance to phytopathogens. Specifically, treating tomato seedlings with *Artemisia absinthium* essential oil (AEO) increased their resistance to *Fusarium oxysporum* sp. *oxysporum* (*Fol*). Remarkably, even very low concentrations of AEO elicited a durable and faster improvement in the immune response to *Fol*, as evidenced by changes in callose deposition and reactive oxygen species production during the early stages of germination. By conducting a transcriptomic and metabolomic analysis of 12-day-old seedlings, we were able to elucidate the underlying mechanisms of this improved resistance. Our findings suggest that epigenetic and subsequent transcriptomic effects were responsible for the observed improvement in resistance [2]. Our results highlight the potential of using seed priming with plant essential oils as a novel approach to enhance plant health and combat phytopathogens in agriculture.

### Referencias

[1] S. Kesraoui, M. F. Andrés, M. Berrocal-Lobo, S. Soudani, and A. Gonzalez-Coloma, “Direct and Indirect Effects of Essential Oils for Sustainable Crop Protection,” *Plants*, vol. 11, no. 16, pp. 1–10, 2022, doi: 10.3390/plants11162144.

[2] S. Soudani, C. Poza-Carrión, N. De la Cruz Gómez, A. González-Coloma, M. F. Andrés, and M. Berrocal-Lobo, “Essential Oils Prime Epigenetic and Metabolomic Changes in Tomato Defense Against *Fusarium oxysporum*,” *Front. Plant Sci.*, vol. 13, no. March, pp. 1–18, 2022, doi: 10.3389/fpls.2022.804104.

### Agradecimientos



EOHUB

Co-funded by the  
Erasmus+ Programme  
of the European Union



## O12: VALORIZACIÓN DEL CO<sub>2</sub>: ABSORCIÓN Y REUTILIZACIÓN

**Diana Murillo<sup>1</sup>, Isabel Serrano<sup>1</sup>, María José Tenorio<sup>1</sup>, Miguel Ángel González<sup>1</sup>, Inmaculada Suárez<sup>1</sup> y Baudilio Coto<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Departamento de Tecnología Química, Energética y Mecánica, ESCET. Universidad Rey Juan Carlos, c/ Tulipán s/n, 28933 Móstoles, Madrid, España

[diana.murilloc@urjc.es](mailto:diana.murilloc@urjc.es); [isabel.serrano@urjc.es](mailto:isabel.serrano@urjc.es)

La reducción de emisiones de CO<sub>2</sub> a la atmósfera para combatir el cambio climático es uno de los retos a los que se enfrenta la sociedad actual y una línea estratégica de investigación para España y Europa. Se han estudiado distintas estrategias para abordar dicho reto y, entre las que tienen mayor potencial actualmente, destaca la de captura y utilización del CO<sub>2</sub>. El CO<sub>2</sub> capturado es almacenado en antiguos pozos petrolíferos “secos” o utilizado en procesos denominados, con sus siglas en inglés, *Carbon Capture and Utilization (CCU)* o *Carbon Dioxide Utilization (CDU)* [1]. En los últimos años, se están desarrollando tecnologías cuyo objetivo es conseguir emisiones negativas de CO<sub>2</sub> (Negative emission technology, NET), entre las que destaca la Direct air capture (DAC) que tiene como propósito reducir directamente la concentración de CO<sub>2</sub> de la atmósfera. Su esquema de funcionamiento se resume en la Figura 1, el CO<sub>2</sub> una vez capturado del aire mediante un absorbente o adsorbente es tratado con calor y/o agua regenerando una corriente de CO<sub>2</sub> altamente puro para su posterior almacenamiento o utilización. Entre las posibles utilidades de dicho CO<sub>2</sub> se encuentra la síntesis de múltiples compuestos orgánicos de alto valor añadido como hidrocarburos (CH<sub>4</sub>), ácidos carboxílicos (HCOOH), éteres, ésteres o alcoholes (CH<sub>3</sub>OH).

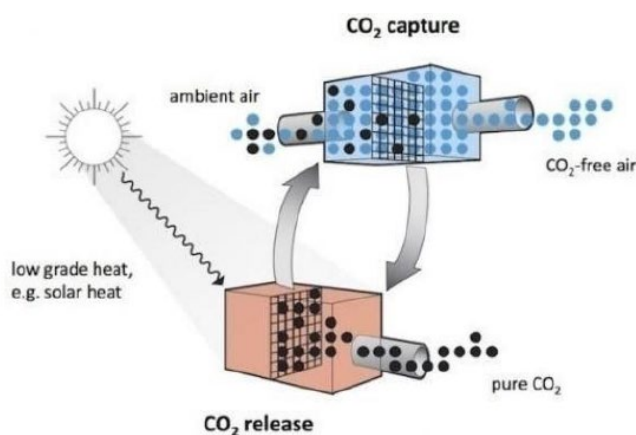


Figure 1. Direct Air Capture [3].

Los líquidos iónicos (LIs) son sales compuestas por un catión orgánico, muchas veces heterocíclico con átomos de nitrógeno o fósforo, y un anión inorgánico u orgánico. Los LIs debido a sus características especiales presentan multifuncionalidad, y pueden ser diseñados “a la carta” en función de las exigencias de cada aplicación concreta. Estos LIs son considerados disolventes verdes ya que pueden ser utilizados como disolventes sostenibles y una alternativa a los disolventes orgánicos convencionales, que contribuyen a la contaminación del medio ambiente, son inflamables, tóxicos y/o carcinogénicos. Entre las múltiples aplicaciones descritas, pueden utilizarse en procesos de captura y absorción del CO<sub>2</sub>, ya que son selectivos respecto de otros gases como como O<sub>2</sub> o N<sub>2</sub> [2], y permiten un gran ahorro energético respecto de otros disolventes.

En este trabajo se han llevado a cabo estudios experimentales y teóricos de absorción del CO<sub>2</sub> en diversos LIs. Se han probado y optimizado las distintas condiciones de operación, y se ha completado el estudio mediante el modelo COSMO, con objeto de correlacionar la estructura molecular y electrónica de los LIs con su efectividad en la interacción con el CO<sub>2</sub>, principalmente la basicidad del anión.

### Referencias

- [1] A. Rafiee, K. Rajab Khalilpour, D. Milani, M. Panahi, *Journal of Environmental Chemical Engineering*. 6 (2018) 5771–5794.  
[2] J.F. Brennecke, B.E. Gurkan, *Journal of Physical Chemistry Letters*. 1 (2010) 3459–3464.



## O13: NUEVOS BIOPRODUCTOS PARA COMBATIR LA SEQUÍA EN SUELOS EXTREMOS

**N. de la Cruz Gómez<sup>1,2</sup>, E. Díaz Portuondo y M. Berrocal-Lobo<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>*Departamento de Sistemas y Recursos Naturales, E.T.S.I. Montes, Forestal y Medio Natural, Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España.*

<sup>2</sup>*Arquimea Agrotech S.L.U., Madrid, España*

[n.delacruz@alumnos.upm.es](mailto:n.delacruz@alumnos.upm.es)

El cambio climático, sumado al uso incontrolado de pesticidas y fertilizantes inorgánicos, han provocado la pérdida de amplias áreas de interés agroforestal en los últimos veinte años. El avance en el desarrollo de nuevas estrategias para la obtención de bioproductos capaces de transformar suelos extremos, como son los suelos desérticos, permitirá combatir parcialmente, los efectos causados por el uso inadecuado de los recursos naturales. En este proyecto, que forma parte de una tesis industrial, desarrollada entre la UPM y la empresa Arquimea (<https://www.arquimea.com/>), se están desarrollando productos de origen natural, capaces de transformar y mejorar, de forma sostenible, la calidad de ciertos suelos extremos y degradados. Se describirán los resultados preliminares de dos productos en desarrollo, Arquiclean® y Arquiwater® capaces de disminuir el contenido en metales pesados en suelos y plantas, y de aumentar la capacidad de retención de agua del suelo, respectivamente. Se mostrarán los resultados obtenidos sobre sistemas modelo de laboratorio.

**Agradecimientos.**

**ARQUIMEA AGROTECH S.L.U.**

## O14: REORDENAMIENTO DE DOMINIOS ESTRUCTURALES PARA LA INHIBICIÓN DE LA SOLIDIFICACIÓN PATOLÓGICA DE PROTEÍNAS

S. Blázquez<sup>1,2</sup>, I. S. Burgos<sup>2</sup>, A. R. Tejedor<sup>2</sup>, J. R. Espinosa<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química Física, Universidad Complutense de Madrid, Av. Complutense s/n, 28040, Madrid, España.

<sup>2</sup>Maxwell Centre, Cavendish Laboratory, Department of Physics, University of Cambridge, JJ Thomson Avenue, Cambridge CB3 0HE, United Kingdom.

[samuelbl@ucm.es](mailto:samuelbl@ucm.es)

La maduración y transición de condensados líquidos biomoleculares en agregados de tipo sólido se ha relacionado con la aparición de varias enfermedades neurodegenerativas [1].

La presencia de pequeñas regiones ricas en aminoácidos aromáticos (LARKS) que se encuentran en numerosas proteínas de unión al ARN pueden promover la agregación mediante la formación estructuras tipo  $\beta$ -laminar que se acumulan con el tiempo (ver Fig. 1) y, en última instancia, impulsan la transición de líquido a sólido de los condensados [2]. En este trabajo combinamos simulaciones atomísticas de dinámica molecular con simulaciones de grano grueso de varias resoluciones para investigar el papel de los LARKS en la agregación de proteínas. Tomando como caso práctico la proteína *Fused in Sarcoma* (FUS), reordenamos sus dominios consiguiendo inhibir el envejecimiento de los condensados de FUS-ARN y suprimiendo completamente la solidificación patológica de la proteína [3].

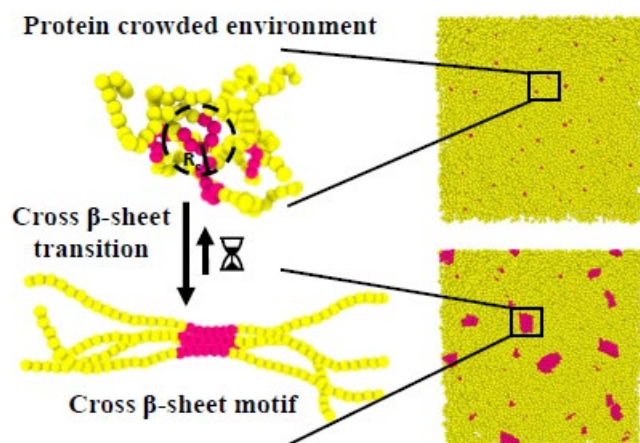


Figura 1.

