

SAQA V Lunes 14 Diciembre	
9:30	Introducción y bienvenida Francisco Ortega Gómez (Decano de la Facultad de Ciencias Químicas) y José María González Calbet (Coordinador del programa de doctorado en Química Avanzada)
Inicio Charlas	
10:00	David Vicente Zurdo ``Evaluation of selenium species as potential multifunctional compounds for alzheimer's disease treatment''
10:15	Beatriz Mayol Hornero ``Nanomáquinas mesoporosas luchando contra el cáncer''
10:30	Irene Abelenda Núñez ``Colloidal diffusion in GUVs as model of confined environments''
10:45	Andreas Santamaría ``Endocytosis across scales: from molecular structures to a functional''
11:00	Pablo Salcedo ``Nuevas redes metal-orgánicas y composites: síntesis y aplicaciones''
11:15	Descanso
12:00	Abel Milena Perez ``Estudios de oxidación de UO ₂ en condiciones de almacenamiento temporal en seco''
12:15	Vanesa Manzaneda González ``Síntesis y modificación superficial de nanopartículas de oro''
12:30	Enrique Rojas García ``Desarrollo y materiales para sondas multiorificios para medida de emisiones quasi representativas en chimeneas de sección rectangular y baja altura para aplicación en banco de ensayos para turborreactores''
12:45	Alvaro Luque Uría ``Mimotope-based immunoassays for the detection of mycophenolic acid''
13:00	Esther Gómez Mejía ``Development of an extraction method for the recovery of bioactive polyphenols from wine by-products''
13:15	Cierre de la sesión

SAQA V Martes 15 Diciembre	
9:45	Introducción Enrique Setien Martínez (Consultor Senior)
Inicio Charlas	
10:00	Paloma de Oro Carretero ``Método alternativo para el estudio de la bioacumulación y metabolización del bde-47 usando larvas de pez cebra''
10:15	Saúl Ismael Utrera Barrios ``Mecanismos de autorreparación intrínseca en compuestos elastómeros''
10:30	María del Mar Darder Amengual ``Development of a formaldehyde sensor for industrial environments''
10:45	Irene Barba Nieto ``Desarrollo de materiales basados en TiO ₂ para fotoproducción de H ₂ ''
11:00	Fernando Gabriel Martínez ``Selenium enrichment of fermented beverages with selenized lactic acid bacteria''
11:15	Descanso
12:00	Arkaitz Anderez Amorrostoa ``Síntesis de materiales a partir de aguas de decapado de aceros al carbono y acero galvanizado''
12:15	Sandra Muñoz Piña ``Growth of nanoclumnar thin films on patterned substrates deposited by magnetron sputtering at oblique angles''
12:30	Alejandro Iglesias Jiménez ``Empleo combinado de SeNPs y cisplatino para la mejora de tratamientos contra el cáncer''
12:45	Cristina Muñoz San Martín ``Assisting Diagnosis and staging of prevalent cancers by targeting specific proteases and hipoxia biomarkers using electrochemical biosensors''
13:00	Antonio Molina ``Polímeros conjugados porosos redox basados en antraquinona para bacterias de litio de alto rendimiento''
13:15	Cierre de la sesión

V SIMPOSIO ANUAL EN QUÍMICA AVANZADA (COVID EDITION)



14 y 15 de diciembre de 2020

**Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de
Madrid, España**



Organizadores:

Irene Abelenda Núñez

Enrique Rojas García

Aarón Terán More

David Vicente Zurdo

Patrocinadores:



