

Presentación	P. 2
Presentación Ciencia Joven	P. 3
Conferencias invitadas	P. 4
Bioquímica	P. 7
Ingeniería Química	P. 10
Química Analítica	P. 17
Química Física	P. 23
Química Inorgánica	P. 24
Química Orgánica	P. 27
Tecnología de Alimentos	P. 32
Cursos de Verano	P. 33

Comité editorial: Consuelo Díaz Maroto, Juan Carlos de Haro, Antonio de la Hoz, José Luis Martín, José Fernando Pérez, Javier Torres, Florentina Villanueva.

## PRESENTACIÓN

El número de Mayo es un número monográfico dedicado a las jornadas de Ciencia Joven. Este año se ha producido un aumento del número de contribuciones y hay una serie de conferencias de gran interés.

Desde este número la revista tiene ISSN, lo que nos permitirá ampliar la capacidad de publicación. Por ejemplo los resúmenes de Ciencia Joven publicados en este número ya se considera que están publicados en una revista oficial.

Todos esperamos que esto anime a los investigadores a mandarnos cualquier información que consideréis de interés.

El consejo editorial.

## PRESENTACIÓN CIENCIA JOVEN

Los días 21 y 22 de Mayo se ha celebrado en nuestra facultad la novena edición del Simposio Ciencia Joven. Con este simposio se pretende, un año más, poner en contacto a todos los investigadores jóvenes de la facultad, con el fin de que puedan conocer el trabajo que se realiza en otras áreas y grupos de la facultad.

En esta ocasión, el comité organizador se encontró formado por Ángel Ríos, Virginia Moreno, Javier Martínez, Mónica Fernández, Ana Raquel de la Osa y Almudena Lorente, así como la colaboración de la sección territorial de la Real Sociedad Española de Química.

El gran esfuerzo y dedicación de dicho comité ha posibilitado que los jóvenes investigadores de la facultad puedan ponerse en contacto entre sí, no sólo para contar al resto los resultados más novedosos de sus investigaciones, sino también para compartir entre ellos trucos, anécdotas, apoyo y hasta descubrir que no se encuentran solos en los problemas e inconvenientes relacionados con sus investigaciones. Los momentos entre las charlas han sido testigos tanto de la colaboración entre compañeros que descubren tener problemas similares, como la comprensión y el apoyo que surge al compartir las experiencias, problemas y adversidades del día a día, y sentir que uno no se encuentra solo, sino que forma parte de una gran comunidad en la que siempre puede encontrar a alguien que está dispuesto a ayudar y colaborar. Por todo esto, puede considerarse que estas jornadas han resultado ser un gran éxito y han logrado con creces su objetivo.

Se pudo contar durante el acto de inauguración con la presencia del Excmo. Sr. Rector de la UCLM D. Miguel Ángel Collado, y durante día y medio pasaron por el salón de actos 3 conferenciantes invitados, 26 conferenciantes de la facultad y cerca de 100 asistentes. Las jornadas finalizaron con la tradicional mesa redonda, donde se trató la situación actual de la investigación y su financiación, y que contó con la presencia del Vicerrector de Investigación de la UCLM D. José Julián Garde, el Decano de la facultad Ángel Ríos, el gestor nacional de proyectos de investigación MINECO d. José Manuel Pingarrón y el colaborador del MINECO D. Miguel A. Gilarranz.



## UNA APUESTA POR LA INTERDISCIPLINARIEDAD: PREMIO NOBEL DE QUÍMICA 2014. MICROSCOPIA DE FLUORESCENCIA DE ALTA RESOLUCIÓN (NANOSCOPIO)

Miguel Valcárcel

La descripción del arduo camino de superación del límite de difracción de Abbe en microscopía óptica se materializa al pasar del microscopio al nanoscopio, que ha sido reconocido por la Fundación Nobel con el Premio de Química 2014 otorgado a tres físicos E. Bertig (USA), S.W. Hell (Alemania) y W. Moerner (USA), lo que ha levantado una gran polémica. Ésta solo se resuelve con el enfoque interdisciplinar que es el esqueleto de esta charla.

La primera parte de la exposición se dedicará a la contextualización del tema en el ámbito de la Química en general y en la generación de información (bio)química de calidad en particular.

La segunda parte se dedicará a describir sucintamente los premios Nobel de Química que fueron premiados por el desarrollo de herramientas analíticas tanto instrumentales como no instrumentales, así como a glosar brevemente la trayectoria de los tres galardonados.

La tercera parte se dedica a exponer la evolución de la microscopía de fluorescencia de alta resolución a partir de los primeros intentos de superar el límite de difracción de Abbe, que fueron la plataforma para lograr las dos opciones del nanoscopio:

- A) La Microscopía de fluorescencia de alta resolución de un conjunto de fluoróforos; y
- B) Microscopía de fluorescencia de alta resolución de un único fluoróforo. Ambos casos se ilustrarán con ejemplos representativos en el ámbito de la biomedicina.

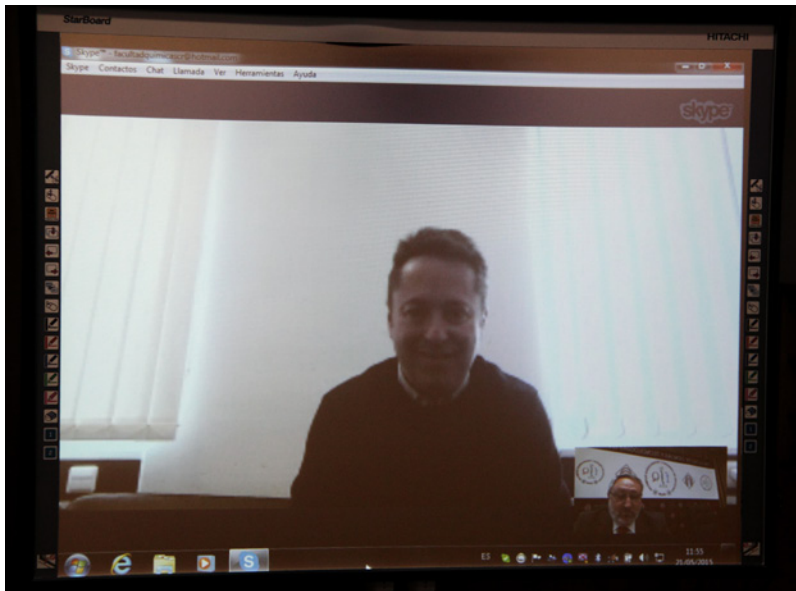
En el epílogo se insistirá en la imprescindible necesidad de que los científicos trabajen en las interfases de las áreas científico-técnicas para lograr verdaderos avances científicos, como es el caso del nanoscopio. Una gran lección de la fundación Nobel para los jóvenes científicos.



## MI TRAYECTORIA INVESTIGADORA DESDE LOS ORÍGENES HASTA SER EL DIRECTOR DE LA DIVISIÓN TEÓRICA DEL INSTITUTO MAX-PLANCK DE ÓPTICA CUÁNTICA

Juan Ignacio Cirac

Licenciado en Física Fundamental en 1988 por la Universidad Complutense de Madrid, donde también obtuvo el Título de Doctor en 1991 por el departamento de Óptica. A continuación se traslada a Ciudad Real para ejercer de profesor titular de la Universidad de Castilla-La Mancha en su departamento de Física Aplicada, puesto que ocupó hasta 1996. Durante 1993 y 1994, en régimen de año sabático, trabajó además como investigador post-doctoral en el Joint Institute for Laboratory Astrophysics (JILA) de la Universidad de Colorado (Estados Unidos). Tras su estancia en Ciudad Real y Colorado, trabajó entre 1996 y 2001 como catedrático en el Institut für Theoretische Physik en la Universidad de Innsbruck, Austria.



Desde el 2001, es director dentro de la organización del Instituto Max-Planck, de la División Teórica del Instituto Max-Planck para la Óptica Cuántica (Max-Planck-Institut für Quantenoptik), en Garching, Alemania. Es profesor invitado y asesor de investigación, desde su fundación en 2002, en el Instituto de Ciencias Fotónicas de Castelldefels (Barcelona), colaborando en el grupo de Teoría cuántica de la información.

Ha participado en proyectos de investigación en las universidades de Harvard, Hamburgo, Santa Barbara, Oxford, Hannover, Bristol, París, el Centro Saclay de Estudios Nucleares, la Escuela Normal Superior de París, y el Instituto de Tecnología de Massachusetts.

Su investigación se centra en la teoría cuántica de la información. Ha desarrollado un sistema de computación basado en mecánica cuántica que se espera permitirá diseñar algoritmos mucho más rápidos en el futuro.

Ha contribuido con aplicaciones que demuestran la viabilidad de sus postulados, efectuando cálculos imposibles con los sistemas actuales de procesamiento y transmisión de la información. De acuerdo con sus teorías, el computador cuántico revolucionará la sociedad de la información al permitir comunicaciones más eficientes y seguras. Aparte de su interés en teoría cuántica, ha investigado sobre gases cuánticos degenerados, sistemas atómicos fuertemente correlacionados y sistemas óptico-cuánticos. Juan Ignacio Cirac ha publicado más de 200 artículos en las revistas más prestigiosas, y es uno de los autores más citados de su campo.

## UNA EPIDEMIA ACTUAL: LA OBESIDAD

Ascensión Marcos



La obesidad viene definida por el acúmulo de un exceso de grasa a distintos niveles que tiene lugar en el organismo. Si esta situación se instaura en el organismo puede llegar a derivar en diversas enfermedades metabólicas con el grave riesgo para la salud. No es extraño que haya sido calificada como una inflamación crónica de bajo grado.