Transición de fase de un condensado biomolecular líquido hacia la formación de una estructura del tipo  $\beta$ -laminar.

### Referencias

- [1] A. Patel, H. O. Lee, L. Jawerth, S. Maharana, M. Jahnel, M. Y. Hein, S. Stoykov, J. Mahamid, S. Saha, T. M. Franzmann, et al. *Cell* 2015, **162**, 5 1066.
- [2] M. P. Hughes, M. R. Sawaya, D. R. Boyer, L. Goldschmidt, J. A. Rodríguez, D. Cascio, L. Chong, T. Gonen, D. S. Eisenberg. *Science* 2018, **359**, 6376 698.
- [3] S. Blázquez, I. S. Burgos, J. Ramírez, T. Higginbotham, M. M. Conde, R. Collepardo-Guevara, A. R. Tejedor, J. R. Espinosa. *Advanced Science* (under review).



## O15: STRAIGHTFORWARD SYNTHESIS OF BIS[(TRIFLUOROMETHYL)SULFONYL]ETHYLATED ISOCOUMARINS FROM 2-ETHYNYLBENZOATES

A. S. Petcu,<sup>1</sup> C. Lázaro-Milla,<sup>2</sup> F. J. Rodríguez,<sup>2</sup> I. Iriepa,<sup>3,4</sup> Ó. M. Bautista-Aguilera,<sup>3,4</sup> C. Aragoncillo,<sup>2</sup> J. M. Alonso<sup>2</sup> and P. Almendros<sup>1</sup>

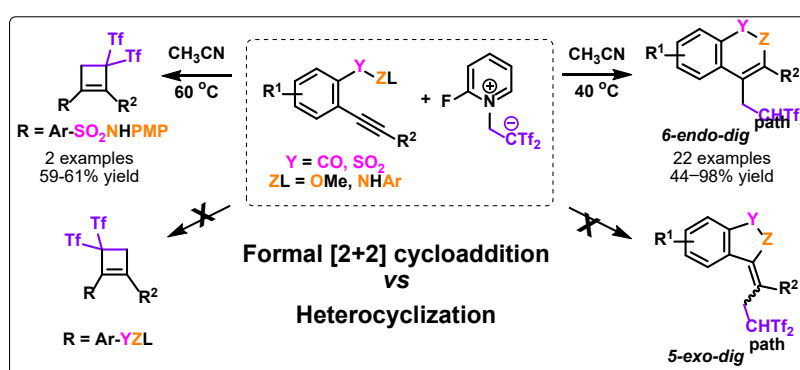
<sup>1</sup>Institute of General Organic Chemistry, IQOG, CSIC, Juan de la Cierva 3, 28006-Madrid, Spain.

<sup>2</sup>Grupo de Lactamas y Heterociclos Bioactivos, Departamento de Química Orgánica, Unidad Asociada al CSIC, Faculty of Chemical Sciences, Complutense University of Madrid, 28040-Madrid, Spain

<sup>3</sup>University of Alcalá, Departamento de Química Orgánica y Química Inorgánica, Ctra. Madrid-Barcelona Km 33.6, 28871 Alcalá de Henares, Madrid, Spain

<sup>4</sup>Institute of Chemical Research Andrés M. del Río, University of Alcalá, 28805 Alcalá de Henares, Madrid, Spain

[adepetcu@ucm.es](mailto:adepetcu@ucm.es)



Molecules containing 3,4-disubstituted isocoumarin or isoquinolone moiety present interesting biological properties and are widely spread in natural products and drugs.<sup>[1]</sup> Despite the merits of previous reported procedures to synthesize them, the use of transition metals, hazardous reagents or harsh reaction conditions are needed.

Herein we report a facile isocoumarin and isoquinolone preparation taking advantage of an initial bis(triflyl)ethylation [triflyl = (trifluoromethyl)sulfonyl] reaction<sup>[2]</sup> followed by heterocyclization, which contrasts with our previous results on cyclobutene formation.<sup>[3]</sup> The efficiency of the catalyst- and irradiation-free heterocyclization/bis(triflyl)ethylation sequence showed exquisite dependence on the electronic nature of the substituents at the alkyne precursors. Thus, starting from 2-ethynylbenzoates or 2-ethynylbenzamides, we chemoselectively obtained the heterocyclization products, whereas beginning from 2-ethynylbenzenesulfonamide, cyclobutenes were acquired. Moreover, we observed a total regioselectivity in the heterocyclization mechanism, achieving the desired isocoumarins and isoquinolones through a 6-endo-dig path.

Molecular docking of model bis(triflyl)ethylated isocoumarins on human acetylcholinesterase (hAChE) revealed promising biological activities through selective coordination on both catalytic active site and peripheral active site.

### References

- [1] S. Chen, Y. Liu, Z. Liu, R. Cai, Y. Lu, X. Huang, Z. She. RSC Adv. 2016, 6, 26412–26420.
- [2] H. Yanai. J. Syn. Org. Chem. Jpn. 2022, 80, 186–197.
- [3] B. Alcaide, P. Almendros, I. Fernández, C. Lázaro-Milla. Chem. Commun. 2015, 51, 3395–3398.

### Acknowledgments:

This work was supported by AEI (Project PID2021-122183NB-C21). A. S. P. thanks CAM and FEDER (YEI) for a contract.

## O16: SUPERFICIES ANTIADHERENTES Y SOSTENIBLES

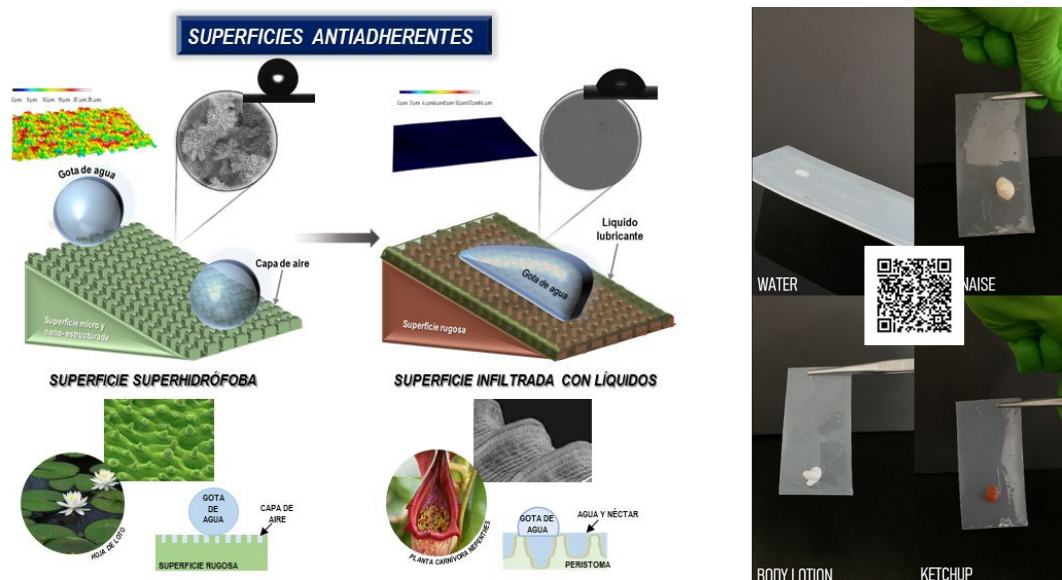
**M. Hernández Rivas<sup>1</sup>, A. Martínez-Gómez<sup>1</sup>, P. Tiemblo<sup>1</sup>, N. García<sup>1</sup>**

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

[mhernanriv@ictp.csic.es](mailto:mhernanriv@ictp.csic.es)

Las superficies altamente repelentes a líquidos de distinta naturaleza han cobrado gran importancia debido a sus propiedades específicas, como autolimpieza, antihielo y anti-incrustación. En la actualidad se conocen diferentes tipos de superficies antiadherentes inspiradas en la Naturaleza. Entre ellas, las inspiradas en la hoja de loto han sido las más utilizadas durante las últimas décadas. Sin embargo, este tipo de superficies presenta algunas limitaciones, principalmente su baja estabilidad mecánica y, en general, su poca eficacia frente a líquidos de baja tensión superficial. Es por ello que ha surgido la necesidad de diseñar nuevos materiales antiadherentes, por ejemplo, los inspirados en la planta carnívora en forma de jarra llamada *Nepenthes*. Estos materiales son conocidos como SLIPS del inglés *Slippery Liquid Infused Porous Surfaces* (Superficies porosas infiltradas con líquidos deslizantes).

En nuestra búsqueda de nuevos materiales con alta repelencia a los líquidos, el objetivo principal de este trabajo es crear una superficie deslizante infiltrada con líquidos libre de flúor, utilizando para ello métodos simples y fácilmente escalables. Con este propósito, se eligió el PLA como material de partida debido a su origen biobasado.



### Agradecimientos

Los autores agradecen la financiación recibida del Ministerio de Ciencia e Innovación mediante el proyecto PID2019-109401 GB-I00. Además, M.Hernández-Rivas agradece al MINECO la concesión de un contrato FPI (PRE2020-094915) para la realización de su tesis doctoral.

## O17: ANÁLISIS DE LA CAPACIDAD SENSORA DE UN MOF MICROPOROSO DE COBRE

**S. Morales-Cámara<sup>1</sup>, S. Vasquez,<sup>2</sup> M. A. Costa Angeli,<sup>2</sup> P. Ibba,<sup>2</sup> P. Lugli,<sup>2</sup> L. Petti,<sup>2</sup> D.P. Morales,<sup>3</sup> A. Rodríguez-Diéguez,<sup>1</sup> J. F. Salmerón,<sup>3</sup> A. Rivadeneyra<sup>3</sup> and S. Rojas.<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Dept. de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071 Granada, España

<sup>2</sup> Faculty of Science and Technology, Free University of Bolzano-Bozen, 39100 Bolzano, Italia

<sup>3</sup> Dept. Electrónica y Tecnología de la Computación, Universidad de Granada, 18071 Granada, España

samuelm@ugr.es

Durante la última década, la producción y comercialización de sensores de gases ha experimentado un auge en diferentes sectores para la detección de gases tóxicos, diagnóstico médico, control de calidad, seguridad ocupacional y monitoreo ambiental.[1] A pesar de la gran variedad de sensores comercializados, existe la necesidad de mejorar sus propiedades, como la selectividad. Por esta razón, la búsqueda de nuevos materiales sensibles y selectivos para un gas específico es crucial para desarrollar sensores más eficientes, rentables y precisos.