ÍNDICE

– PROGRAMA.....	1
– Estudios de difusión coloidal en GUVs como modelos de entornos confinados. Colloidal diffusion in GUVs as models of confined environments	3
– Síntesis de materiales a partir de aguas de decapado de aceros al carbono y acero galvanizado.....	4
– Desarrollo de materiales basados en TiO ₂ para fotoproducción de H ₂	5
– Development of a formaldehyde sensor for industrial environments	6
– Método alternativo para el estudio de la bioacumulación y metabolización del bde-47 usando larvas de pez cebra.....	7
– Mecanismos de autorreparación intrínseca en compuestos de elastómeros	8
– Selenium enrichment of fermented beverages with selenized lactic acid bacteria.....	9
– Development of an extraction method for the recovery of bioactive polyphenols from wine by-products	10
– Empleo combinado de SeNPs y cisplatino para la mejora de tratamientos contra el cáncer	11
– Mimotope-based immunoassays for the detection of mycophenolic acid.....	12
– Síntesis y modificación superficial de nanopartículas de oro.....	13
– Nanomáquinas mesoporosas luchando contra el cáncer	14
– Estudios de oxidación de UO ₂ en condiciones de almacenamiento temporal en seco	15
– Polímeros conjugados porosos redox basados en antraquinona para baterías de litio de alto rendimiento	16

- Growth of nanocolumnar thin films on patterned substrates deposited by magnetron sputtering at oblique angles..... 17
- Assisting diagnosis and staging of prevalent cancers by targeting specific proteases and hypoxia biomarkers using electrochemical biosensors .. 18
- Desarrollo y materiales para sondas multiorificios para medida de emisiones quasi representativas en chimeneas de sección rectangular y baja altura para aplicación en banco de ensayos para turborreactores 19
- Nuevas redes metal-orgánicas y composites: síntesis y aplicaciones... 20
- Endocitosis a diferentes escalas: desde la estructura molecular a la funcionalidad. Endocytosis across scales: from molecular structures to a functional 21
- Evaluation of selenium species as potential multifunctional compounds for alzheimer's disease treatment 22

PROGRAMA

Lunes 14 de diciembre de 2020

9:30 Introducción y bienvenida

Francisco Ortega Gómez (Decano de la Facultad de Ciencias Químicas) y José María González Calbet (Coordinador del programa de doctorado en Química Avanzada)

Inicio charlas

10:00 David Vicente Zurdo

“Evaluation of selenium species as potential multifunctional compounds for alzheimer’s disease treatment”

10:15 Beatriz Mayol Hornero

“Nanomáquinas mesoporosas luchando contra el cáncer”

10:30 Irene Abelenda Núñez

“Colloidal diffusion in GUVs as model of confined environments”

10:45 Andreas Santamaría

“Endocytosis across scales: from molecular structures to a functional”

11:00 Pablo Salcedo

“Nuevas redes metal-orgánicas y composites: síntesis y aplicaciones”

11:15 Descanso

12:00 Abel Milena Pérez

“Estudios de oxidación de UO₂ en condiciones de almacenamiento temporal en seco”

12:15 Vanesa Manzaneda González

“Síntesis y modificación superficial de nanopartículas de oro”

12:30 Enrique Rojas García

“Desarrollo y materiales para sondas multiorificios para medida de emisiones quasi representativas en chimeneas de sección rectangular y baja altura para aplicación en banco de ensayos para turborreactores”

12:45 Alvaro Luque Uría

“Mimotope-based immunoassays for the detection of mycophenolic acid”

13:00 Esther Gómez Mejía

“Development of an extraction method for the recovery of bioactive polyphenols from wine by-products”

13:15 Cierre de la sesión

Martes 15 de diciembre de 2020

9:45 Introducción

Enrique Setien Martínez (Consultor Senior)

Inicio charlas

10:00 Paloma de Oro Carretero

“Método alternativo para el estudio de la bioacumulación y metabolización del bde-47 usando larvas de pez cebra”

10:15 Saúl Ismael Utrera Barrios

“Mecanismos de autorreparación intrínseca en compuestos elastómeros”

10:30 María del Mar Darder Amengual

“Development of a formaldehyde sensor for industrial environments”

10:45 Irene Barba Nieto

“Desarrollo de materiales basados en TiO₂ para fotoproducción de H₂”

11:00 Fernando Gabriel Martínez

“Selenium enrichment of fermented beverages with selenized lactic acid bacteria”