El origen de la obesidad es multifactorial, en el que pueden interaccionar un origen biológico o metabólico y hábitos de vida no adecuados que pueden explicar un acumulo de grasa corporal excesivo.

La obesidad es una situación de malnutrición, en contraposición a lo que se podría pensar, ya que está generada por un aporte excesivo de calorías suministradas por los macronutrientes, pero sin embargo, la ingesta de micronutrientes (minerales y vitaminas) es escasa al no

llevar el sujeto una dieta adecuada. A este consumo de calorías en demasía hay que añadir una práctica de actividad física inferior a la que se debería practicar, por lo que la conjunción de ambos factores desarrolla un acúmulo de tejido adiposo exagerado. Por todo ello, hay que tener en cuenta la genética de cada persona, así como su estilo de vida.

Nosotros coordinamos un estudio multicéntrico denominado EVASYON (Evaluación de Adolescentes con Sobrepeso Y Obesidad mediante su estado Nutricional), en colaboración con otros grupos de investigación, teniendo en cuenta la multidisciplinaridad del proceso, incluyendo en los equipos pediatras, nutricionistas, endocrinólogos, psicólogos, psiquiatras, profesionales de la actividad física y expertos de estadística. En esta presentación se incluirán los resultados que hemos encontrado en dicho estudio.



## DISEÑO DE UN PROTOCOLO EXPERIMENTAL PARA EL AISLAMIENTO DE PEROXISOMAS Y MITOCONDRIAS PARA EL ESTUDIO DEL ESTRÉS OXIDATIVO EN DIFERENTES CONDICIONES FISIOLÓGICAS

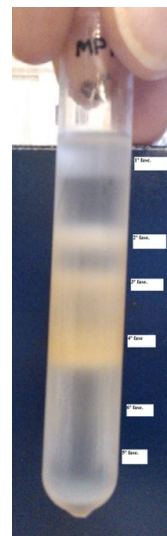
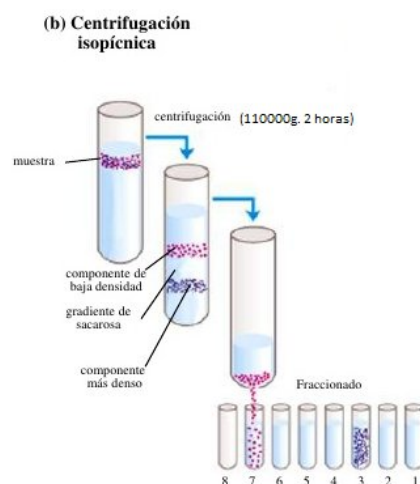
Jaime Gabriel Martín-Albo



En organismos vivos, los mecanismos moleculares que vinculan el estrés oxidativo con el envejecimiento y el desarrollo de diabetes, trastornos cardiovasculares o neurodegenerativos son complejos y aún están siendo investigados. El estrés oxidativo está causado por un desequilibrio entre la producción de especies reactivas de oxígeno (ROS) y su eliminación por los sistemas de defensa “antioxidante”, integrados por diversas enzimas detoxificantes.

El desequilibrio conlleva el aumento de ROS y de moléculas altamente reactivas que producen modificaciones químicas de lípidos, proteínas y ácidos nucleicos y que también se consideran moléculas “señalizadoras”, con capacidad para regular vías metabólicas o interferir en diversos procesos de señalización celular. Dos orgánulos productores de ROS contribuyen de forma importante en el mantenimiento de la homeostasis celular de ROS: los peroxisomas y las mitocondrias. Por otra parte, el envejecimiento de los organismos vivos se ha relacionado con producción excesiva de ROS y disfunciones mitocondriales y peroxisomales.

Por esta razón, estamos interesados en desarrollar un protocolo de aislamiento de peroxisomas y mitocondrias para estudiar los cambios que se producen en ambos orgánulos con el envejecimiento y cómo contribuyen las dietas altas en grasa en la activación de programas pro-envejecimiento asociados a la pérdida de funcionalidad mitocondrial y/o peroxisomal y aumento de la producción de ROS por el organismo.



## PAPEL DEL RESVERATROL COMO AGENTE ANTITUMORAL

Alejandro Sánchez



El cáncer constituye hoy día la principal causa de muerte a nivel mundial. Se caracteriza por el crecimiento indiscriminado y descontrolado de células anormales que presentan dos características básicas, capacidad metastásica y angiogénica. Aunque durante los últimos años se han propuesto numerosos componentes de plantas como anticancerígenos pocos han demostrado tener un efecto clínico probado en pacientes, siendo desconocidos los mecanismos de su posible efecto anticancerígeno.

El resveratrol es un polifenol presente en el vino tinto y en otros productos vegetales, que ha mostrado poseer una capacidad antioxidante

disminuyendo la toxicidad celular producida por radicales libres, los cuales se han relacionado con el cáncer.

El objetivo de nuestro estudio es valorar el posible efecto protector del resveratrol y determinar el mecanismo de tal protección incidiendo fundamentalmente en la modulación que produce sobre determinadas receptores que se sabe que están implicados en el cáncer, como son los receptores de adenosina. Para ello, utilizamos como modelo la línea celular C6 de glioma de rata que sabemos por resultados previos de nuestro grupo que expresa de manera endógena estos receptores y que se ven afectados por situaciones de hipoxia tisular. El estudio se realiza sometiendo a las células a condiciones de estrés celular con agentes oxidantes y a diferentes concentraciones de resveratrol, y valorando la viabilidad celular por métodos bioquímicos, así como la expresión de los genes de los receptores de adenosina por PCR cuantitativa en tiempo real.

Los resultados muestran que el resveratrol induce una muerte celular dependiente de la concentración y del tiempo de exposición a este polifenol. Esta muerte va asociada a alteración en la expresión génica de receptores de adenosina. Se sugiere, por tanto, un posible papel de resveratrol, presente de manera abundante en los vinos tintos de nuestra región, como antitumoral a través de un mecanismo relacionado con los receptores de adenosina.



## CONEXIONES NEURONALES ENTRE EL HIPOTÁLAMO Y EL HÍGADO. PAPEL DE LOS RECEPTORES ADRENÉRGICOS EN LA REGULACIÓN DE LA ACUMULACIÓN DE GRASA HEPÁTICA

Virginia López



Brain receives input from both nutrient-related and hormonal signals that convey information regarding levels of circulating energy substrates as well as fuel stored in the form of fat. In response to this input, key brain areas such as the hypothalamus activate pathways that regulate food intake, energy expenditure, autonomic function, glucose and lipid metabolism to maintain both energy and glucose homeostasis.

On the other hand, the brain is a major energy-consuming organ, and it depends almost entirely on glucose as a substrate. It is therefore not surprising that the plasma glucose concentration is tightly controlled by an efficient and complex regulatory neural system, where the hypothalamus is a key component of this system. Recent evidences support the existence of a brain-liver neurocircuit that plays an important role in the regulation of glucose metabolism by leptin. Like insulin, leptin activates a neural circuit between the brain and liver that regulates hepatic insulin action. This is important because an imbalance in the glucose homeostasis could cause hepatic fat accumulation.

After receiving information from afferent nerves, the hypohalamus sends signals to peripheral organs, including the liver, to keep homeostasis.

There are two ways for the hypothalamus to signal to the peripheral organs: by stimulating the autonomic nerves and by releasing hormones from the suprarenal glands, like the Catecholamine Norepinephrine, which plays a critical role in physiology, acting as a neurotransmitter and hormone, and it has been examined as exploratory biomarker in the study of many disease areas, including diabetes, heart disease, pain and anxiety. Sympathetic hepatic nerves can modulate hepatocyte function by direct action of their neurotransmitter noradrenaline on the - and -adrenergic receptors.



## SÍNTESIS DE AEROGELÉS POLIMÉRICOS DOPADOS CON NANOMATERIALES CARBONOSOS E INFLUENCIA DE LAS CONDICIONES DE OPERACIÓN EN SU PREPARACIÓN

Carolina Simón-Herrero

La producción de aerogeles ha atraído una atención considerable como consecuencia de sus excelentes propiedades físicas y químicas destacando su elevada área superficial y gran porosidad, así como su baja densidad. Estas características permiten que los aerogeles se puedan utilizar en una gran variedad de aplicaciones. Presentan unos valores de conductividad térmica extremadamente bajos que los hacen adecuados para su aplicación como aislantes térmicos en las construcciones. Además, para reforzar la estructura de los aerogeles poliméricos se adicionan nanomateriales carbonosos que mejoran de manera considerable la resistencia mecánica de los mismos.

La síntesis de estos materiales tan versátiles se lleva a cabo mediante el proceso sol-gel utilizando como método de secado del gel húmedo la liofilización o freeze-drying. La liofilización presenta como principales ventajas frente a otros métodos de secado del gel húmedo un aumento en la estabilidad del producto y una disminución de la pérdida de sustancias volátiles. Además, el producto final tiene elevada porosidad y con un contenido de humedad inferior al 5% en peso. Al emplear vacío, no hay problemas de oxidación que sí habría al utilizar otros métodos de secado del gel húmedo.

Una vez sintetizados los aerogeles dopados con nanomateriales carbonosos se realizó un estudio de la influencia de las condiciones de operación del método de secado del gel húmedo (tiempo de congelación y presión y temperatura de sublimación) sobre las características finales del producto aislante formado.