Las redes metal orgánicas, MOF, se han propuesto como materiales novedosos para el desarrollo de sensores de gases. Sus destacadas propiedades como gran área superficial, porosidad, capacidad de adsorción selectiva, entre otras, podrían desempeñar un papel relevante en la detección de un determinado gas. Sin embargo, la mayoría de los MOF no muestran conductividad eléctrica adecuada por lo que es necesario combinarlos con materiales conductores para desarrollar dispositivos electrónicos eficientes.[2]

En este trabajo evaluamos la capacidad de detección del MOF  $[\text{Cu}_2(\text{glutarato})_2(1,3\text{-bis}(4\text{-piridil})\text{propano})] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  que presenta afinidad para la adsorción de  $\text{CO}_2$  con alta selectividad.[3] Este material carece de conductividad eléctrica, con el objetivo de usarlo en un sistema electrónico se ha preparado un material composite mediante la combinación con el polímero conductor poli(3,4-etilendioxitiofeno) poliestireno sulfonato (PEDOT:PSS). El material híbrido obtenido fue depositado en forma de fina capa sobre electrodos interdigitados basados en grafeno inducido por láser (LIG). La capacidad de detección de  $\text{CO}_2$  se evaluó a través de la medición de la resistencia cuando el sensor se expuso a diferentes concentraciones del gas.

Los resultados muestran que el sensor basado en  $\text{CuMOF@PEDOT:PSS}$  muestra una alta respuesta al  $\text{CO}_2$ , mientras que los componentes individuales no mostraron respuesta frente al gas, por lo que la selectividad de la respuesta depende del MOF. Por tanto, se ha desarrollado y caracterizado un sensor basado en un MOF que muestra una respuesta sensible a  $\text{CO}_2$ . Se están realizando más estudios para determinar la selectividad del material, el tiempo de respuesta y otros parámetros de detección.

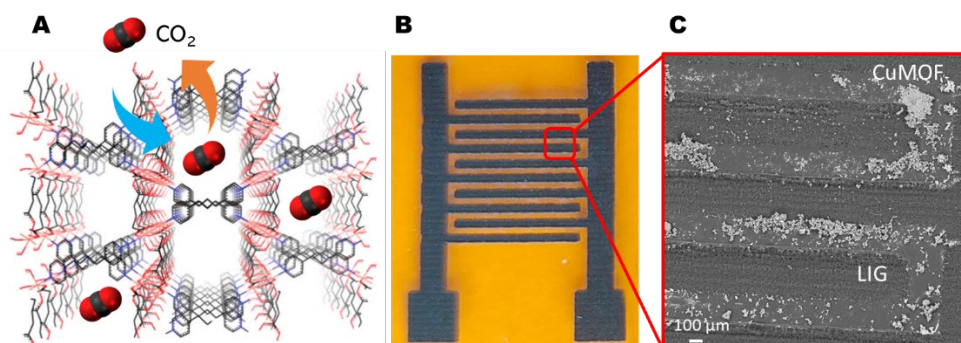


Figura 1. A) Estructura tridimensional de CuMOF. B) Electrodo *Laser Induced Graphene* (LIG) sobre los que se ha depositado CuMOF C) Imágenes SEM de la distribución de Cu-MOF los electrodos.

### Referencias

[1] A. Chidambaram and K. C. Stylianou. *Inorg. Chem. Front.* 2018, 5 (5), 979–998.

[2] M. G. Campbell and M. Dincă. *Sensors.* 2017, 17 (5), 1–11.

[3] J. M. Seco, D. Fairen-Jimenez, A. J. Calahorra, L. Méndez-Liñán, M. Pérez-Mendoza, N. Casati, E. Colacio and A. Rodríguez-Diéguez. *Chem. Commun.* 2013, 49 (96), 11329–11331.

### Agradecimientos

Grupo de investigación FQM-394 Biochemistry and Electronics as Sensing Technologies (BEST). ProyExcel\_00105 de la Junta de Andalucía.

## O18: *PHYTOPHTHORA CINNAMOMI*: RESPUESTA MOLECULAR EN ESPECIES FORESTALES Y NO FORESTALES

**L. Del Castillo-González<sup>1</sup>, M. Berrocal-Lobo<sup>1\*</sup>**

<sup>1</sup> School of Forestry Engineering and Natural Resources, Department of Systems and Natural Resources, Polytechnical University of Madrid, Spain

[Ldelcastillo@alumnos.upm.es](mailto:Ldelcastillo@alumnos.upm.es)

*Phytophthora cinnamomi* Rands (Pc), es considerado como uno de los 10 fitopatógenos de mayor impacto a nivel mundial a nivel científico y económico. Pc infecta más de 5000 hospedadores, alterando el nicho ecológico donde habitan especies forestales como el castaño, la encina, o el alcornoque, y especies no forestales, como el aguacate, el arándano o el tomate.

Entre los síntomas producidos por este oomiceto, destacan la pudrición de diversos tejidos como la corona, el tronco y la raíz. Además, Pc es el principal agente causal de la podredumbre radical de *Quercus ilex* y *Quercus suber* en el sur de la Península Ibérica y otras áreas templadas del mediterráneo. El ciclo de vida de Pc incluye la producción de zoosporas (Zs) móviles de alta virulencia que penetran en el hospedador a través de las raíces. Utilizando un protocolo previamente puesto a punto en nuestro laboratorio, se han inoculado plántulas de *Quercus suber* y *Solanum lycopersicum* estudiando los patrones de infección en ambas especies y su respuesta molecular al patógeno. En esta charla se mostrarán y discutirán los últimos resultados obtenidos.

### Referencias

EEPO. (2020). Mapa de distribución de *Phytophthora cinnamomi*. Organización Europea y Mediterránea de Protección Vegetal. <https://gd.eppo.int/taxon/PHYTCN/distribution>

Rojas, E. Z., de los Reyes, S. A., & Hernández, M. E. S. (2014). El decaimiento y la podredumbre radical en las dehesas andaluzas. In *El Andévalo. Historia y paisaje: (Actas de las IV Jornadas del Patrimonio de El Andévalo. El Cerro del Andévalo-Huelva-, 15, 16 y 17 de noviembre 2013)* (pp. 49-75). Servicio de Publicaciones.

### Agradecimientos

Agradecer a los diversos proyectos de investigación tanto públicos como privados que han financiado este proyecto.

 ARQUIMEA ICA INSTITUTO DE CIENCIAS AGRARIAS



## O19: PHASE SEPARATED POLYMER BASED SOLID ELECTROLYTES BY TOP-DOWN AND BOTTOM-UP STRATEGIES

**A. Campo<sup>1</sup>, A. Martínez<sup>1</sup>, N. García<sup>1</sup>, P. Tiemblo<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> *Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP-CSIC), Calle Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid, Spain*

[angcampo@ictp.csic.es](mailto:angcampo@ictp.csic.es)

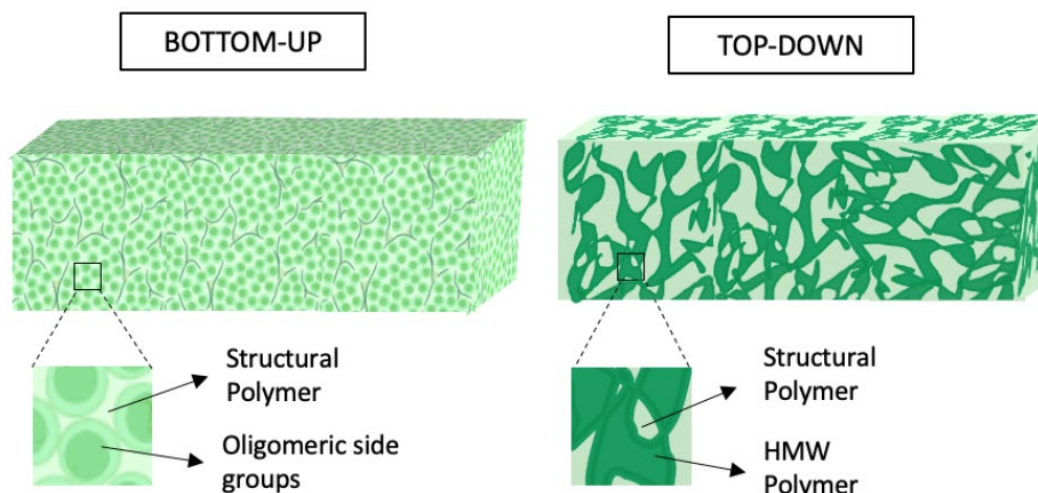
Next generation of batteries need to be changed. The current state-of-the-art lithium-ion batteries (LIBs) are to become a bottleneck because of the low abundance of Li, therefore new batteries based on accessible raw materials like Na, Al, Zn, etc are necessary. Moreover, batteries need to be safe, eliminating toxic or corrosive liquid leaks, metal dendrite growth and the subsequent short-circuits.

The use of all-solid electrolytes avoids these safety problems, but their ionic conductivity is much lower than that of liquid electrolytes. An alternative is to use solid or quasisolid electrolytes based on polymer and liquid blends, as they can reach conductivities close to those of a liquid, because they have higher ionic mobility values than all-solid materials.

In this work, polymer gel electrolytes are prepared in membrane form, following two strategies:

- Bottom-up: polymeric membranes are prepared by copolymers, synthesized by a structural polymer and oligomeric side groups which are soluble and swollen in the liquid electrolyte.
- Top-down: porous polymeric membranes are prepared by the NIPS method, where a structural polymer is insoluble and a high molecular weight polymer are soluble and swollen in the liquid electrolyte.

Scheme 1. Proposed structures of the membranes after gel formation with the liquid electrolyte.