11:15 Descanso

12:00 Arkaitz Anderez Amorrostoa

“Síntesis de materiales a partir de aguas de decapado de aceros al carbono y acero galvanizado”

12:15 Sandra Muñoz Piña

“Growth of nanoclumnar thin films on patterned substrates deposited by magnetron sputtering at oblique angles”

12:30 Alejandro Iglesias Jiménez

“Empleo combinado de SeNPs y cisplatino para la mejora de tratamientos contra el cáncer”

12:45 Cristina Muñoz San Martín

“Assisting Diagnosis and staging of prevalent cancers by targeting specific proteases and hipoxia biomarkers using electrochemical biosensors”

13:00 Antonio Molina

“Polímeros conjugados porosos redox basados en antraquinona para bacterias de litio de alto rendimiento”

13:15 Cierre de la sesión

Estudios de difusión coloidal en GUVs como modelos de entornos confinados. Colloidal diffusion in GUVs as models of confined environments

Irene Abelenda Núñez

Departamento de Química Física, Facultad de Química, Universidad Complutense de Madrid, Av. Complutense, s/n, 28040 Madrid

irenabel@ucm.es

Resumen

Los estudios en la dinámica de la materia coloidal en medios confinados están muy presentes en la ciencia y la tecnología actual. Conocer la difusión de biomacromoléculas dentro de la región citoplasmática de las células es probablemente el paradigma de la difusión coloidal en entornos confinados. Esto hace necesario comprender la difusión de coloides dentro de ambientes confinados de interés biológico para arrojar luz sobre diferentes problemas de relevancia biológica y médica. En este trabajo se explora el movimiento térmico de micropartículas blandas esféricas coloidales dentro de la cavidad interna de vesículas gigantes obtenidas a través de la técnica de electroformación [1] utilizando el seguimiento de una sola partícula encapsulada. Se analizaron cuatro aspectos diferentes para este estudio: (i) el carácter de difusión; (ii) la dimensión del volumen de confinamiento, (iii) la naturaleza química de la membrana de la vesícula, y (iv) la naturaleza química del volumen encapsulado. Se comprobó como las micropartículas dentro del entorno acuoso contenido dentro de la región interna de las vesículas poseían una difusión no browniana. Además, se observó como el coeficiente de difusión dependía fuertemente tanto del tamaño de las vesículas como de la naturaleza química de la membrana de la vesícula y de la naturaleza química del medio encapsulado.

Abstract

Studies on the dynamics of colloidal matter in confined media are very present in current science and technology. The understanding of the diffusion of biomacromolecules within the cytoplasmic region of cells is probably the paradigm of colloidal diffusion in confined environments. This makes necessary to study the diffusion of colloids within confined environments of biological interest to shed light on different problems of biological and medical relevance. This work explores the thermal motion of spherical soft colloidal microparticles within the inner cavity of giant vesicles obtained through the electroformation technique [1] using single particle tracking. Four different aspects were analyzed for this study: (i) character of diffusion; (ii) size of the confinement volume, (iii) chemical nature of the vesicle membrane, and (iv) chemical nature of the encapsulated volume. It was found that the microparticles within the aqueous environment contained within the internal region of the vesicles had a non-Brownian diffusion. In addition, it was observed that the diffusion coefficient strongly depends on both the size of the vesicles and the chemical nature of the membrane of the vesicle and the chemical nature of the encapsulated medium.