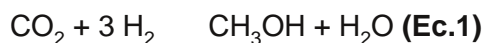
## SÍNTESIS DE METANOL A PARTIR DE CO<sub>2</sub> Y H<sub>2</sub>O MEDIANTE ELECTROCATÁLISIS Y CATÁLISIS CONVENCIONAL

Javier Díez



El agotamiento de los combustibles fósiles unido al impacto medioambiental generado de su uso, crea la necesidad de buscar soluciones y nuevas fuentes de energía limpias. Así la obtención de metanol a partir de la hidrogenación de CO<sub>2</sub> (Ec.1) se presenta como un reto científico con el que obtener un producto de valor añadido a partir de un contaminante, generalmente conocido por su participación en el efecto invernadero intensificado. Esto unido al hecho de que el hidrógeno necesario para la reacción se

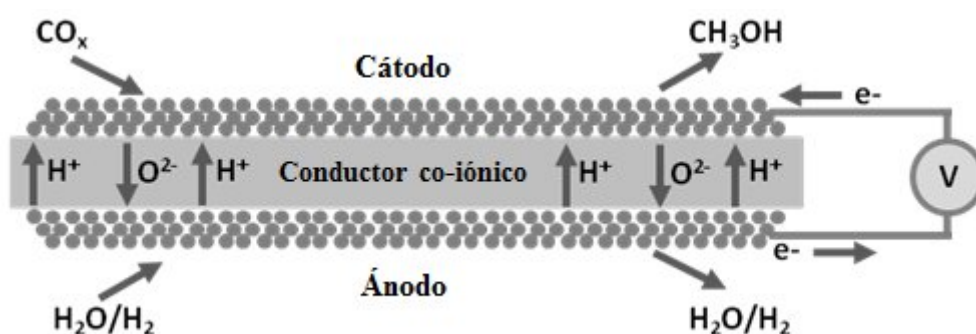
obtendría de la hidrólisis del agua utilizando la energía procedente de fuentes de energía renovables, hace de este proceso un reto prometedor aún por mejorar.



Las dos etapas principales de este proyecto son:

Estudio completo de la reacción de hidrogenación de CO<sub>2</sub> mediante catálisis convencional a presión atmosférica, utilizando diferentes tipos de metales activos, promotores y soportes para la síntesis de los catalizadores, con el fin de encontrar el catalizador que combine mayor actividad y selectividad hacia metanol.

Deposición del catalizador seleccionado en el cátodo de un sólido cerámico en un sistema electrocatalítico como el que aparece en la figura.



## SINTESIS DE GRAFENO MEDIANTE DEPOSICIÓN QUÍMICA EN FASE VAPOR USANDO DIFERENTES METALES COMO CATALIZADORES

María del Prado Lavín



El grafeno es un alótropo del carbono, con tan solo un átomo de espesor que se encuentra empaquetado en una estructura cristalina de dos dimensiones (2D). Debido a sus propiedades químicas, mecánicas, electrónicas y ópticas, el grafeno ha sido el centro de numerosas investigaciones en los últimos años. Existen diferentes métodos para sintetizar grafeno, de los cuales cabe destacar la Deposición Química en fase Vapor (CVD) por ser un método relativamente sencillo que permite sintetizar grandes áreas de grafeno. En la síntesis CVD se utilizan diversos metales de transición como catalizadores [1].

El objetivo de la presente investigación es optimizar el proceso de síntesis de grafeno mediante el método CVD, utilizando Ni y Cu como sustratos catalíticos. La optimización del proceso se ha basado en la minimización de defectos y del número de capas de grafeno presentes en el producto obtenido.

Para optimizar el proceso de síntesis CVD de grafeno, se llevó a cabo la optimización de las siguientes variables de operación: temperatura de síntesis, relación de caudales  $\text{CH}_4/\text{H}_2$ , tiempo de reacción y, caudal total de gases ( $\text{CH}_4$  e  $\text{H}_2$ ). Para ello, se diseñó una aplicación EXCEL-VBA que permite analizar el espesor del grafeno sintetizado en función de imágenes obtenidas mediante Microscopía Óptica. Dicha aplicación permite determinar el porcentaje de cada tipo de grafeno depositado sobre el catalizador metálico. Así, dependiendo de dicho porcentaje, el software asigna valores entre 1 y 1000 con los que se cuantifica el espesor del grafeno sintetizado. La unidad corresponde con grafeno multicapa, el valor de 10 es asignado al grafeno pocas capas, 100 al grafeno bicapa y por último, 1000 es el valor asignado para grafeno monocapa. A mayor valor promedio, menor será el espesor de la lámina sintetizada y por tanto menor número de capas tendrá el grafeno obtenido. Por último, mediante espectroscopia RAMAN se llevó a cabo una exhaustiva caracterización de las muestras de grafeno sintetizadas.

1. Lavin-Lopez, M.P., et al., Synthesis and characterization of graphene: Influence of synthesis variables. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 2014. 16(7): p. 2962-2970.



## DEVELOPMENT OF ANION EXCHANGE MEMBRANES FOR ELECTRO-DISINFECTION

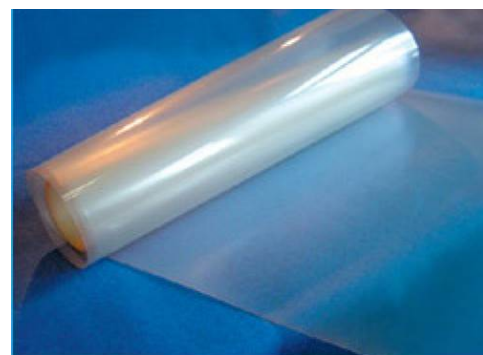
Alexandra Raschitor



Due to their effectiveness and uncomplicated management, electro-disinfection processes are being extensively used in applications such as the disinfection of swimming pools and becoming an encouraging alternative in the recovery of treated wastewater. Combining disinfection with electro-dialysis could be of interest in these processes, especially when the treated wastewater in question is to be used in irrigation, because of the high sanitary standards required to the outcoming low-salinity stream in order to prevent diseases.

In this work, ion membranes (cationic and anionic) are developed, characterized and tested for this purpose. Also, microparticles of different materials are incorporated into the matrix of the membranes with the end of behaving as bipolar electrodes and so increasing the production of disinfection reagents in the different compartments of the electrochemical cell.

Results obtained so far show that the performance of the membrane depends on the crosslinking procedure and on the type of microparticles added ( $\text{TiO}_2$  and  $\text{RuO}_2$ ). The tests demonstrate that hypochlorite can be effectively produced in the compartments placed in both sides of the membranes, demonstrating that microparticles behave as effective bipolar electrodes. Disinfection test are used as proof of concepts and they confirm the feasibility of these processes.



## MINERALIZACIÓN DE SOLUCIONES DE CARBAMAZEPINA MEDIANTE OXIDACIÓN AVANZADA CON PERSULFATO ACTIVADO

Antonio José Expósito

En los últimos años se ha producido un incremento considerable en el consumo de productos farmacéuticos. Al encontrarse estos productos conformados principalmente por moléculas orgánicas de elevada complejidad, su eliminación de las aguas mediante procesos de depuración convencionales es exigua. Por esta razón, se plantean alternativas de depuración como los procesos de oxidación avanzada (POAs), que son capaces de eliminar o simplificar dicho tipo de contaminantes

En concreto, en este estudio, se evaluó la oxidación química in-situ de una solución de carbamazepina usando aniones persulfato simultáneamente activado por energía calorífica (térmicamente, ultrasonidos), luz UV-C, iones  $\text{Fe}^{2+}$  y peróxido de hidrógeno.

El principal objetivo de los ensayos realizados fue analizar las reacciones de mineralización en las condiciones de operación estudiadas. La eliminación de carbono orgánico total (COT) fue prácticamente completa (99%) en 90 minutos, lo que evitaba la acumulación de intermedios de reacción tóxicos. La reacción de mineralización se ajusta a una cinética de pseudo-segundo orden. En condiciones ácidas, el ion  $\text{Fe}^{2+}$  tiene efecto catalítico tanto en la descomposición de peróxido de hidrógeno,  $\text{H}_2\text{O}_2$ , como en la activación del persulfato,  $\text{S}_2\text{O}_8^{2-}$ . En exceso de persulfato puede tener lugar una reacción de descomposición de persulfato improductiva (sin generación de radicales sulfato,  $\text{SO}_4^{\cdot-}$ ) o una reacción rápida entre radicales sulfato en exceso para producir aniones sulfato. Los radicales sulfato e hidroxilo,  $\text{OH}^{\cdot}$ , fueron las especies oxidantes principales en la reacción. Las influencias de la temperatura y del ion cloruro fueron también evaluadas.



Los resultados demostraron que este sistema con persulfato activado es una alternativa potencial para controlar la contaminación de las aguas causada por contaminantes emergentes como carbamazepina.

## INFLUENCE OF CARBONACEOUS ELECTRODE MATERIAL ON MICROBIAL FUEL CELL TREATING A SYNTHETIC WASTEWATER

Yeray Asensio



The use of non-renewable sources of energy, such as fossil fuels has led to a global energy crisis. Renewable bioenergy is considered as one of the ways to ensure an energy supply in the long term. Microbial fuel cell (MFC) is one of the emerging technologies that have gained increasing attention because they can treat wastewater and recovery energy at the same time. A MFC converts the chemical energy stored organic compounds into electrical energy through microorganism's activity. However, the applicability of this technology for general purposes

remains low and more information is needed on their long-term stability. Therefore, the aim of this work is to compare and assess the performance of different types of carbon-based electrodes in a dual-chamber MFC.

Three different materials were tested under the same operational conditions: carbon felt, carbon foam and carbon cloth were used as electrodes. The results demonstrate that electricity can be efficiently generated using carbon felt as anode with 180 mV of average voltage and a promising electrical power generation ( $1062 \text{ mW m}^{-2}$ ), because its surface area (higher than carbon cloth and carbon foam, favours the bacterial growth and electricity generation. At the same time, biological treatment was more efficient in terms of COD removal using carbon felt electrodes with a COD wastewater daily removals around  $1600 \text{ mg L}^{-1} \text{ day}^{-1}$  (63%).