## O20: DE LA POYATA A LA PLANTA PILOTO DE UNA ETAP: NUEVOS ADSORBENTES PARA LA ELIMINACIÓN DE SUBPRODUCTOS INORGÁNICOS DE DESINFECCIÓN EN AGUA POTABLE

G. Sanchez-Cano<sup>1,2</sup>, P. Cristobal-Cueto<sup>2</sup>, A. Lastra<sup>1</sup>, L. Saez<sup>1</sup>, S. Rojas<sup>3</sup>, P. Horcajada<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Subdirección I+D+i, Canal de Isabel II, Plaza del Descubridor Diego de Ordás 3, 28003, Madrid, España

<sup>2</sup> Unidad de Materiales Porosos Avanzados (UMPA), Instituto IMDEA Energía, Av. Ramón de la Sagra 3, 28935, Móstoles, España

<sup>3</sup> Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Av. Fuentenueva s/n, 18071, Granada, España

[gabrielsanchezcano@canal.madrid](mailto:gabrielsanchezcano@canal.madrid)

La cloración es uno de los procesos más importantes llevados a cabo en las Estaciones de Tratamiento de Aguas Potables (ETAPs), cuyo principal objetivo es la eliminación de microorganismos y materia orgánica en el agua, para así garantizar su consumo. Además, este proceso puede generar subproductos inorgánicos como cloritos ( $\text{ClO}_2^-$ ) y cloratos ( $\text{ClO}_3^-$ ). A pesar de no considerarse sustancias tóxicas, su consumo prolongado puede dar lugar a afecciones crónicas (hipotiroidismo, anemia, etc.). Por todo ello, el Consejo Europeo ha limitado la concentración máxima permitida a  $250 \mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$  para cada anión, siendo un nuevo reto científico su minimización en agua potable.[1] De entre las actividades llevadas a cabo en las ETAPs, la adsorción es un proceso prometedor para la eliminación de dichos aniones, debido a su bajo coste y condiciones de operación moderadas (temperatura y presión). Por esta razón, surge la necesidad de desarrollar materiales selectivos capaces de minimizar la presencia de estos subproductos en agua. En este contexto, aunque su bajo coste hace que los carbones activos se utilicen ampliamente en ETAPs, presentan una pobre eliminación (afinidad) de  $\text{ClO}_3^-$ . Por otro lado, los Polímeros de Coordinación Porosos (PCPs) son nuevos materiales adsorbentes, que presentan una estructura cristalina híbrida con una porosidad excepcional y una amplia diversidad de química.

Así, para mejorar las propiedades de adsorción (eliminación) de ambos aniones proponemos dos estrategias innovadoras. La primera, de gran practicidad y basada en carbones activos, mediante la modificación de su superficie con diferentes surfactantes catiónicos (i.e., aminas cuaternarias),[2] seleccionando el cloruro de cetilpiridinio (CPC) con una eliminación del 80% de  $\text{ClO}_3^-$  y 100% de  $\text{ClO}_2^-$  en 2 h. La segunda estrategia, muy innovadora, propone el uso del PCP microporoso flexible MIL-88B(Fe)- $\text{NH}_2$ , capaz de eliminar 40% de  $\text{ClO}_3^-$  y 100% de  $\text{ClO}_2^-$  en tan solo 10 min.[3] La síntesis de ambos materiales se ha escalado desde gramo (escala laboratorio) a varios kilogramos (piloto) para su evaluación posterior en la planta piloto de la ETAP de la empresa Canal de Isabel II en Colmenar Viejo. Estos materiales se posicionan con un estado de maduración tecnológica y científica avanzada para la remediación de  $\text{ClO}_3^-$  y  $\text{ClO}_2^-$  en aguas potables.

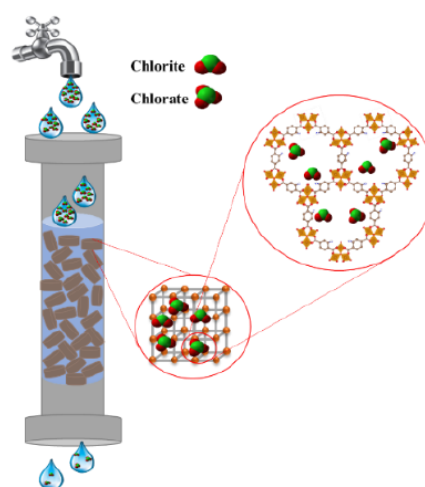


Figura 1. Esquema del proceso de adsorción de  $\text{ClO}_2^-$  and  $\text{ClO}_3^-$  mediante estructuras de Polímeros de Coordinación Porosos (PCPs)

### Referencias

- [1] The European Parliament and the Council of the European Union, *Directive (EU) 2020/2184, EU (revised) Drinking Water Directive. Annex 1. Part B.*, 2020.
- [2] S. Y. Lin, W. F. Chen, M. T. Cheng and Q. Li, *Colloids Surfaces A Physicochem. Eng. Asp.*, 2013, **434**, 236– 242.
- [3] C. Tamames-Tabar, D. Cunha, E. Imbuluzqueta, F. Ragon, C. Serre, M. J. Blanco-Prieto and P. Horcajada, *J. Mater. Chem. B*, 2014, **2**, 262–271., and references herein.

### Agradecimientos

Este trabajo ha sido realizado en la empresa Canal de Isabel II y la Fundación IMDEA Energía. Los autores quieren agradecer la financiación del proyecto de Doctorado Industrial de la Comunidad de Madrid CLORATOS (IND2019/AMB-17129). PH, SR y GS quieren agradecer a los doctores S. Carrasco, T. Hidalgo, Y. Pérez-Cortés, C. Biglione, C. Fernández, así como a I. Rincón y P. Nuño, por su inestimable ayuda durante la investigación.

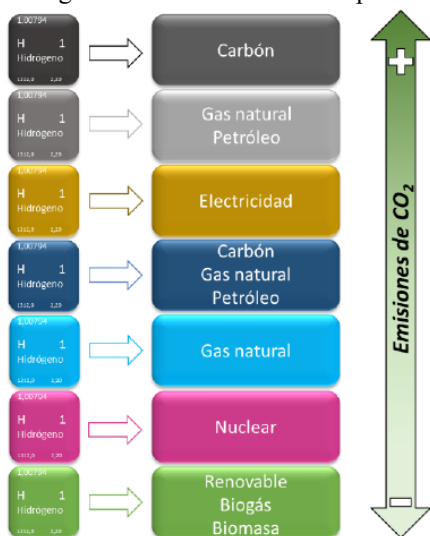
## O21: PRODUCCIÓN DE H<sub>2</sub> VERDE MEDIANTE CICLOS TERMOQUÍMICOS DE BAJA TEMPERATURA USANDO ÓXIDOS METÁLICOS NO ESTEQUIOMÉTRICOS

**A. Pérez, E. Díaz, M. Orfila, M. Linares, J. Marugán, R. Sanz, R. Molina, J.A. Botas**

*Grupo de Ingeniería Química y Ambiental, Universidad Rey Juan Carlos; c/ Tulipán s/n, 28933, Móstoles, Madrid.*

[alejandroperezd@uric.es](mailto:alejandroperezd@uric.es)

Uno de los mayores retos a los que la sociedad debe hacer frente es la búsqueda de alternativas para conseguir reducir la elevada dependencia energética de los combustibles fósiles cuyas reservas son



limitadas. Además, la descarbonización del sector energético contribuiría a reducir las emisiones de CO<sub>2</sub> y otros gases nocivos con importantes efectos medioambientales [1]. En este sentido, tanto la Unión Europea como el Gobierno de España han establecido unos objetivos concretos para la implantación de fuentes de energía limpias, tanto para la generación de electricidad como para la producción de combustibles. Es aquí donde entra en juego el hidrógeno como una alternativa muy prometedora. El hidrógeno es un vector energético cuya combustión libera energía y produce vapor de agua como único producto de combustión, además de ser neutro en carbono si se obtiene a partir de agua y fuentes de energía renovables (clasificado así como hidrógeno verde, Figura 1).

El hidrógeno verde, puede ser producido mediante ciclos termoquímicos que emplean agua como materia prima y energía solar térmica de concentración para alcanzar las temperaturas requeridas. De forma general, los ciclos termoquímicos con óxidos metálicos consisten en la reducción térmica del óxido y su posterior re-oxidación con vapor de agua produciendo así la hidrólisis de ésta que da como resultado global la disociación de la molécula de agua en H<sub>2</sub> y O<sub>2</sub>. Los

**Figura 1.** Clasificación por colores de los tipos de hidrógeno en función de las fuentes

materiales usualmente empleados en estos procesos requieren elevadas temperaturas en la etapa de reducción del óxido metálico (> 1300 °C). Por ello, es necesario encontrar nuevos materiales con menores requerimientos energéticos. Además, estos materiales deben tener buena estabilidad térmica y buenas propiedades redox. Hoy en día, los materiales de mayor interés de estudio son los óxidos mixtos de cerio con otros metales y las perovskitas [2]. Por ello, el principal trabajo desarrollado en esta línea de investigación es la búsqueda de nuevos materiales, así como su síntesis y conformado, que puedan producir H<sub>2</sub> operando a temperaturas compatibles con las tecnologías e instalaciones de energía solar térmica desarrolladas actualmente. Se han conseguido sintetizar diferentes óxidos mixtos de cerio con diferentes metales tipo Ce<sub>0.1</sub>Me<sub>0.9</sub>O<sub>2±δ</sub> (Me= Co, Ni, Fe y Cu), así como también perovskitas basadas en lantano con diferentes iones metálicos LaA'MeO<sub>3±δ</sub> (A'= Al y Ca; Me= Co, Ni, Fe y Cu) capaces de reducir la T de reducción por debajo de los 1000 °C [3]. Además, se ha diseñado un método de conformado de estos materiales para preparar rellenos en reactores solares, manteniendo buenas propiedades reactivas y resistencia mecánica.

[1] M. Mehrpooya, R. Habibi, A review on hydrogen production thermochemical water-splitting cycles, *J. Clean. Prod.* 275 (2020), 123836, <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.123836>.

[2] M. Orfila, M. Linares, R. Molina, J.A. Botas, R. Sanz, J. Marugán, Perovskite materials for hydrogen production by thermochemical water splitting, *Int. J. Hydrog. Energy* 41 (2016) 19329–19338, <https://doi.org/10.1016/J.>

[3] A. Perez, M. Orfila, M. Linares, R. Sanz, J. Marugán, R. Molina, J.A. Botas, Hydrogen production by thermochemical water splitting with La<sub>0.8</sub>Al<sub>0.2</sub>MeO<sub>3-δ</sub> (Me= Fe, Co, Ni and Cu), *Catalysis Today*. 390-91 (2022) 22-33, <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2021.12.014>.

### Agradecimientos

Los autores agradecen a la “Comunidad de Madrid” y a los “Fondos estructurales europeos” por su apoyo financiero mediante los proyectos ACES2030 (S2018/EMT-4319) y ONEHYDRO Proyecto I+D de Jóvenes Doctores (Ref. M2733). Además, este trabajo forma parte del proyecto TED2021-132540B-I00, financiado por MICIN/AEI/10.13039/501100011033 y los fondos “NextGenerationEU”/PRTR de la Unión Europea.