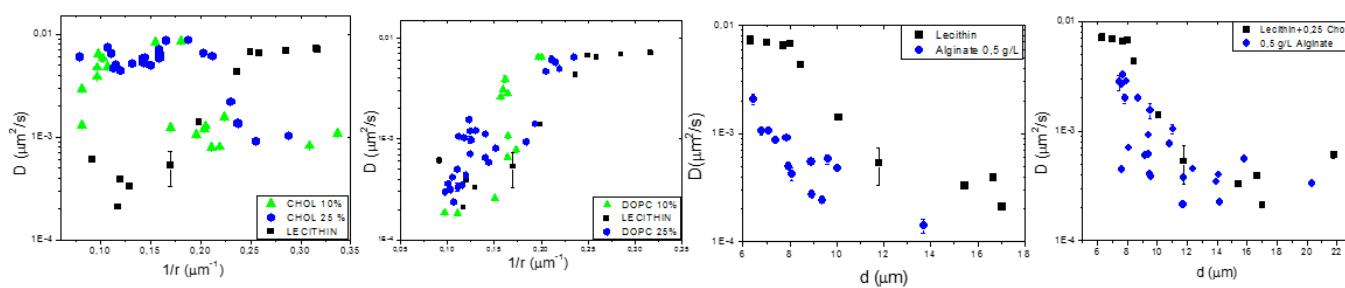


Figure 1. Relationship between liposome size and diffusion coefficient of encapsulate particle with different composition of the lipid membrane and encapsulate volume composition

References

- [1] M. Breton, Et al J. Membr. Biol., 2015 248, 827

Síntesis de materiales a partir de aguas de decapado de aceros al carbono y acero galvanizado

Arkaitz Anderez Amorrostoa¹, Lorena Alcaraz¹, Francisco J. Alguacil¹, Félix A. López¹, Belén Sotillo², Paloma Fernández² y José F. Marco³

¹Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas (CENIM-CSIC). Avda. Gregorio del Amo, 8. 28040-Madrid

²Facultad de Físicas. Universidad Complutense de Madrid

³Instituto de Química-Física Rocasolano-CSIC

Resumen

El presente estudio analiza la posibilidad de recuperación de cloruro ferroso y cloruro de zinc presentes en las aguas de decapado de aceros al carbono y aceros galvanizados. El decapado con ácido con HCl es el proceso químico más utilizado para eliminar los óxidos de hierro de la superficie del metal sin ningún ataque significativo al acero en sí. El baño ácido de decapado contiene principalmente cloruro ferroso (FeCl_2) producido a causa de la reacción entre el acero y ácido clorhídrico libre. Sin embargo, en los decapados de piezas de acero al carbono antes de la galvanización también encontramos cloruro de zinc (ZnCl_2), ya que los ganchos que se usan para colgar las piezas están galvanizados. El proceso de recuperación de cloruro ferroso se basa en la aplicación de técnicas basadas en procesos de evaporación-condensación-crystalización-filtración para la obtención de $\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$. Este material, se caracteriza mediante diversas técnicas (XRD, SEM, Raman y Espectroscopía Mössbauer) para conocer sus propiedades físico-químicas. Las aguas de decapado galvánicas se tratan mediante un proceso de extracción con disolventes orgánicos (Cyanex 923 disuelto en Solvesso). La extracción permite obtener una fase orgánica conteniendo el Zn(II) y una fase acuosa contenido el Fe(II) y el ácido acompañante. La fase orgánica se re-extrae con HCl para obtener una solución enriquecida en cloruro de zinc que se concentra mediante evaporación para obtener ZnCl_2 , que se caracteriza con las técnicas ya indicadas.

Abstract

This study analyzes the possibility of recovering ferrous chloride and zinc chloride present in the pickling waters of carbon steels and galvanized steels. Acid pickling with HCl is the most widely used chemical process to dissolve iron oxides from the metal surface without any significant attack on the steel itself. The acid pickling bath contains mainly ferrous chloride (FeCl_2) produced by the reaction between steel and hydrochloric acid. However, in the pickling of carbon steel parts before galvanization, we also find zinc chloride (ZnCl_2), since the hooks used to hang the parts are galvanized. The ferrous chloride recovery process is based on the application of techniques based on evaporation-condensation-crystallization-filtration processes to obtain $\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$. This material is characterized by various techniques (XRD, SEM, Raman and Mössbauer Spectroscopy) to know its physicochemical properties. The galvanic pickling waters are treated by an extraction process with organic solvents (Cyanex 923 dissolved in Solvesso). The extraction allows obtaining an organic phase containing Zn (II) and an aqueous phase containing Fe (II) and the accompanying acid. The organic phase is re-extracted with HCl to obtain a solution enriched in zinc chloride which is concentrated by evaporation to obtain ZnCl_2 , which is characterized with the techniques already indicated.