On the other hand, the carbon cloth exhibits the lowest the values of average voltage (7.6 mV) and COD removal rate because this material is thin and has less surface area for microbial adhesion and growth. These results indicate that carbon felt is the most promising carbon-based to be used as electrode material in MFCs, as better power generation and COD abatement rate were obtained in comparison with carbon foam and carbon cloth.

## MATERIALES TERMORREGULADORES PARA LA MEJORA DEL RENDIMIENTO ENERGÉTICO DE EDIFICIOS

Ángel Serrano

Los edificios presentan una gran superficie expuesta a la luz solar, siendo posible utilizar esta energía renovable como fuente alternativa para satisfacer sus requisitos de energía térmica. Sin embargo, la baja densidad e intermitencia de esta energía obliga a su acumulación y almacenamiento. El objetivo del proyecto es el desarrollo de nuevos materiales de construcción que permitan aumentar la eficiencia energética de los edificios mediante captación pasiva, reducir las emisiones de CO<sub>2</sub> en al menos un 30%, aumentar la resistencia al fuego y mejorar la resistencia del edificio a humedades.



Para la consecución de estos objetivos se están desarrollando distintos materiales de cambio de fase o PCMs por sus siglas en inglés (Phase Change Materials). Por un lado se está llevando a cabo la producción de microcápsulas termorreguladoras mediante la técnica de Spray-Dry empleando una planta piloto con capacidad para producir 24 toneladas/año, así como la síntesis de microcápsulas por polimerización en suspensión en reactor encamisado de 10 litros de capacidad. Por otro lado también se están desarrollando nuevos PCMs sólido-sólido, para los cuales no haría falta una encapsulación previa a su incorporación en materiales de construcción.

Estos PCMs están siendo incorporados en distintos materiales de construcción: espumas de poliuretano, yesos, hormigón, ladrillos..., consiguiendo una mejora de sus propiedades térmicas sin detrimento de sus propiedades mecánicas o aislantes.

La resistencia al fuego de estos nuevos materiales de construcción se consigue mediante aditivos nitrofosfatados en los PCMs que contienen. Además, para incrementar la vida útil de estos materiales se están desarrollando nanopartículas con propiedades hidrófugas, consiguiendo así elementos impermeables pero con capacidad de transpiración.



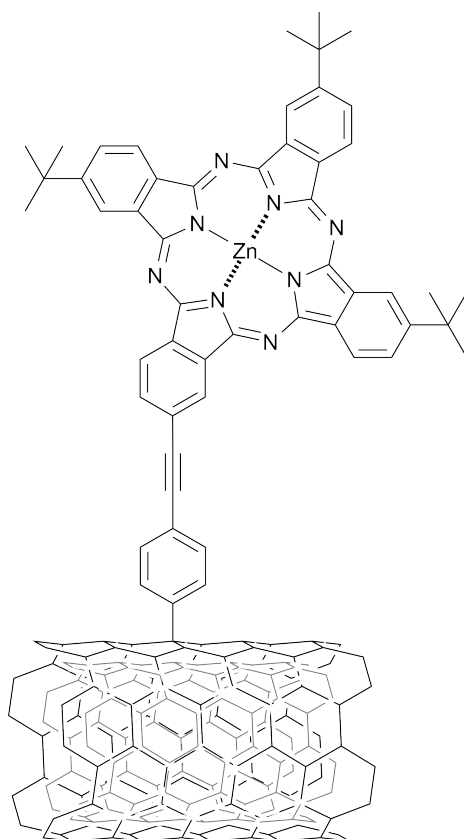
## LINKING ELECTROACTIVE UNITS TO CARBON NANOSTRUCTURES. SYNTHESIS AND PROPERTIES OF DWCNT-PHTHALOCYANINE HYBRIDS

Luis Miguel Arellano

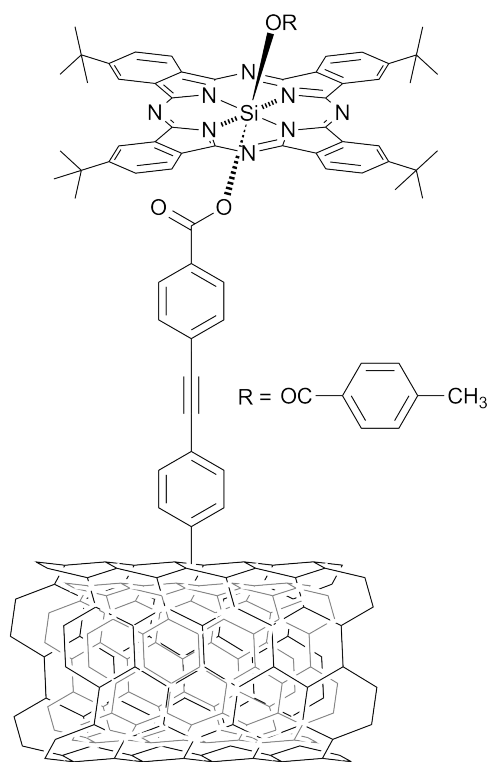


Double-Walled Carbon Nanotubes (DWCNTs) have emerged as a new interesting material due to their greater properties compared to Single-Walled Carbon Nanotubes (SWCNTs), like high mechanical resistance and better stability under chemical and thermal treatments. Their unique structure enables the outer-wall selectivity functionalization while maintaining the ballistic transport of electrons along the inner-tube. In this work, we show the first approach of Donor-Acceptor nanoensemble based on DWCNT-Phthalocyanines.

The two hybrids have been completely characterized by thermogravimetric analysis (TGA), Raman, UV-visible, X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and microscopic techniques (AFM and HR-TEM).



DWCNT-ZnPc 1



DWCNT-SiPc 2

## FLUORESCENT CHEMOSENSOR FOR PYRIDINE BASED ON N-DOPED CARBON DOTS

Carlos Abellán

Fluorescent carbon dots (CDs) and its nitrogen doped (N-CDs) nanoparticles have been synthesized from lactose as precursor using a bottom-up hydrothermal methodology. The synthesized nanoparticles have been characterized by elemental analysis, FTIR, Raman, TEM, DLS, XPS and steady-state and life-time fluorescence. The synthesized carbon nanoparticles, CDs and N-CDs, have respectively a size about 5 and 15 nm and quantum yields about 8 and 11%.

These techniques demonstrated the effectiveness of the synthesis procedure to functionalize the surface of CDs with amine and amide groups, by the presence of diluted  $\text{NH}_3$  in aqueous media. The effect of excitation wavelength and pH on the luminescent properties was analyzed. The nitrogen doped nanoparticles can be used as pyridine sensor in aqueous media because they show an enhancement of its fluorescence with a good linear relationship.

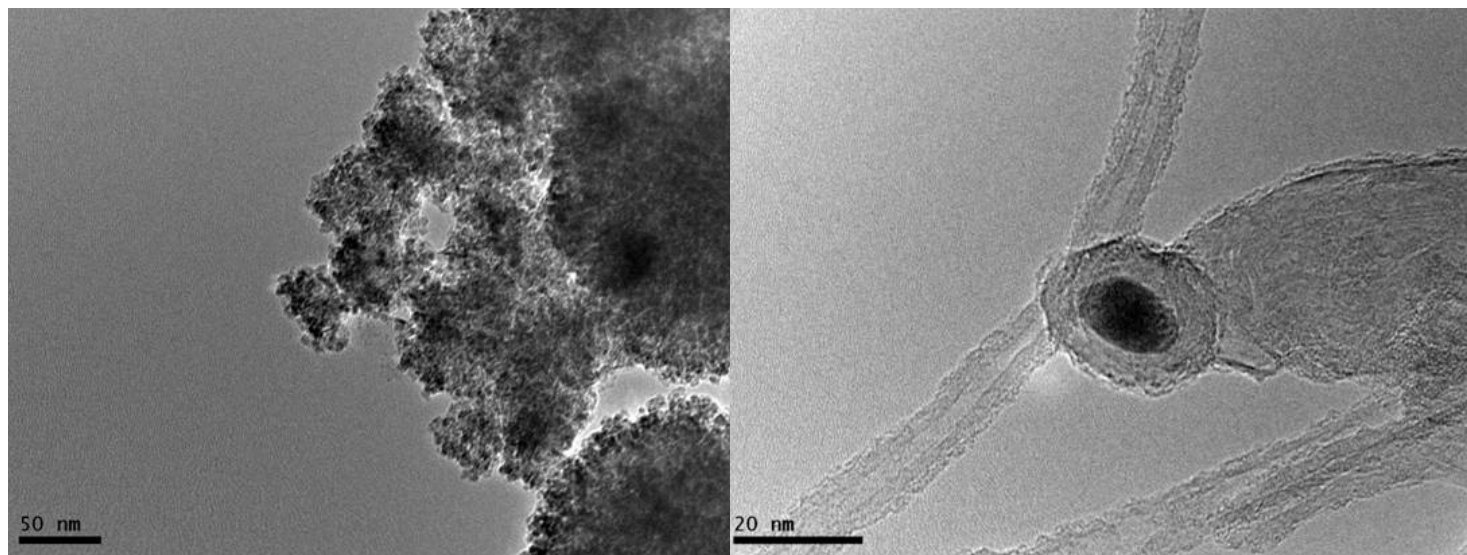


## MAGNETIC MULTIWALLED CARBON NANOTUBE SILICA COMPOSITES FOR SOLID PHASE EXTRACTION OF MACROCYCLIC LACTONE MYCOTOXINS IN FOOD SAMPLES PRIOR TO LIQUID CHROMATOGRAPHY ANALYSIS

Virginia Moreno

A simple method for the extraction of macrocyclic lactone mycotoxins from food samples has been developed. The method is based on magnetic nanoparticles (MNPs) deposited onto multiwalled carbon nanotubes (MWCNTs) and C18 as sorbent, which Magnetic nanoparticles were deposited onto multiwalled carbon nanotubes and C18 by in situ high temperature decomposition of the magnetic precursor [iron(III)], MWCNTs and C18, in ethylene glycol.