## O22: ORGANIC EMERGING CONTAMINANS REMOVAL FROM WASTEWATERS BY MOFs: FROM LAB-SCALE TO PILOT PLANT

**I. Rincón<sup>1</sup>, T. Hidalgo<sup>1</sup>, S. Rojas<sup>1</sup>, M. Boff<sup>2</sup>, S. Doñate<sup>2</sup>, P. Horcajada<sup>1</sup>**

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

<sup>2</sup>Departamento de Innovación, Depuración de Aguas del Mediterráneo (DAM), Av. Benjamín Franklin, 21, E-46980 Paterna, Valencia

[irene.rincon@imdea.org](mailto:irene.rincon@imdea.org)

The presence of contaminants of emerging concern in urban wastewaters became an environmental concern few decades ago, when they started to be detected at low concentrations (ng/L - µg/L) as a result of sensing technological advances. Since then, their presence in water is constantly growing as a consequence of the lifestyle change experienced by society in recent years, as for instance the increase on pharmaceutical consumption or scientific advanced leading to new contaminants generation, among others. The lack of legislation regarding emerging contaminants disposal after passing through Wastewater Treatment Plants (WWTPs)[1] leads into a highly concentrated effluent discharge, which could negatively affect to aquatic organisms living in disposal water bodies or even human health[2].

In this work, an efficient and promising technology based on Metal-Organic Frameworks (MOFs) is proposed for the removal of organic emerging pollutants in real WWTP. Based on the contaminant abundance of the effluent discharge obtained in a valencian WWTP, and structural geometrical considerations, Thiabendazole (TBZ), Carbamazepine (CMB) and Venlafaxine (VEN) were selected for this proof of concept. After a preliminary material screening of 9 MOFs with different nature and topology, a robust and ecofriendly bismuth(III) ellagate MOF (SU-101)[3] was selected for being the most efficient prototype, obtaining high removal percentages (89 % of TBZ, 44 % of CMB and 23 % of VEN under diverse batch conditions) after just 5 min of contact. To avoid overpressure problems and enhance its final application in a WWTP pilot plant, this chosen material was pelletized and then tested in co-adsorption experiments with these 3 selected contaminants under continuous flow conditions with real wastewater.

On the whole, high removal efficiencies (up to 50-80 % after 6 h) were observed, being still maintained after 6 days of continuous operation, even under the presence of other contaminants present in the used polluted water that could simultaneously be adsorbed. Further, no saturation of the MOF pores was observed for any of the 3 monitored pollutants, pointing out the active adsorptive MOF state after 6 days.

### References

- [1] Kapelewska, J., *et al.* (2018). Occurrence, removal, mass loading and environmental risk assessment of emerging organic contaminants in leachates, groundwaters and wastewaters. *Microchemical Journal*, 137, 292-301.
- [2] Gogoi, A., *et al.* (2018). Occurrence and fate of emerging contaminants in water environment: a review. *Groundwater for Sustainable Development*, 6, 169-180.
- [3] Grape, E. S *et al.* (2020). A robust and biocompatible bismuth ellagate MOF synthesized under green ambient conditions. *Journal of the American Chemical Society*, 142(39), 16795-16804.

### Acknowledgements

The authors would like to acknowledge the ESENCE Project (RTC-2019-007254-5) and MOFseidon (PID2019-104228RB-I00)



# COMUNICACIONES FLASH

## F1: HACIA EL MODELADO CFD DE PROCESOS FOTOELECTROCATALÍTICOS

**I. Villarejo<sup>1</sup>, J. Marugán<sup>1</sup>, C. Casado<sup>1</sup>**

<sup>1</sup> Departamento de Tecnología Química y Ambiental, ESCET, Universidad Rey Juan Carlos, C/ Tulipán s/n, 28933 Móstoles, Madrid, España

[irene.villarejo@urjc.es](mailto:irene.villarejo@urjc.es)

La creciente demanda poblacional e industrial de agua potable y la contaminación resultante tras el empleo de esta, ha dado lugar a un aumento en la preocupación sobre su escasez a nivel mundial abriendo aún más las puertas a la investigación basada en el tratamiento de aguas residuales para su reutilización como posible solución al aumento de la demanda. Los denominados contaminantes emergentes en el agua son una de las principales causas de preocupación por su efecto sobre la salud humana y del planeta. Con el fin de conseguir la degradación de estos contaminantes se han desarrollado las denominadas Tecnologías Avanzadas de Oxidación, que empleando la producción de radicales hidroxilos ( $\text{OH}\cdot$ ), oxidan una gran cantidad de contaminantes orgánicos. Una de las tecnologías más destacadas para la generación de estos radicales es la fotocatalisis<sup>1</sup>, que tiene como principal virtud el empleo de radiación solar como fuente de energía no contaminante y permite desarrollar el trabajo en condiciones ambientales, lo cual implica una reducción de los costes de producción y una mayor facilidad de manipulación. El rendimiento de esta tecnología puede aumentarse combinando la fotocatalisis con la electrocatalisis (fotoelectrocatalisis), mejorando la obtención de especies reactivas de oxígeno por medio de la creación de una celda fotoelectrocatalítica que combina ambos mecanismos. El desarrollo y diseño de fotorreactores es uno de los caminos para conseguir tecnologías eficientes para estos procesos. Por medio de la Dinámica de Fluidos Computacional (CFD) se permite la simulación de múltiples diseños y condiciones variables para la optimización de sistemas disminuyendo los costes económicos y temporales que suponen la realización física de los modelos. Sin embargo, la optimización de las condiciones dependientes de las geometrías, fluidodinámica o distribución de la luz para este tipo de modelos es un campo con poco desarrollo. No obstante, sí se encuentran publicaciones que presentan modelos CFD para la generación de radicales hidroxilos para el tratamiento de aguas residuales de celdas electroquímicas comerciales<sup>2</sup>. Este trabajo se basa en la validación de un método óptimo para el diseño y cálculo computacional de la fluidodinámica y el transporte de especies en una celda electroquímica. En la Figura 1 se muestra el campo de velocidades obtenido para una de las celdas electroquímicas más utilizadas comercialmente en comparación con resultados bibliográficos<sup>2</sup>. El objetivo final radica en el estudio de la eficiencia de la celda y la generación de un protocolo que llevar posteriormente a una celda fotoelectrocatalítica para su escalado industrial e implantación en sistemas de depuración de aguas residuales reales.

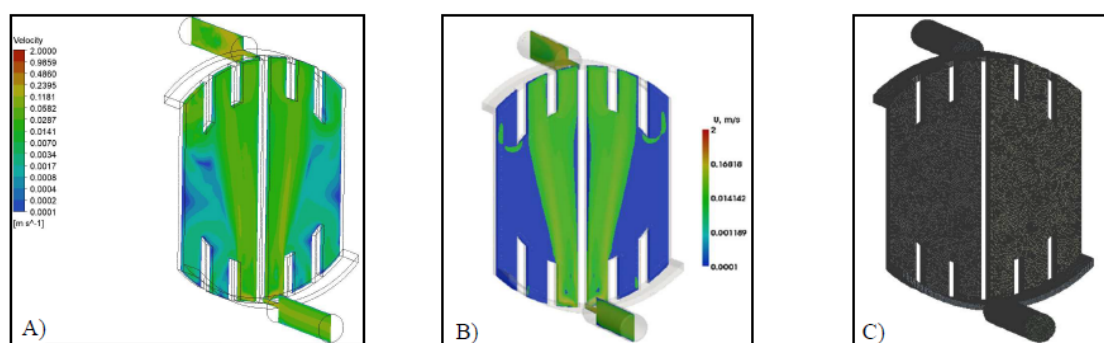


Figura 1. A) Resultados de este estudio con el programa de CFD ANSYS Fluent, B) Resultados publicados por J.L.C. Santos et al., con el programa OpenFOAM 2. C) Detalle de la malla utilizada.

### Referencias

- <sup>1</sup> Durán, Florymar Escalona et al. 2018. Journal of Electroanalytical Chemistry 818: 216–22.
- <sup>2</sup> Santos, J. L.C., V. Geraldés, S. Velizarov, and J. G. Crespo. 2010. Chemical Engineering Journal 157(2–3): 379–92.

### Agradecimientos

La autora agradece a la Comunidad de Madrid en el marco del Convenio Plurianual con la Universidad Rey Juan Carlos en la línea de actuación 1, la financiación recibida a través del Programa de “Estímulo a la investigación de jóvenes doctores”. Ref. proyecto M2728 - Acrónimo SAFECAT-AGUA.

## F2: $\text{TiNb}_2\text{O}_7$ DOPADO CON $\text{Zr}^{4+}$ Y SU USO COMO ÁNODO EN BATERÍAS DE ION LI

A. Solana-Bello<sup>1</sup>, E. García-González<sup>2</sup>, F. García-Alvarado<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Departamento de Química y Bioquímica, Universidad San Pablo-CEU (Madrid); <sup>2</sup> Departamento de Química Inorgánica, Universidad Complutense (Madrid)  
[andres.solanabello@ceu.es](mailto:andres.solanabello@ceu.es)

La fase CS tipo Wadsley-Roth  $\text{TiNb}_2\text{O}_7$  (TNO), ha surgido en los últimos años como un material prometedor para ánodo en baterías de ion Li [1]. En la actualidad, la espinela  $\text{Li}_4\text{Ti}_5\text{O}_{12}$  (LTO) ya ha sido comercializada exitosamente debido a su gran rendimiento electroquímico, demostrando un ciclo de vida prolongado durante la intercalación/desintercalación de  $\text{Li}^+$  con una capacidad específica de 175 mAh/g. En comparación con LTO, el TNO posee una capacidad específica mucho mayor (387,6 mAh/g), por la inserción de 5 Li por fórmula unidad y la transferencia de 5 electrones en los pares redox  $\text{Ti}^{4+}/\text{Ti}^{3+}$  y  $\text{Nb}^{5+}/\text{Nb}^{3+}$ . Además, la estabilidad estructural del TNO garantiza el buen funcionamiento como ánodo [2]. Estas propiedades, sin embargo, se ven eclipsadas por una baja conductividad electrónica y, además, una pobre cinética de difusión de Li. Se hace necesario, entonces, llevar a cabo estrategias para superar estos inconvenientes.

En este trabajo, realizamos sustituciones parciales de Ti por Zr para obtener la serie  $\text{Ti}_{1-x}\text{Zr}_x\text{Nb}_2\text{O}_7$  ( $x = 0 - 0.5$ ). Se ha podido comprobar la exitosa introducción de Zr en la estructura TNO. El efecto beneficioso en los valores de capacidad específica alcanza su máximo en el intervalo  $x = 0 - 0,15$ , límite de la disolución sólida. Contenidos mayores de Zr causan la formación de  $\text{Ti}_2\text{Nb}_{10}\text{O}_{29}$  como fase secundaria y una disminución en la capacidad específica de los materiales (Figura 1).