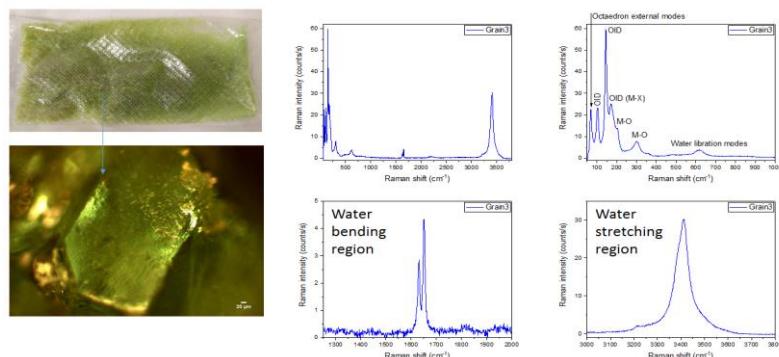


Figure 1. Raman spectra of $\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$

Desarrollo de materiales basados en TiO₂ para fotoproducción de H₂

I. Barba-Nieto*, A. Kubacka, M. Fernández-García¹

¹Departamento de Catálisis Aplicada, Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, ICP, CSIC, 28040, Madrid
irene.barba.n@csic.es

Resumen

Debido al problema global de la producción de energía, cada vez toma más relevancia la creación de nuevas formas para generar vectores energéticos, que sean eficientes y respetuosos con el medio ambiente [1]. Es el caso de la fotoproducción de hidrógeno como combustible del futuro. En este contexto, la fotocatálisis juega un papel fundamental en la creación de nuevos combustibles [2].

Todos los procesos photocatalíticos se basan en el empleo de luz sobre semiconductores para generar especies portadoras de carga (electrones-huecos) [3]. El proceso photocatalítico, se basa en la separación de electrones y huecos y su posterior transporte a la superficie del semiconductor. Finalmente, se producen las reacciones redox en la superficie del photocatalizador (Fig. 1a) [3]. La titania (TiO₂) es el material photocatalítico por excelencia debido a sus extraordinarias características (bajo coste, baja toxicidad y alta biocompatibilidad, etc.) [2]. Sin embargo, es importante evitar que estos electrones-huecos fotogenerados se recombinen, por ello se emplean adicionalmente metales nobles [4].

El objetivo de este trabajo es desarrollar nuevos materiales basados en TiO₂ que sean más eficientes de los hasta ahora conocidos. Para evitar la recombinación de cargas se ha empleado en todos los casos nanopartículas de Pt (Fig. 1b) que actúa como una trampa de electrones. Los materiales desarrollados hasta ahora han mostrado un efecto muy positivo en la fotoproducción de hidrógeno.

Abstract

Triggered by the global problem of energy production, an increasing attention is being paid to the creation of new efficient ways to generate energy vectors as well as respectful with the environment [1]. This is particularly the case of hydrogen photoproduction as a clean fuel for the future. In this context, photocatalysis may play a significant role in generating new fuels [2].

All photocatalytic processes use light on semiconductors to generate charge carrier species (electrons-holes) [3]. The photocatalytic process is based on the separation of electrons and holes and their subsequent transport to the surface of the semiconductor. Finally, it produces redox reactions (both oxidation and reduction steps) at the surface of the photocatalyst (Fig. 1a) [3]. Titania (TiO₂) is the photocatalytic material by excellence due to its extraordinary characteristics (low cost, low toxicity, high biocompatibility, etc.) [2]. However, the use of electron-hole carrier species in chemical reactions needs to avoid the recombination taking place between charges. For this reason the introduction of noble metals is also needed [4].