The method comprises previous clean-up and pre-concentration on hybrid nanoparticles of the analytes namely -zearalenol ( -ZOL), -zearalanol ( -ZAL), -zearalenol ( -ZOL), -zearalanol ( -ZAL), zearalenone (ZON) and zearalanone (ZAN) followed by liquid chromatographic separation.



## SILICA NANOPARTICLES IN FOOD SAMPLES

Carlos Adelantado



Silica nanoparticles are classified into the list of authorised food additives with the code E551 and, according to European legislation, maximum levels are dependant on the type of matrix in which they are contained. Synthetic amorphous silica has been employed for many years in beer and wine clearance, as well as an anti-caking agent to keep flow properties of products in powder and to thicken pastes. It has always been regarded as safe and it is approved for use as food or animal feed ingredient [1].

An easy, rapid methodology was developed to identify and to separate silica nanoparticles (SiO<sub>2</sub>NPs) of different sizes in aqueous solution, all of them below 100 nm, by coupling capillary zone electrophoresis to evaporative light scattering detector (CE-ELSD), with an interface already developed by this research group before [2]. Experimental procedure consisted of a first injection of all SiO<sub>2</sub>NPs sizes, previously purchased at commercial firms, separately in order to obtain migration times at which each size was eluted. Then, a mixture of these sizes was injected into the electrophoretic system to achieve an adequate separation of all sizes employed in a mixed buffer of ammonium acetate 3 mM, containing 1% methanol at pH 6.9. Once these conditions were fixed, 20, 50 and 100 nm were successfully separated, with peaks clearly seen on all electropherograms, an example shown on the figure.

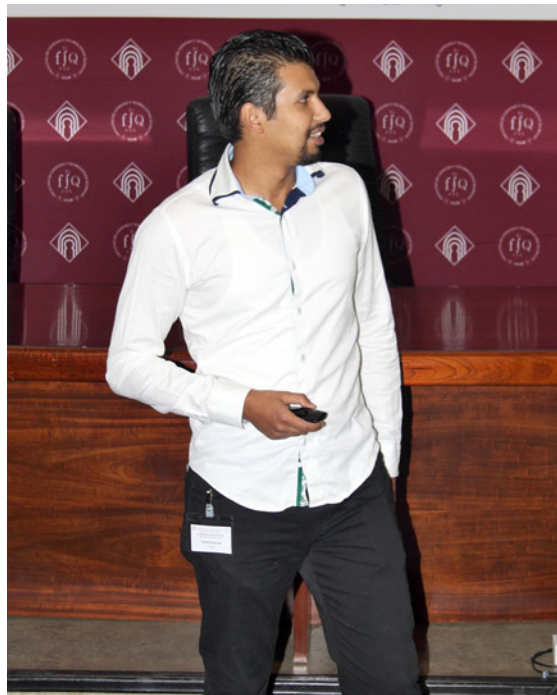
Thus, the coupling CE-ELSD was demonstrated to be an effective alternative for separation of such small sizes, which produced peaks very close to each other, and it is actually a promising technique which may permit to separate other sorts of nanoparticles, as well as the possibility to implement this methodology in agri-food samples in the near future.

[1] Athinarayanan, J., Periasamy, V. S., Alsaif, M. A., Al-Warthan, A. A. and Alshatwi, A. A. (2014) Presence of nanosilica (E551) in commercial food products: TNF-mediated oxidative stress and altered cell cycle progression in human lung fibroblast cells. *Cell Biol Toxicol*, 30, 89-100.

[2] Bouri, M., Salghi, R., Zougagh, M. and Rios, A. (2013) Design and Adaptation of an Interface for Commercial Capillary Electrophoresis-Evaporative Light Scattering Detection Coupling. *Anal. Chem.*, 85, 4858-4862.

## MAGNETIC COTTON COMPOSITES FOR SOLID PHASE EXTRACTION OF SUDAN DYES IN FOOD SAMPLES PRIOR TO CAPILLARY LIQUID CHROMATOGRAPHY ANALYSIS

Yassine Benthair and Said El Marhoum



Determination of sudan dyes (Sudan I, Sudan II, Sudan III and Sudan IV) in food samples has been developed by several and different methods. However, sample treatment continues being the most important problem to determine these compounds in real samples [1]. In this work a rapid, sensitive and selective method for the extraction, separation and quantification of sudan dyes in commercial food samples has been developed. The method is based on the combination of a magnetic solid phase extraction (MSPE), followed by the analysis of the extracted plug by capillary liquid chromatography (CLC) with diode array detection (DAD). Magnetic nanoparticles (MNPs) were deposited onto cotton by in situ high temperature decomposition of magnetic precursors [iron (II) and iron (III)] and cotton in ethylene glycol.

The entire procedure was optimized for the extraction of the samples, separation and detection of the analytes. For the MSPE, the effect sample pH, elution conditions and reusability of sorbent were studied. Linear responses in the range from 0.010 to 1  $\mu\text{g}/\text{mL}$  with average relative standard deviation lower than 7.0 were obtained for the different sudan dyes. The recoveries were in the range of 90–98% for dyes powder samples.



## DETERMINACIÓN DE COMPUESTOS ANTICANCERIGENOS EN FLUIDOS BIOLÓGICOS

Isabel Lizcaino

Dabrafenib es un fármaco utilizado en el tratamiento del melanoma irreseccable o metastásico con mutación BRAFV600 y para melanomas que se han extendido a otras partes del cuerpo o no pueden ser eliminados por cirugía. Dabrafenib actúa como un inhibidor de la enzima asociada a la proteína BRAF que desempeña un papel en la regulación del crecimiento celular. En los ensayos clínicos se ha observado que la adición del inhibidor de la proteína MEK (Trametinib) al inhibidor de BRAF (Dabrafenib), produce un retraso en la aparición de la resistencia. Esto mejoraba la respuesta al fármaco con respecto al uso único de Dabrafenib.



El uso de estas drogas es muy novedoso, y en bibliografía solo se ha encontrado un método para la determinación de Dabrafenib mediante cromatografía líquida (HPLC) para la determinación del compuesto en sangre de ratón [1]. Por ello es necesario aportar nuevos métodos analíticos que permitan un tratamiento personalizado, con el fin de poder controlar la dosis administrada en función de los parámetros biológicos de cada paciente [2]. En base a esto, nos hemos planteado el desarrollo de un método analítico para la determinación simultánea de Dabrafenib y Trametinib en suero y orina mediante electroforesis capilar con detección por espectrometría de masas, lo que nos permite obtener una alta selectividad y bajos límites de detección y cuantificación. Debido a que Trametinib no presenta carga en un amplio intervalo de pH, es necesario trabajar en medio micelar, lo cual es incompatible con el sistema de detección seleccionado. Por ello se ha recurrido a la técnica de “partial filling” que hace compatible el trabajar en medio micelar utilizando un detector de masas.

[1] Rolf W. Sparidans, Selvi Durmus. “Liquid chromatography-tandem mass spectrometric assay for the mutated BRAF inhibitor dabrafenib in mouse plasma ” *Journal of Chromatography B*, 925 (2013) 124– 128.

[2] Bershas DA, Ouellet D, Mamaril-Fishman DB. “Metabolism and disposition of oral dabrafenib in cancer patients: proposed participation of aryl nitrogen in carbon-carbon bond cleavage via decarboxylation following enzymatic oxidation “ *Drug Metab Dispos.* 41(2013) 2215-24

## DEGRADACIÓN DE HIDROFLUOROLEFINAS (HFOs) EN LA TROPOSFERA: REACCIÓN CON RADICALES OH

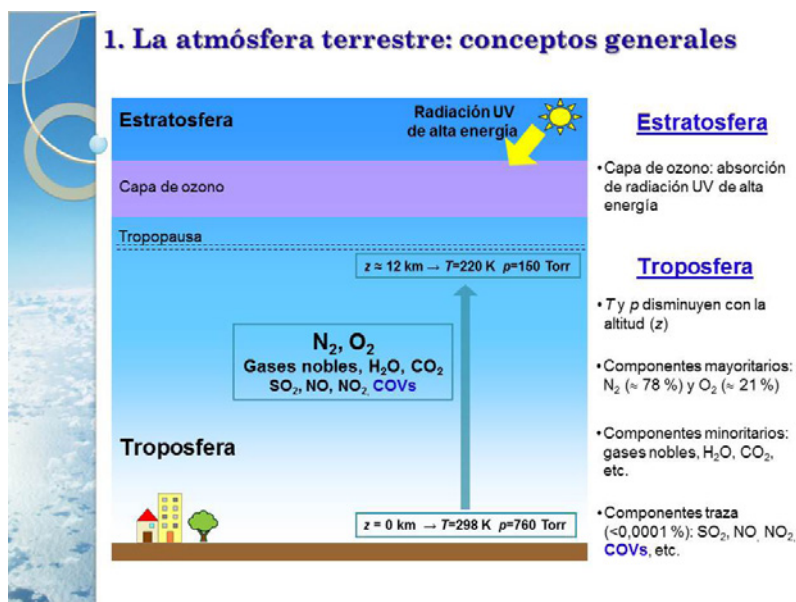
Sergio González



Los CFCs (CloroFluoroCarbonos) y HFCs (HidroFluoroCarbonos) son compuestos muy utilizados en la industria, cuya liberación a la atmósfera puede tener efectos altamente perjudiciales para el medio ambiente y la salud humana. Los largos tiempos de vida que poseen los CFCs les permiten alcanzar la estratosfera. Una vez allí, se fotolizan generando átomos de Cl que destruyen catalíticamente la capa de ozono. Además, los enlaces C F presentes pueden absorber la radiación infrarroja emitida por la Tierra y contribuir significativamente al calentamiento global del planeta. Por estos motivos, es esencial sustituir los CFCs y HFCs por otras especies menos perjudiciales lo antes posible.