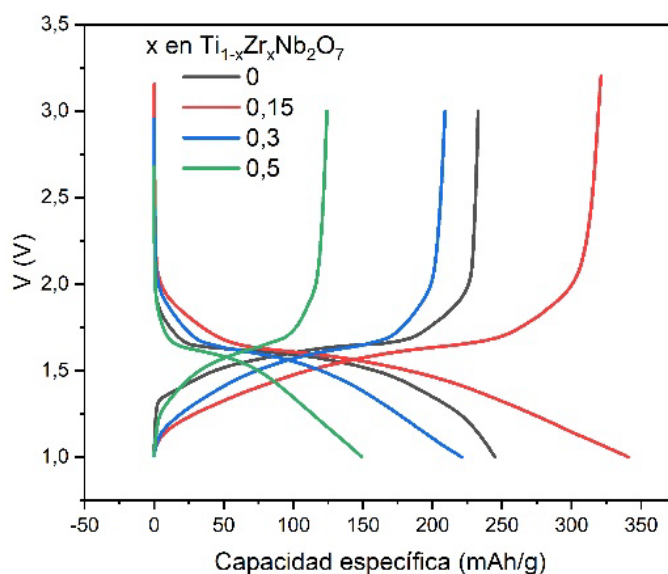


Figura 1. Perfiles electroquímicos carga/descarga de las muestras  $\text{Ti}_{1-x}\text{Zr}_x\text{Nb}_2\text{O}_7$

### Agradecimientos

Los autores agradecen a MICINN/AEI/10.13039/501100011033 por la financiación de los Proyectos PID2019-106662RB-C41 y PID2019-106662RB-C44. A. Solana Bello agradece a la AEI y al Fondo Social Europeo/UE la beca predoctoral PRE2020-093536

### Referencias

- [1] J. T. Han, Y. H. Huang, and J. B. Goodenough, "New anode framework for rechargeable lithium batteries," *Chem. Mater.*, vol. 23, no. 8, pp. 2027–2029, 2011, doi: 10.1021/cm200441h.
- [2] K. Ise, S. Morimoto, Y. Harada, and N. Takami, "Large lithium storage in highly crystalline  $\text{TiNb}_2\text{O}_7$  nanoparticles synthesized by a hydrothermal method as anodes for lithium-ion batteries," *Solid State Ionics*, vol. 320, no. December 2017, pp. 7–15, 2018, doi: 10.1016/j.ssi.2018.02.027.

### F3: DESIGN OF NEW BiOBr-ATTAPULGITE COMPOSITE FOR DEGRADATION OF POLLUTANTS IN CONTAMINATED WATERS

**A. Galán-Carrasco<sup>1</sup>, H. Pérez del Pulgar<sup>1</sup>, J. Ortiz-Bustos<sup>1</sup>, I. del Hierro<sup>1</sup>, Y. Pérez<sup>1,2</sup>**

<sup>1</sup> Grupo COMET-NANO, departamento de Biología y Geología, Física y Química Inorgánica, Universidad Rey Juan Carlos C/ Tulipán s/n 28933 Móstoles, Madrid, Spain

<sup>2</sup> Advanced Porous Materials Unit, IMDEA Energy, Av. Ramón de la Sagra 3, 28935, Móstoles, Madrid, Spain

[a.galanc.2018@alumnos.urjc.es](mailto:a.galanc.2018@alumnos.urjc.es)

The demand for potable water grows exponentially annually, so it is crucial to treat water before its use, in order to avoid the presence of any pollutants that may affect consumers [1]. This is the case of emerging contaminants (EC), which in recent years are being detected in higher concentrations, and therefore the importance of new processes that get to degrade and eliminate them. To carry out this total degradation, advanced oxidation processes are needed since conventional methods are not fully effective. Specifically, in this work, we will focus on heterogeneous photocatalysis, a process that is based on the absorption of UV, or visible light, by a solid broadband semiconductor, which modifies the speed of the reaction without being affected.

Bismuth oxybromide, BiOBr, has been used as a semiconductor for the degradation of several pollutants since it shows great qualities such as non-toxicity, stability, and easy modification [2]. However, BiOBr has a narrow band gap, close to the UV range and it's very common to modify it to enhance its photocatalytic properties [3].

In this work, we report the preparation under mild conditions of a new heterojunction formed by two different materials: BiOBr and attapulgite, a magnesium aluminium phyllosilicate widely used in medicine. The full characterization is focused on their structural and optical properties using several techniques to do so. The materials were tested for the photodegradation of a pollutant considered EC: propranolol. The novel composite shows a great activity in the degradation of the pollutant examined.

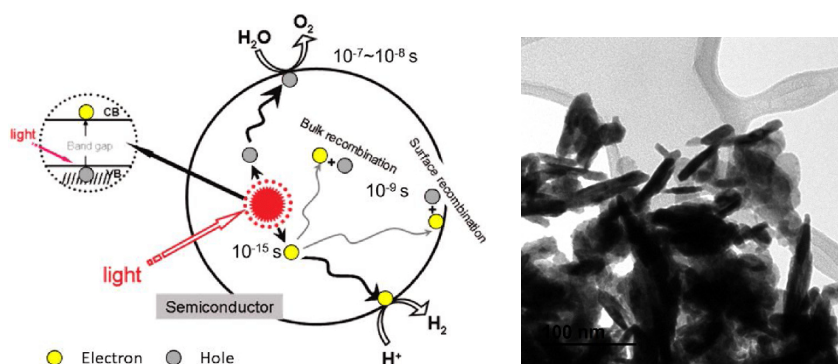


Figure 1. Schematic representation of heterogeneous photocatalysis (left) and TEM micrograph of the synthesized composite (right).

#### Referencias

- [1] Hao, Y.; Deng, Z, et al. *New J. Chem.* 2020, 44 (26), 10989–10993.
- [2] Shahbazi, M.-A.; Faghfour, L.; et al. *A. Chem. Soc. Rev.* 2020, 49 (4), 1253–1321.
- [3] Chenchui, Z.; Ying, L, et al. *RSC Adv*, 2017, 7, 52614-52620

## F4: Cs<sub>2</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>11</sub> Y DERIVADOS COMO ÁNODOS PARA BATERÍAS DE ION-LITIO

N. De la Torre<sup>1</sup>, S. F. García-Alvarado<sup>1</sup>, P. Díaz-Carrasco<sup>1</sup>, A. Kuhn<sup>1</sup>

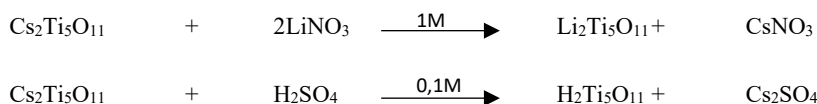
<sup>1</sup> Universidad CEU San Pablo

[natalia.torregordo@ceu.es](mailto:natalia.torregordo@ceu.es)

Las baterías de iones de litio (LIBs) son la primera elección para el almacenamiento de energía, sin embargo, hoy en día, aún se busca mejorar las prestaciones de éstas. Los titanatos han sido muy investigados en este campo, basándose la mayoría en el par redox Ti<sup>4+</sup>/Ti<sup>3+</sup>, con un potencial de inserción de aproximadamente 1,5 V frente a Li<sup>+</sup>/Li.

Cs<sub>2</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>11</sub> presenta una estructura laminar en la que los octaedros de TiO<sub>6</sub> se disponen en dos dimensiones, compartiendo aristas entre ellos para formar capas en zig-zag y compartiendo vértices escalonados. El equilibrio de carga se mantiene gracias a los iones Cs<sup>+</sup> de la capa intermedia, coordinados por los oxígenos. Se ha estudiado este sistema para uso en LIBs, ya que presenta unas buenas características de partida, sin embargo, los resultados no son prometedores (Figura 1), a diferencia de algunos de sus derivados, como Li<sub>2</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>11</sub> o H<sub>2</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>11</sub>, que presentan mejoras interesantes.

Para obtener estos derivados se llevan a cabo las siguientes reacciones:



Se ha controlado el tiempo de reacción, para obtener un intercambio de cationes completo, pudiéndose también obtener compuestos intermedios del tipo (Cs<sub>2-x</sub>Li/H<sub>x</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>11</sub>).

La estructura de estos titanatos no está completamente descrita en la bibliografía. En el caso de Li<sub>2</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>11</sub> se han realizado estudios de difracción de rayos X, EDX y SEM, así como experimentos de ciclabilidad galvanostáticos.

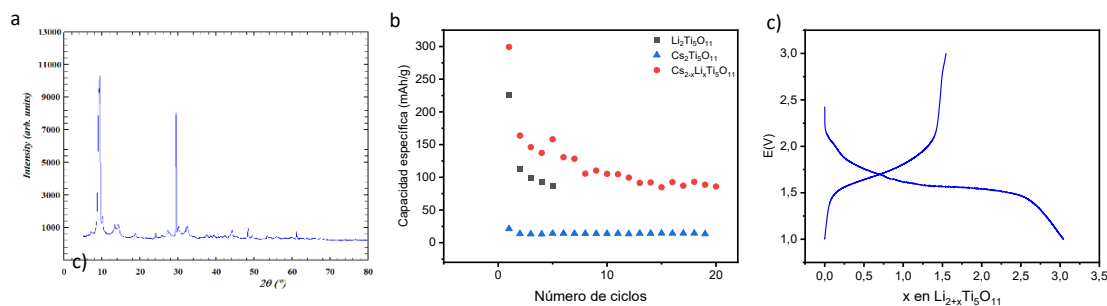


Figura 1. a) Difractograma de Li<sub>2</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>11</sub>; b) Capacidad específica vs. Li<sup>+</sup>/Li en función del número de ciclos para Li<sub>2</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>11</sub> a C/20 ;c) Primer ciclo descarga-carga a C/20.

Se ha obtenido una mejora de la capacidad específica del pentatitanato de Li respecto al de cesio, insertando una media de 3 litios por descarga. El próximo objetivo será disminuir el tamaño de partícula esperando obtener con esto una mayor capacidad de inserción.

Agradecemos a MCIN/AEI/10.13039/501100011033 la financiación del proyecto "PID2019-106662RB-C41

### Referencias

- [1]. S. Dong, N. Lv, Y. Wu, Y. Zhang, G. Zhu, and X. Dong, "Titanates for sodium-ion storage," *Nano Today*, vol. 42, p. 101349, 2022/02/01/ 2022.
- [2]. Ohashi, M. (2018) Novel Cathode Materials for Sodium Ion Batteries Derived from Layer Structured Titanate Cs<sub>2</sub>Ti<sub>5</sub>O<sub>11</sub>·(1 + x)H<sub>2</sub>O. *Materials Sciences and Applications*, 9, 526-533.