The aim of this project is to develop new materials based on TiO₂ that are more efficient than those published so far. To avoid the charge recombination, Pt nanoparticles have been used (Fig. 1b), which is able to act as an electron trap. The materials developed so far have shown a strong positive effect on hydrogen production.

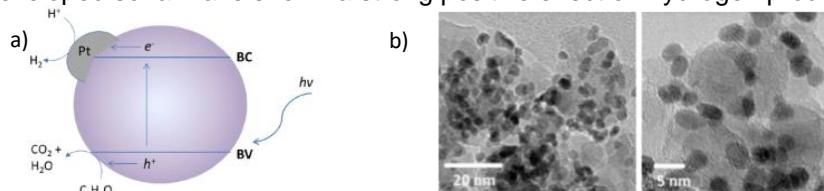


Figure 1. a) Photocatalytic processes in a semiconductor particle. b) TEM micrographs of TiO₂-based materials with Pt nanoparticles.

References

- [1] I. Barba-Nieto, U. Caudillo-Flores, M.N. Gómez-Cerezo, A. Kubacka, M. Fernández-García, *Chem. Eng. J.*, 398, (2020), 125665.
- [2] I. Barba-Nieto, K. C. Christoforidis, M. Fernández-García, A. Kubacka, *Appl. Catal. B-Environ.*, 227, (2020), 119246.
- [3] I. Barba-Nieto, U. Caudillo-Flores, M. Fernández-García, A. Kubacka, *Molecules*, 25, (2020), 4008.
- [4] U. Caudillo-Flores, I. Barba-Nieto, M.N. Gómez-Cerezo, A. Martínez-Arias, M. Fernández-García, A. Kubacka, *ACS Sustainable Chem. Eng.*, 7, (2019), 15671-15683.

Development of a formaldehyde sensor for industrial environments

Maria del Mar Darder, Maximino Bedoya, Luis A. Serrano, Miguel Ángel Alba[‡], Guillermo Orellana*

Optical Chemosensors & Applied Photochemistry Group (GSOLFA), Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemistry, Universidad Complutense de Madrid, Plaza Ciencias 2, 28040 Madrid

[‡]Quirón Prevención S.L.U., calle de la Llacuna, 166, 08018 Barcelona, Spain

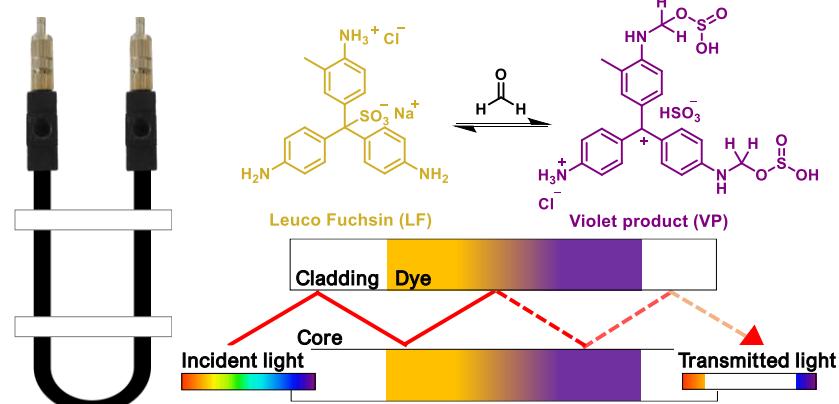
mdarder@ucm.es

Resumen

La principal preocupación en la exposición al formaldehído en entornos industriales es su implicación en afecciones respiratorias y su reconocida carcinogenicidad. En respuesta a su peligrosidad, la Directiva UE 2019/983 ha establecido límites de exposición a dicho tóxico a corto y largo plazo de 0.6 ppm y 0.3 ppm, respectivamente [1]. En esta contribución se describe el desarrollo de un sensor óptico basado en la absorción de la onda evanescente que se produce en la interfaz del revestimiento sensible al formaldehído de una fibra óptica plástica. Con esta finalidad, hemos inmovilizado en el revestimiento de la fibra óptica un indicador colorimétrico conocido para la detección de aldehídos denominado leucofucsina [3]. En presencia de formaldehído, la leucofucsina da lugar a un producto de coloración intensa (VP) que permite su cuantificación. Este instrumento de desarrollo propio, permite la detección del formaldehído ambiental en instalaciones industriales, con un límite de detección de 0.01 ppm.