Actualmente, las HidroFluoroOlefinas (HFOs) se presentan como una alternativa viable a CFCs y HFCs en un gran número de aplicaciones industriales (propelentes de aerosoles, agentes de expansión en espumas de poliuretano, refrigerantes, etc.). La ausencia de átomos de cloro reduce a cero su potencial de destrucción de ozono, y la presencia de un doble enlace incrementa su reactividad frente a los oxidantes troposféricos, limitando su acumulación en la atmósfera y, minimizando así, su contribución al efecto invernadero.

En la troposfera, la principal vía de degradación de HFOs es la reacción homogénea con radicales OH. Una manera de evaluar el impacto medioambiental de estos potenciales sustitutos de CFCs y HFCs, es estimando sus tiempos de vida troposféricos. Para ello, es necesario determinar experimentalmente las constantes de velocidad con radicales OH ( $k_{OH}$ ) en función de la temperatura y de la presión.



## HELICAL CHIRAL ALUMINIUM COMPLEXES FOR THE SYNTHESIS OF CYCLIC CARBONATES

Miguel Angel Gaona

Lack of renewable carbon sources to produce energy and the increasing concentration of carbon dioxide in the atmosphere is leading into using CO<sub>2</sub> as a sustainable chemical feedstock for the chemicals industry. One of the most studied reactions using carbon dioxide as a reactant is its reaction with epoxides in order to get either cyclic- or polycarbonates. This reaction proves to be 100% atom-economical and it's amongst the most important commercial processes using CO<sub>2</sub> as starting material. The synthesis of cyclic carbonates from carbon dioxide has been extensively investigated recently<sup>[1]</sup>.



Inspired by the data that aluminium complexes are one of the most efficient catalyst systems for this reaction<sup>[2]</sup>, the work described herein shows a rational development of a new family of helical chiral bimetallic and trimetallic aluminium complexes containing an oxo- or sulphur-bridge between aluminium centres and their application as catalysts for the conversion of epoxides into the corresponding cyclic carbonates.

[1] (a) J. Bozell, G. Peterson, *Green Chem.* 2010, 12, 539–554; (b) K. Dong, S. Zhang, *Chem. Eur. J.* 2012, 18, 2748–2761; (c) X.-B. Lu, D. Darsenbourg, *Chem. Soc. Rev.* 2012, 41, 1462–1484; (d) H. Yue, Y. Zhao, X. Ma, J. Gong, *Chem. Soc. Rev.* 2012.

[2] (a) M. North, *Arkivoc* 2012, part (i), 610–628; (b) C. J. Whiteoak, N. Kielland, V. Laserna, E. C. Escudero-Adán, E. Martin, A. W. Kleij, *J. Am. Chem. Soc.* 2013, 135, 1228–1231; (c) J. A. Castro-Osma, A. Lara-Sánchez, M. North, A. Otero, P. Villuendas, *Catal. Sci. Technol.* 2012, 2, 1021–1026; (d) J. Martínez, J. A. Castro-Osma, A. Earlam, C. Alonso-Moreno, A. Otero, A. Lara-Sánchez, M. North, A. Rodríguez-Diéguéz, *Chem. Eur. J.*, 2015, Accepted.

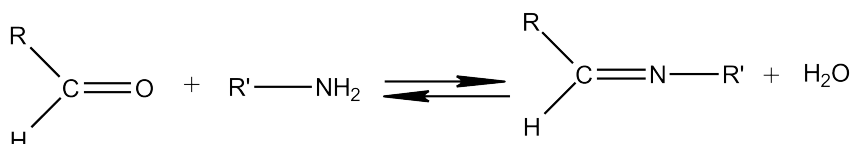


## SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE NUEVOS CATALIZADORES NI (0) CON LIGANTES TIPO BASE DE SCHIFF DERIVADAS DE 3 AMINO-PIRAZOL

Jaime Gabriel Martínez



Este proyecto se basa en la síntesis de ligandos bis (imino), utilizando reacciones de bases de schiff y sus respectivos complejos, la exploración de su química de coordinación con metales de transición, para que sirva de base en un futuro para la catálisis de la producción de fármacos y nuevos materiales. En un sentido amplio las bases de schiff son iminas N-sustituídas que se forman por condensación de una amina primaria y un compuesto carbonílico mediante una adición nucleofílica al grupo carbonilo, como se indica en la ecuación.



Es una reacción relativamente sencilla, que emplea reactivos económicos y proporciona altos rendimientos. Su estudio está ganando mucho auge por las variadas e importantes aplicaciones que tienen estos ligandos y macroligandos sintéticos, estructuralmente similares a receptores naturales, utilizados en la catálisis de fármacos, así como en la estructura misma de nuevos fármacos, frecuentemente utilizados en la Química de Coordinación por su reconocida capacidad receptora de iones metálicos para formar complejos estables poseyendo peculiares propiedades químicas, espectroscópicas y magnéticas, por lo cual en algunos casos pueden funcionar como sensores, agentes de contraste en RMN y sensores para terapia fotodinámica y diagnóstico biomédico<sup>[1],[2]</sup>.

[1] Synthesis, spectroscopic (electronic, IR, NMR and ESR) and theoretical studies of transition metal complexes with some unsymmetrical Schiff bases, Vinod P. Singh, Shweta Singh, Divya P. Singh, K. Tiwari, Monika Mishra, Journal of Molecular Structure 1058 (2014) 71–78.

[2] Synthesis, characterization and antimicrobial activities of mixed ligand transition metal complexes with isatin monohydrazone Schiff base ligands and heterocyclic nitrogen base, Jai Devi, Nisha Batra, Molecular and Biomolecular Spectroscopy 135 (2015) 710–719.

## PREPARACIÓN DE COMPUESTOS DE PLATINO (IV) COMO NUEVOS PROFÁRMACOS ANTICANCERÍGENOS. MEJORES VIAS DE ADMINISTRACIÓN Y MENORES EFECTOS SECUNDARIOS

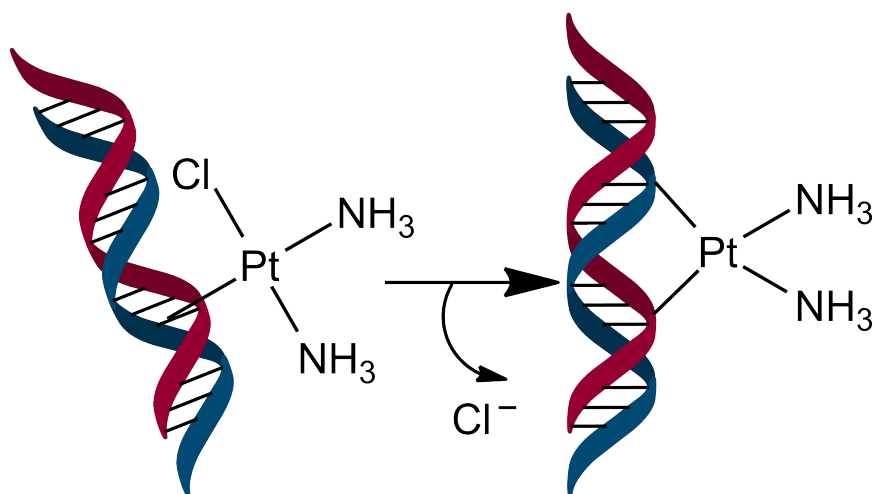
Jorge Leal



Muchos compuestos de Pt(II) han demostrado ser eficaces agentes citotóxicos y se utilizan en muchos tratamientos anticancerígenos. El Cisplatino es uno de los fármacos más utilizados en el tratamiento de tumores como el de pulmón, cabeza y cuello u ovario. Sin embargo, su baja selectividad y su reactividad provocan un elevado número de efectos secundarios, así como una disminución pronunciada del tiempo de actividad in-vivo. Se han detectado así mismo líneas celulares resistentes a dicho fármaco.

Los compuestos de Pt(IV) son prometedores profármacos para evitar estos inconvenientes ya que, debido a su mayor estabilidad, aumentan el tiempo de vida del fármaco en el organismo disminuyéndose así los efectos secundarios. El mecanismo de acción de estos complejos consiste en una reducción, selectiva en las células cancerígenas, al análogo de Pt(II), que es el compuesto que verdaderamente tiene actividad citotóxica. El mecanismo de acción más aceptado consiste en que el complejo de Pt(II) se une a las hebras de ADN activando la muerte celular por apoptosis.

Los nuevos compuestos de Pt(IV) tienen como objetivo combinar una alta actividad y una gran selectividad (especialmente frente a líneas de células tumorales resistentes a cis-platino). Para lograr este objetivo se utilizan ligandos N-dadores, que son los que han demostrado exaltar una mayor actividad, combinados con ligandos que favorezcan el transporte a través de la pared celular tumoral y posterior reducción del complejo, evitando así pérdidas de actividad y efectos secundarios.