## F5: STRUCTURAL DIVERSITY OF LANTHANIDE BICOMPARTMENTAL SALEN COMPLEXES

P. Mediavilla<sup>1</sup>, Á. Gutierrez<sup>1</sup>, S. Herrero<sup>1</sup>, A. E. Sánchez<sup>1</sup>, M. C. Torralba<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, UCM, 28040 Madrid

[paulmedi@ucm.es](mailto:paulmedi@ucm.es)

Bicompartmental *salen* type ligands are widely explored due to their diverse applications and their great structural versatility. They show two cavities suitable to coordinate different types of ions: a  $N_2O_2$  inner core adequate for **3d** metal ions and a bigger outer compartment  $O_2O_2$  able to fit alkali/alkali-earth ions, **3d** ions or **4f** metals (Figure 1). They can form species with different stoichiometries, topologies and dimensionalities depending on the nature and size of the metal ions, on the coordinative ability of the counter-anion and on the bridge-length between the nitrogen atoms [1].

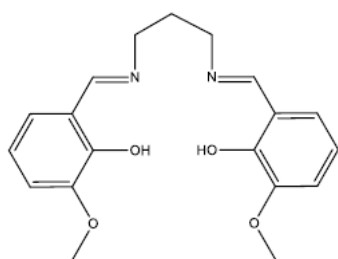


Figure 1. H<sub>2</sub>L

In the present work, we describe the synthesis and characterization of several bicompartmental *salen* type derivatives (H<sub>2</sub>L) containing lanthanide nitrates (Ln = La(III), Nd(III)) in order to study their structural characteristics and their luminescent properties. The obtained compounds show the general formulae: [Ln(H<sub>2</sub>L)(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>], [Ln(H<sub>2</sub>L)<sub>2</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>] or [Ln<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>L)<sub>3</sub>(NO<sub>3</sub>)<sub>6</sub>], but showing varied topology.

In all cases, the metal ion is hosted in the outer core of the neutral bicompartmental ligand being the phenoxo groups hydrogen-bonded to the imino nitrogen atoms. On the other hand, the NO<sub>3</sub><sup>-</sup> anions are coordinated to the lanthanide ion in either monodentate, chelate or bridging modes, being sometimes determinant in the final

network. Figure 2 shows two structural examples of one mononuclear lanthanum derivative and one polymeric neodymium compound, with the H<sub>2</sub>L ligand bridging adjacent Nd(III) ions:

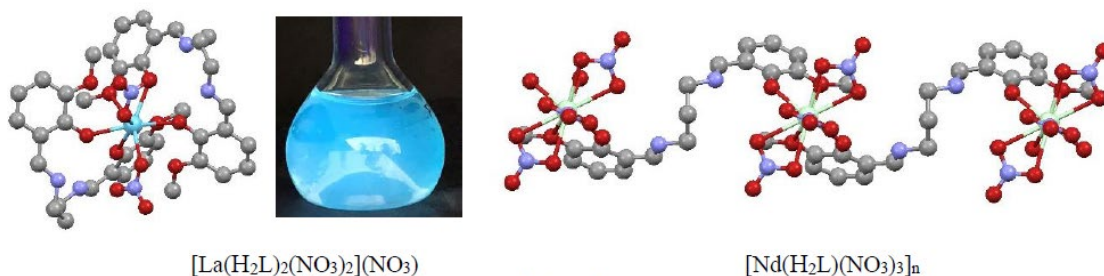
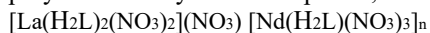


Figure 2

Unexpectedly, the lanthanum derivatives show blue emission in dichloromethane/DMSO solution. This emission has been assigned to an energy transfer between the bridging ligand and the DMSO solvent [2].

### References

- [1] a) M. Andruh, *Dalton Trans.*, 2015, 44, 16633-16653. b) X. Yang, R. A. Jones, and S. Huang, *Coord. Chem. Rev.*, 2014, 273-274, 63-75.  
 [2] Q. Zhao, X. Liu, H. Li, Y. Zhang and X. Bu, *Dalton Trans.*, 2016, 45, 10836-10841.



## F6: MAGNETIC $\text{MoS}_2$ BASED NANOCOMPOSITES FOR THE PHOTODEGRADATION OF ACETAMIPRID

L. O. Amaral<sup>1</sup>, J. Ortiz-Bustos<sup>2</sup>, Y. Pérez<sup>2,3</sup>, A. C. Estrada<sup>1</sup>, A. L. Daniel-da-Silva<sup>1</sup>, I. del Hierro<sup>2</sup>

<sup>1</sup> CICECO-Aveiro Institute of Materials, Department of Chemistry, University of Aveiro, 3810- 193 Aveiro, Portugal

<sup>2</sup> Grupo COMET-NANO. Departamento de Biología y Geología, Física y Química inorgánica, ESCET, Universidad Rey Juan Carlos.

<sup>3</sup> Grupo Advanced Porous Materials Unit, IMDEA Energy, Av. Ramón de la Sagra 3, 28935, Móstoles, Madrid.

[leonardoa@ua.pt](mailto:leonardoa@ua.pt)

Acetamiprid is an insecticide commonly used in agriculture, namely to control the proliferation of Hemiptera spp. in fruit, vegetables and ornamental plants and flowers. However, cleaning and washing processes used to remove acetamiprid and other pesticides from fruit and vegetables are generate large quantities of water with pesticides.[1] Due to the high concentration of pesticides, the resulting wastewater cannot be reused and is often discharged into wastewater treatment units, where conventional treatments may be ineffective in removing such contaminants.[1] Several methods have been developed to remediate the presence of acetamiprid and other pesticides in wastewater discharged into treatment units.[1] Rhodamine B (RhB) is also a contaminant commonly found in wastewater. RhB belongs to the wide spectrum of dye contaminants that may harm the environment when present in aqua systems. Photocatalysis is a low-cost and clean method that enables the degradation of contaminants.[2] Among the transition metal dichalcogenides,  $\text{MoS}_2$  nanomaterials have been found to be effective in removing water contaminants through photocatalysis processes.[3] Moreover, the combination of these materials with magnetic particles imparts the ensuing nanocomposites with the ability for easy, fast and cost-less recovery of the catalysts by magnetic separation.[3]

In this work, composite nanostructures of  $\text{MoS}_2\text{-Fe}_3\text{O}_4$  were produced by a new hydrothermal method. The nanostructures were characterized by transmission electron microscopy and powder X-ray diffraction and FTIR spectroscopy. Firstly, studies were conducted to verify the removal of Rhodamine B from an aqueous solution using the synthesized materials. The presence of RhB was monitored via UV-Vis spectroscopy at  $\lambda=554$  nm. In further studies, the removal of acetamiprid spiked in water samples was investigated. The concentration of acetamiprid in the aqueous samples was monitored using HPLC. The potential of using these materials in photocatalytic water treatments was evaluated according to the performance to remove both pollutants.

### Referencias

- [1] M. C. Campos-Mañas, P. Plaza-Bolaños, A. B. Martínez-Piernas, J. A. Sánchez-Pérez and A. Agüera, *Chemosphere*, 2019, 232, 152–163.;
- [2] L. Chen, Y. Chuang, T. B. Nguyen, J. Chang, S. S. Lam, C. Chen, C. Dong, *J Alloys and compounds*. 2020, 848, 156448.;
- [3] L. O. Amaral, A. L. Daniel-da-Silva. *Molecules*, 2022, 27, 6782.

### Agradecimientos

L. Amaral thanks the Fundação para a Ciência e a Tecnologia (FCT) for the PhD Grant UI/BD/151138/2021. This work was developed within the scope of the project CICECO-Aveiro Institute of Materials, UIDB/50011/2020, UIDP/50011/2020 & LA/P/0006/2020, financed by national funds through the FCT/MCTES (PIDDAC).

## F7: EL PAPEL DE LA APELINA EN EL ENVEJECIMIENTO MUSCULAR Y LA FRAGILIDAD

**E. Vicente García**

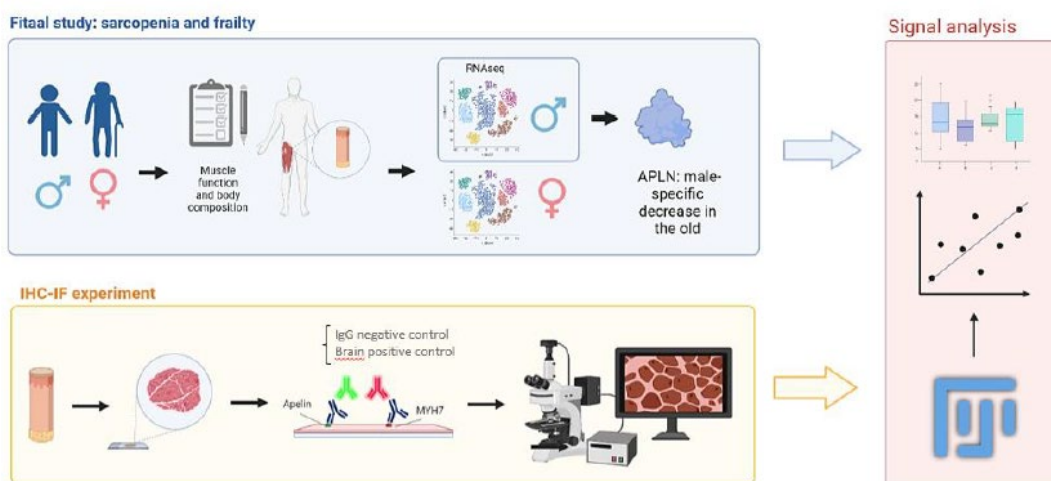
*Universidad Politécnica de Madrid*

[elena.vicente.garcia@gmail.com](mailto:elena.vicente.garcia@gmail.com)

La prevalencia de las enfermedades relacionadas con el envejecimiento muscular, como la sarcopenia y la fragilidad, ha aumentado. La sarcopenia es una enfermedad del músculo esquelético relacionada con el envejecimiento que afecta a las personas de edad avanzada. Se caracteriza por la pérdida de masa y función muscular y por la limitación del rendimiento físico general. La fragilidad se asocia con la pérdida de peso involuntaria, la disminución de la resistencia, la debilidad, la lentitud y la disminución de la actividad física. Para estudiar la sarcopenia y la fragilidad de forma más detallada, se llevó a cabo un ensayo transversal denominado estudio Fitaal, en el que se descubrió que la vía de señalización de apelina/APJ era una de las cinco vías más expresadas de forma diferencial en los hombres. Los niveles de expresión de la apelina disminuyeron con el envejecimiento sólo en los varones, y la expresión de *APJ* se correlacionó con la velocidad de la marcha también sólo en los hombres. Esto sugiere una asociación específica masculina entre el envejecimiento muscular, la fragilidad y la apelina.