## APLICACIONES DEL ANILLO DE TRIAZOL EN ELECTRÓNICA ORGÁNICA

Iván Torres

Vivimos en un mundo donde el campo de la electrónica está en continuo avance. Hoy en día, los polímeros pi-conjugados se presentan como alternativa al silicio, que es el material inorgánico usado por excelencia en este campo. Esto es debido a su bajo coste de fabricación, consecuencia de la posibilidad de usar procedimientos de deposición y fabricación de dispositivos desde disolución, como son el spin coating o métodos de impresión. Además, en los últimos años se está intensificando el empleo de oligómeros (moléculas discretas) en lugar de polímeros, debido a su alto grado de cristalinidad que estos presentan y consecuentemente a las elevadas movilidades de transporte de carga.

Diversos polímeros y oligómeros derivados del anillo de triazol pueden tener aplicaciones en electrónica orgánica. Así, en nuestro grupo de investigación hemos sintetizado derivados del núcleo de 1,2,4-triazol que tienen aplicaciones en cristales líquidos, los cuales pueden formar parte de pantallas líquidas y dispositivos similares. Además, presentan comportamiento como guías de onda óptica, por lo que pueden emplearse para la fabricación de diodos planos o diodos de emisión de luz orgánicos (OLEDs). Por otro lado, polímeros derivados del núcleo de 1,2,4-triazol pueden emplearse como cristales inteligentes (Smart glasses) debido a su electrocromismo.

Finalmente, la posibilidad de incorporar grupos dadores y aceptores al núcleo de triazol permite obtener compuestos de transferencia de carga interna (ITC) que tienen aplicaciones en la fabricación de células solares y de transistores de efecto campo (OFETs).



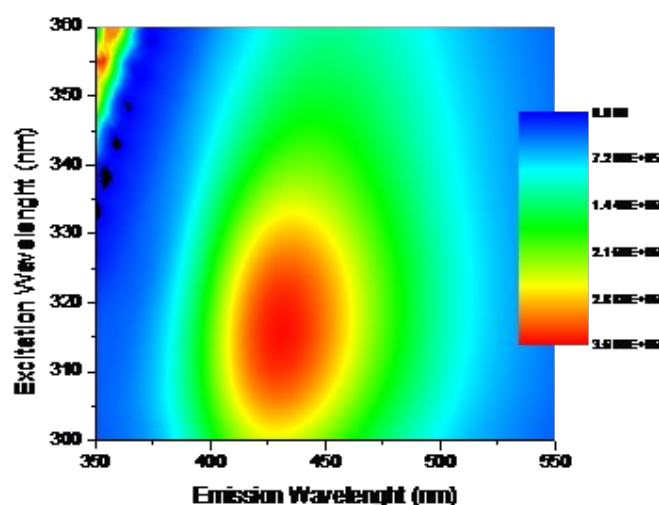
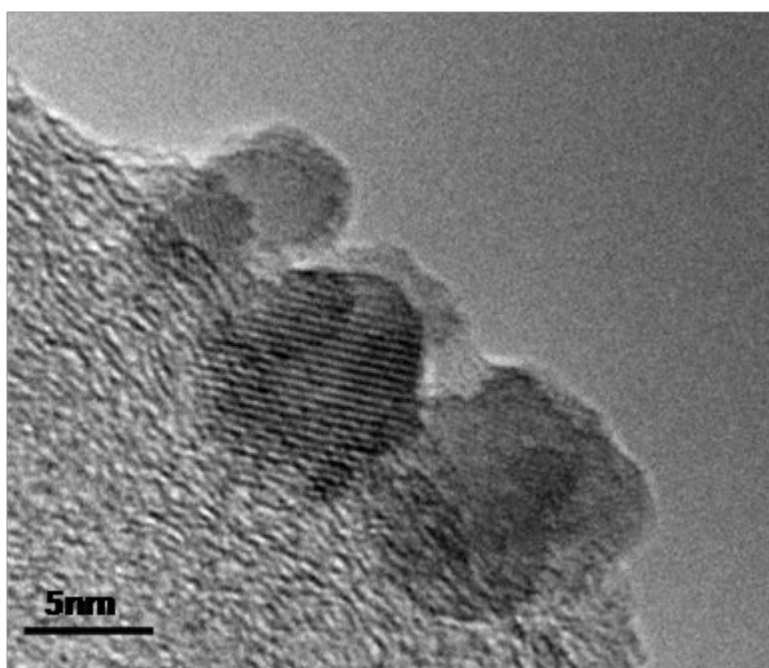
## QUANTUM DOTS DE GRAFENO, COLOREANDO LA NANOTECNOLOGÍA

Ana Martín

Los quantum dots de grafeno (GQDs) presentan interesantes propiedades fotoluminiscentes, alta solubilidad en agua y además son biocompatibles. Todas estas propiedades los hacen ideales para emplearse como sensores químicos y biológicos, marcadores e incluso como transportadores de fármacos o material genético. Actualmente, se han utilizado para la detección de iones, moléculas orgánicas o pH. Además, existen ejemplos en la literatura en los que se utilizan en bioimagen para el seguimiento de sistemas biológicos in vitro e in vivo, e incluso en fotocatalisis.



Estas excelentes propiedades nos han llevado a desarrollar un método medioambientalmente benigno, fácil y barato para preparar quantum dots de grafeno. El método se basa en la activación mecanoquímica de grafito, en ausencia de disolvente y utilizando un molino planetario de bolas. Los GQDs preparados siguiendo esta metodología presentan alta solubilidad en agua y pueden ser fácilmente modificados en su superficie para mejorar su solubilidad en disolventes orgánicos y/o introducir la molécula requerida para la aplicación final deseada. La funcionalización permite crear de igual forma sistemas específicos y al mismo tiempo evitar posibles agregaciones entre los GQDs.



## ¿RESIDUO O ENERGÍA? CONVERSIÓN DEL BAGAZO CERVECERO EN PRECURSORES DE BIOCOMBUSTIBLES

Almudena Lorente



Hoy en día uno de los temas de actualidad es el empleo de energías renovables, pues las fuentes de combustibles fósiles son limitadas y su uso conlleva una serie de problemas. La quema de combustibles fósiles emite  $\text{CO}_2$ , lo que supone mayor calentamiento global dando como resultado el conocido cambio climático.

Los abundantes recursos de biomasa se han convertido en una alternativa para el suministro sostenible de combustible. De todos los residuos de biomasa valorizables energéticamente, nuestro grupo de investigación cuenta con una amplia experiencia en los agroalimentarios, ya que éstos son ricos en hidratos de carbono, los cuales mediante radiación microondas en medio ácido se deshidratan dando lugar a compuestos de gran interés<sup>1</sup> como son el 5-hidroximetilfurfural (HMF) y el ácido levulínico (LA). Estos derivados de furano, concretamente el HMF, conllevan a la obtención de una gran variedad de productos, potenciales precursores renovables para la producción de plásticos y biocombustibles.

De este modo, el presente trabajo se centra en la deshidratación de los hidratos de carbono presentes en el bagazo cervecero, pues es un residuo que las industrias cerveceras producen en una media de 25.000 toneladas/año. Se ha observado que previa extracción del bagazo con etanol, y posterior radiación microondas en medio ácido ( $2\text{ml H}_2\text{SO}_4$ ) durante 20 minutos a  $190^\circ\text{C}$  se obtiene 10% de LA y 1% de HMF a partir de 100 mg de bagazo.

Por tanto, podemos concluir que el bagazo, como residuo en la fabricación de la cerveza, es un producto que presenta un gran futuro en materia energética.

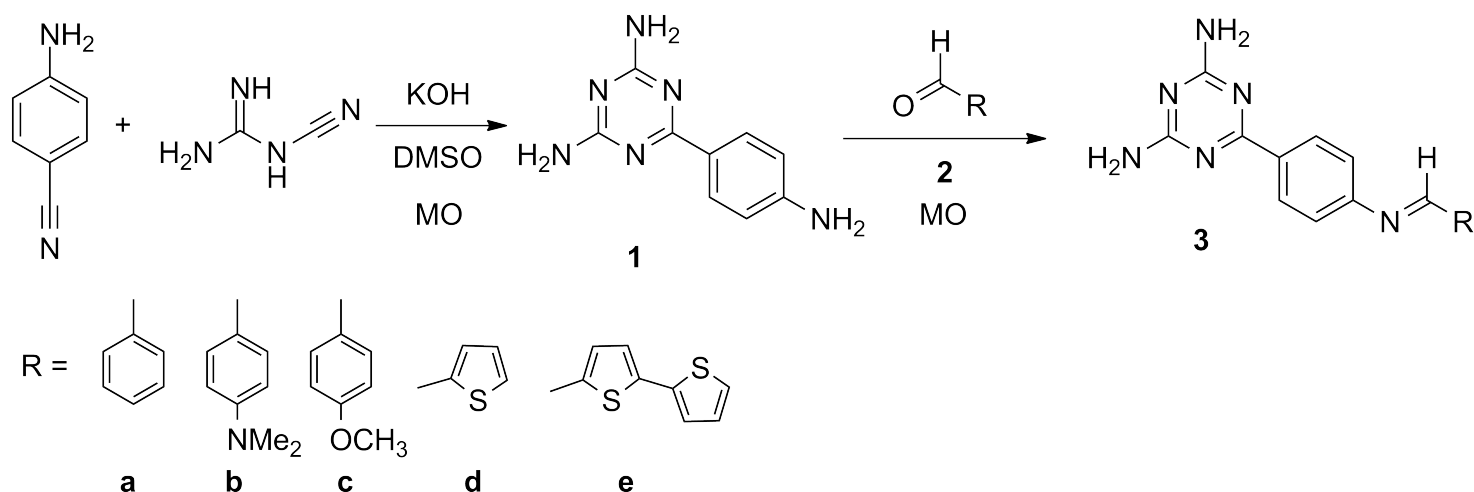
[1] Román-Leshkov, C. J. Barret, Z. Y. Liu, J. A. Dumesic, Nature Letters, 2007, 447, 982-985.

## SÍNTESIS DE DERIVADOS IMINO TRIAZINAS. PROPIEDADES ÓPTICAS

Diego Rodriguez

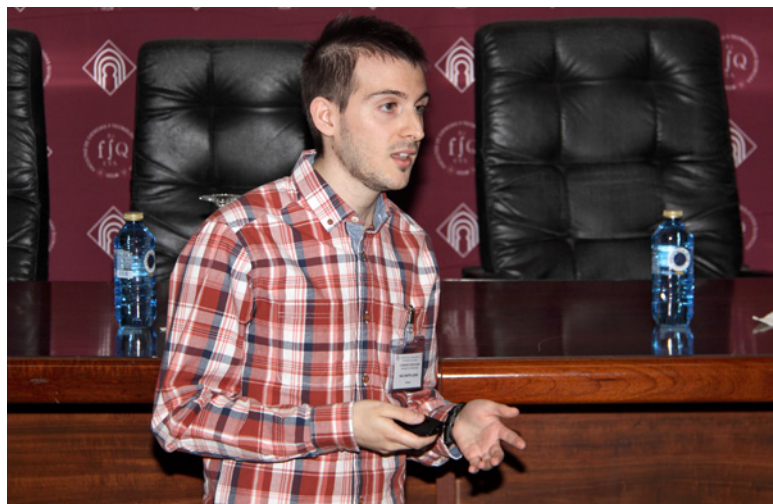
Se ha llevado a cabo la síntesis sostenible de una serie de derivados de imino triazinas (**3**), usando radiación microondas como fuente de energía en ausencia de catalizador ácido. Los compuestos sintetizados se han caracterizado por RMN e IR. Sus propiedades como sistemas Donador-Aceptor se han estudiado mediante espectroscopia UV-vis, fluorescencia y voltamperometría cíclica.

La estructura de estas imino triazinas (D-A) (**3**) se ha diseñado con objeto de estudiar su interacción con grafeno, con el fin de que se puedan usar como emisores azul en dispositivos fotovoltaicos.



## COMPUTATIONAL CHEMISTRY: A NEW WAY OF DESIGNING AND UNDERSTANDING ORGANIC CHEMISTRY

Raúl Martín



Computational Chemistry<sup>1</sup> is any aspect of chemistry that is performed by a computer and software. Mainly, we can say it is the evolution of theoretical chemistry because its main use is focused on the application of theoretical methods to solve equations and calculate molecular level properties.

Since Computational Chemistry is useful in understanding chemical systems, it is used as a learning and support tool for experimental research. This includes two main methods, molecular mechanics and quantum mechanics. It

should be pointed out that Computational Chemistry is an interdisciplinary science. In this sense, Computational Chemistry methods have nowadays entered into the toolkit of many chemists, including those mainly oriented towards synthesis, in order to understand and predict the chemical phenomena.

Our research group has broad experience on the application of computational and theoretical methods in Organic Chemistry field. Some of our studies are focused on: reaction mechanisms,<sup>2</sup> study of monoelectronic energies and topologies of HOMO-LUMO frontier orbitals,<sup>3</sup> or noncovalent interactions of different systems, among which include noncovalent interactions of a serie of aromatic derivatives with grapheme layer.<sup>4</sup>

Currently, there are specific computational chemistry software that allow make calculations, these programs differ in the method of calculus, precision and computational resources.

### References:

- 1 K. B. Lipkowitz, D.B. Boyd, Reviews in Computational Chemistry, 2002, Volume1-Volume 17, Set. Wiley.
- 2 Rodríguez, A.; Cebrián, C.; Prieto, P.; Díaz-Ortiz, A.; de la Hoz, A.; García J.I. Chemistry. A European Journal, 2012, 18, 6217-6224.
- 3 Pastor, M. J.; Torres, I.; Cebrián. C.; Carrillo. J. R.; Díaz-Ortiz. A.; Matesanz. E.; Buendía. J.; García. F.; Barberá. J.; Prieto. P.; Sánchez. L. Chem. Eur. J, 2015, 21 1795-1802
- 4 León, V.; Rodríguez, A. M.; Prieto, P.; Prato, M.; Vázquez, E. Am Chem Soc, 2013, 8, 563-571.

## EFECTO DE LA DOSIS DE (-) EPICATEQUINA EN LA PREVENCIÓN DE ENFERMEDADES CARDIOVASCULARES

María Elena Alañón

Alimentos como el vino, chocolate, té y los arándanos han demostrado ser alimentos cardiosaludables gracias a diversos estudios de intervención clínicos en humanos. Los beneficios cardiovasculares de estos alimentos en la función endotelial, la presión sanguínea, la agregación plaquetaria así como en la mediación de los procesos de inflamación parecen ser atribuibles al alto contenido de flavanoles que presentan.

Es importante destacar que la bioactividad de los flavanoles parece estar vinculada no sólo al tipo y estructura del flavanol, sino también a la concentración detectada en el sistema circulatorio después de su ingesta. Por lo tanto, y con el fin de obtener una comprensión completa del papel de los flavanoles en la prevención de enfermedades cardiovasculares es necesario conocer su absorción, metabolismo y excreción en individuos de diferentes poblaciones además de determinar como la matriz alimentaria y la interacción nutriente-nutriente puede influir en los procesos de absorción, metabolismo y excreción.

La (-) epicatequina es uno de los flavanoles mayoritarios en alimentos como el chocolate, te, y vino cuya biodisponibilidad, es además muy superior al de otros flavanoles. Por lo tanto con el fin de profundizar en el papel que los flavanoles poseen en la prevención de enfermedades cardiovasculares, se llevó a cabo un estudio clínico agudo y crónico en humanos con el fin de evaluar el efecto de diferentes dosis de (-) epicatequina en el sistema cardiovascular.





# cursos de verano15

## CURSO DE VERANO

### **Grafeno: Un material, numerosas aplicaciones**

25 y 26 de junio de 2015

Aula Magna del edificio 37

Fábrica de Armas

Toledo

#### **DIRECCIÓN:**

Dr. D. Fernando Langa de la Puente  
Catedrático de Química Orgánica  
Universidad de Castilla-La Mancha

#### **SECRETARÍA:**

Dr.<sup>a</sup> Pilar de la Cruz Manrique  
Profesora Titular de Química Orgánica  
Universidad de Castilla-La Mancha

#### **DIRIGIDO A:**

Todos aquellos titulados o estudiantes en las áreas de química, física, ingenierías, ciencia de materiales, bioquímica, farmacia y medicina que estén interesados en conocer las propiedades y aplicaciones de un material tan extraordinario como es el grafeno.

#### **OBJETIVOS:**

El objetivo de este curso es dar a conocer a los alumnos las excelentes propiedades del grafeno y sus aplicaciones en el diseño de nuevos materiales.

Límite de matrícula: 15 de junio

#### **Día 25 de junio**

09:00 h. Entrega de documentación

09:45 h. Presentación

Dr. D. Fernando Langa  
Catedrático de Química Orgánica  
Universidad de Castilla-La Mancha (INAMOL)

10:00 h. *El tsunami del grafeno*

Dr. D. Rodolfo Miranda  
Catedrático de Física  
Universidad Autónoma de Madrid / Director del IMDEA Nanociencia

11:30 h. *Nano-óxido de grafeno: posible terapia anti cáncer*

Dr.<sup>a</sup> María Vallet  
Catedrática de Química Inorgánica  
Grupo de Investigación Biomateriales Inteligentes -GIBI-UCM

12:30 h. *Dopaje del grafeno y su aplicación en dispositivos optoelectrónicos*

Dr. D. Pedro Atienzar  
Investigador  
Universidad Politécnica de Valencia (UPV-CSIC)

16:00 h. *Electrónica basada en grafeno*

Dr. D. José María Tirado  
CD Escuela de Ingenieros Industriales (Toledo)  
Universidad de Castilla-La Mancha

17:00 h. *Graphene grafted with water-soluble polymers for electrochemical biosensors*

Dr. D. José Manuel Pingarrón  
Catedrático de Química Analítica  
Universidad Complutense de Madrid

#### **Día 26 de junio**

09:30 h. *Chemical design of hybrid materials based on graphene and inorganic graphenoids*

Dr. D. Carlos Martí-Gastaldo  
Investigador ICMol-UV

10:30 h. *Estudio y caracterización de grafeno mediante microscopía de fuerzas atómicas*

Dr.<sup>a</sup> Lorena Welte  
Investigadora

12:00 h. *Funcionalización química del grafeno*

Dr.<sup>a</sup> María José Gómez-Escalonilla  
Profesora Titular de Química Orgánica  
Universidad de Castilla-La Mancha

Organiza:



Patrocina y colabora:



Cuota de matriculación: Cuota única de 50 Euros  
Las inscripciones podrán formalizarse a través de:  
- <http://cursosdeverano.uclm.es>

- Las Unidades de Extensión Universitaria de cada campus  
El curso tiene validez de 1 Crédito ECTS para titulaciones de grado de la UCLM, para ello la Dirección establecerá las condiciones que deberán cumplir los alumnos matriculados.

Universidad de Castilla-La Mancha  
Vicerrectorado de Cultura y Extensión Universitaria  
<http://cursosdeverano.uclm.es> | e-mail: [cursos.verano@uclm.es](mailto:cursos.verano@uclm.es)



En el próximo número de Molécula...

En el número de junio recopilaremos las Tesis defendidas y las Conferencias impartidas en los dos últimos meses. También nuestras habituales secciones de investigación y cafetería.