La apelina es una importante mioquina que promueve la biogénesis mitocondrial y la síntesis de proteínas. Por lo tanto, el objetivo de este proyecto era explorar cómo los niveles de apelina se relacionan con el envejecimiento muscular y la fragilidad mediante el análisis de los niveles de proteína en el músculo esquelético de individuos jóvenes y ancianos, y estudiar, además, las diferencias de sexo en la expresión de la apelina en los hombres y las mujeres. Se planteó la hipótesis de que los niveles de proteína de apelina disminuirían en los varones de edad avanzada, y que los niveles de proteína de apelina serían más altos en las miofibras de tipo I (oxidativo). Además, se esperaba una correlación, exclusiva en hombres, entre el contenido de apelina y la velocidad de la marcha.

Se realizó un experimento de inmunofluorescencia (IHC-IF) en el que se tiñeron apelina y MYH7 (marcador específico de las miofibras oxidativas). Los resultados revelaron que los niveles de apelina no disminuían con el envejecimiento ni en los hombres ni en las mujeres, y que los niveles eran mayores en las miofibras de tipo I que en las de tipo II. Además, los niveles de apelina intramuscular no estaban correlacionados con la velocidad de la marcha. Es necesario realizar más investigaciones para explorar los posibles mecanismos que subyacen a los resultados obtenidos, que podrían incluir la excreción de apelina, su regulación, degradación y su relación con la atrofia de las fibras musculares.



## F8: AN ESTRADIOL-THIOSEMICARBAZONE PLATINUM COMPLEX FOR THE SELECTIVE TACKLE OF ESTROGEN-DEPENDENT TUMORS

F. Aguilar Rico,<sup>1</sup> I. Sánchez-Pérez,<sup>2</sup> A. García de Fernando Franco,<sup>1</sup> A. G. Quiroga<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Autónoma de Madrid, Department of Inorganic Chemistry.

<sup>2</sup> Universidad Autónoma de Madrid, Department of Biochemistry and Albert Sols Institute for Biomedical Research.

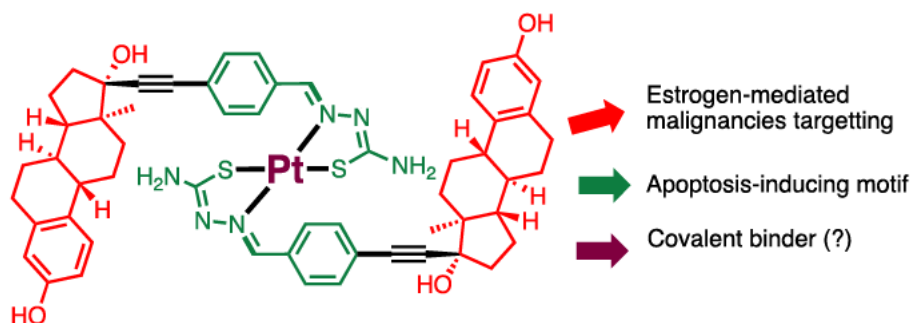
[Francisco.aguilar@uam.es](mailto:Francisco.aguilar@uam.es)

The therapeutic potential of new metallodrugs is that can tackle the complex diseases such as cancer due to their chemical versatility. Metallodrugs present metal ions in various oxidation states, coordination indexes and a diversity in their reactivity, opening great possibilities for their functionalization.<sup>1</sup> The heterogeneity of cancer requires new solutions, and this type of versatility allows adapting the design to changes required by the treatments.

There are two main problems to overcome in the actual clinical metallodrugs: the lack of selectivity and the speciation, which sometimes conceals the true active species or even result in inactive species.<sup>2</sup> The design of new metallodrugs must take both problems into consideration.

In this work we aim to tackle the first problem with the design and synthesis of a specifically functionalized thiosemicarbazone (TSCN) coordinated to platinum (II), which may preferentially affect estrogen-dependent malignancies.

We have carried out the synthesis of the TSCN through a Sonogashira coupling reaction between ethynyl estradiol and benzaldehyde, followed by a condensation with non-functionalised thiosemicarbazide; which then chelates a platinum source ( $K_2PtCl_4$  or  $[Pt(\eta^3-C_4H_7)Cl]_n$ ). The second problem has been tackled by the study of the stability of the metallodrug candidate in aqueous solution and in DMSO through UV-Vis and NMR spectroscopies. The cytotoxicity assays are currently on-going.



### References

<sup>1</sup> *Chem. Rev.* 2014, 114, 8, 4540–4563

<sup>2</sup> *Cancer Res* (2014) 74 (14): 3913–3922

### Aknowledgements

We thank financial support from the Spanish MINECO grant PID2019-106220RB-I00, as well as MultiMetDrugs network RED2018-102471T and COST-NECTAR CA18202.

## F9: NOVEL Cu & Bi PYRENE PHOSPHONATE MOFs AS PROMISING MATERIALS FOR ENERGY RELATED APPLICATIONS

**R. Serrano-Nieto<sup>1</sup>, P. Salcedo-Abraira<sup>1</sup>, C. Biglione<sup>1</sup>, N. Ureña<sup>2</sup>, T. Perez-Prior<sup>2</sup>, F. Salles<sup>3</sup>, A. Várez<sup>2</sup>, M. Cabrero-Antonino<sup>4</sup>, S. Navalón<sup>4</sup>, S. M.F. Vilela<sup>1</sup>, A. A. Babaryk<sup>1</sup>, D. Tilve-Martínez<sup>1</sup>, A. Rodríguez-Diéguez<sup>5</sup>, H. García<sup>4</sup>, P. Horcajada<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>IMDEA Energía, Unidad de Materiales Porosos Avanzados (APMU), Avda. Ramón de la Sagra 3, E-28935 Móstoles, Madrid, España

<sup>2</sup>Departamento de Ciencia de Materiales e Ingeniería Química, IAAB, Universidad Carlos III de Madrid, Leganés, Madrid E-28911, España

<sup>3</sup>ICGM, Université Montpellier, CNRS, ENSCM, Montpellier 34095, Francia

<sup>4</sup>Departamento de Química and Instituto de Tecnología Química (CSIC-UPV), Universitat Politècnica de València, C/Camino de Vera s/n, 46022, Valencia, Spain

<sup>5</sup>Biochemistry and Electronics as Sensing Technologies group (BEST), Department of Inorganic Chemistry, University of Granada. Av. Fuentenueva s/n, 18071 Granada, Spain

[ruben.serrano@imdea.org](mailto:ruben.serrano@imdea.org)

Nowadays, there is a great urgency to develop clean and sustainable technologies related to renewable energy sources, being hydrogen an alternative energy vector to fossil fuel-based energy. In this context, water splitting and proton exchange membrane fuel cells (PEMFCs) have emerged as appealing technologies to harvest and exploit the chemical energy contained in hydrogen. The water splitting process presents numerous advantages (e.g. hydrogen production process is performed under mild conditions and powered by renewable energy sources, resulting in clean energy production). However, some of the major problems of these type of reactions is the overpotential and current density required. Therefore, photocatalysts have garnered attention for their ability to harness sunlight to facilitate water splitting. Nevertheless, these photocatalysts must possess high catalytic activity, long-term stability, and photoelectric properties.<sup>[1]</sup> On another note, PEMFCs are among the most competitive fuel cells (i.e. already used in cars), as they have several advantages such as continuous operation at low temperatures and high current densities; they are also small, light and durable, shock and vibration tolerant, etc.<sup>[2]</sup> However, their commercialisation is hampered mainly by their high manufacturing cost and their loss of efficiency as the currently used electrolytes (purely organic materials) degrade over time. Therefore, the development of efficient, durable, cheap and environmentally friendly components is needed for PEMFCs.

In this context, metal organic frameworks (MOFs) have become promising materials for these topics. These 3D crystalline porous materials, based on inorganic units linked by organic polycomplexant ligands, present organized porous and well-defined structures that can be easily tuned to adjust their properties as a function of the desired application. Furthermore, they can provide high density of active sites for catalysis, and they can present a higher stability and efficient proton conducting properties under broad conditions.

In this work, three novel three-dimensional MOFs based on a photoactive pyrene tetraphosphonate ligand and different metals (Cu & Bi) denoted as IEF-8, 9 & 7 (IEF stands for IMDEA Energy Framework) have been hydrothermally synthesized and fully characterized (XRD, FTIR, TGA, SEM, XPS, etc.). Remarkably, these materials exhibit good thermal and chemical stability. Furthermore, the photocatalytic activity of Cu-based pyrene phosphonate MOFs (IEF-8 & 9) was evaluated for the first time for the challenging hydrogen evolution reaction (HER). In particular, IEF-8 exhibited a catalytic efficiency higher than the benchmarked Ti carboxylate photocatalyst MIL-125(Ti)-NH<sub>2</sub>, producing 1800 μmol·g<sup>-1</sup> after 22 h under UV-Vis irradiation in absence of any co-catalyst presenting good reusability (at least up to 4 cycles). In order to evaluate its potential as electrolyte, the proton conductivity of the pelletized IEF-7 was determined with a value of 1.39·10<sup>-2</sup> S·cm<sup>-1</sup> at 90 %RH. Also, to increase the mechanical stability of the pellets, sulfonated polysulfone (SPSU), a conductive polymeric binder (10 wt%), was added yielding conductivities as high as 9.95·10<sup>-2</sup> S·cm<sup>-1</sup>. Also, the cyclability was studied finding that IEF-7 was cyclable for at least 3 cycles.

### References

[1] Y. Shi et al., *Coord. Chem. Rev.*, **2019**, 390, 50–75.

[2] N. Guerrero et al., *Renewable Sustainable Energy Rev.*, **2015**, 52, 897-906.

### Acknowledgements

María de Maeztu IMDEA Energy Institute, the M-ERA-NET C-MOF-cell project and Retos Investigación MOFSEIDON project (PID2019-104228RB-I00, MICIU-AEI/FEDER, UE). We thank “Comunidad de Madrid” and European Regional Development

## COMUNICACIONES PREMIADAS

- COMUNICACIONES ORALES:
  - **Adelina Sonia Petcu. O15:** “Straightforward synthesis of bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]ethylated isocoumarins from 2-ethynylbenzoates”
  - **Óscar González Hervás. O10:** “Egacariocitos y plaquetas en infección respiratoria por *S. pneumoniae*. papel de TLR4”
- COMUNICACIÓN FLASH
  - **Elena Vicente García. F7:** “El papel de la apelina en el envejecimiento muscular y la fragilidad”