Abstract

The main concerns regarding formaldehyde exposure in industrial facilities are its implication in respiratory conditions, mutagenicity and potentially carcinogenic effects. Consequently, the EU 2019/983 Directive has established short and long-term exposure limits of 0.6 ppm and 0.37 ppmv, respectively [1]. In this regard, it is essential to develop fast, *in situ*, selective and automated detection devices for occupational formaldehyde detection. This contribution describes the development of an optical sensor based on the evanescent field absorption of light by the formaldehyde-sensitive cladding of a plastic optical fiber. For this purpose, we have immobilized the leuco Fuchsin dye into the cladding of a home-made waveguide. This well-known colorimetric dye reacts with formaldehyde to form a strongly colored product (VP), allowing formaldehyde quantification [3]. The developed instrument manufactured in our premises is suited for airborne formaldehyde in industrial facilities and boasts a detection limit as low as 0.01 ppm.



References:

- [1] Directive EU 2019/983, <https://eur-lex.europa.eu/eli/dir/2019/983/oj>
[2] R.W. Dapson, R.W. Dapson, *Biotech. Histochem.* 91 (2016) 522–531.

Método alternativo para el estudio de la bioacumulación y metabolización del bde-47 usando larvas de pez cebra

Paloma de Oro Carretero¹

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, España.

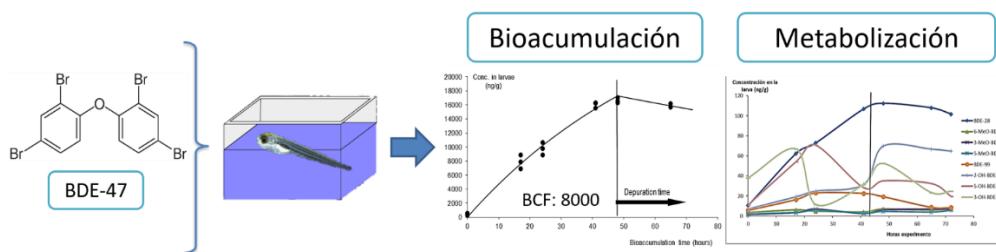
pdeoro@ucm.es

Resumen

Los polibromodifenil éteres (PBDEs) son contaminantes emergentes utilizados como retardantes de llama en aparatos electrónicos, electrodomésticos, textiles, etc. Son persistentes en el medio ambiente, bioacumulativos y producen efectos mutagénicos, cancerígenos y de disruptión endocrina (EDCs). Además, sus derivados OH-BDEs y MeO-BDEs tienen propiedades tóxicas similares. Para este estudio, se ha elegido el BDE-47 por su biodisponibilidad, su toxicidad y su gran abundancia en muestras ambientales, incluidos los seres humanos [1]. Se utiliza un método alternativo a la directriz oficial 305 de la OECD [2], desarrollado anteriormente [3] con larvas de pez cebra (*Danio rerio*), reduciendo drásticamente el tiempo, los reactivos y el sufrimiento de los animales. Se utilizaron modelos toxicocinéticos para calcular los factores de bioconcentración (BCF). El protocolo analítico elaborado se basa en el método de extracción QuEChERS asistido por sonda ultrasonidos y determinación por GC-MS- μ ECD. Los perfiles encontrados muestran una rápida absorción en las primeras horas de desarrollo de la larva y un gran poder bioacumulativo (BCF > 5000), BCF 8000 y 43000 a concentraciones de 10 y 1 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (< 1% LC₅₀), respectivamente. Además, se observaron concentraciones crecientes a lo largo del tiempo de exposición de los metabolitos BDE-28, 2'-OH-BDE-28 y 3-OH-BDE-47. Estos resultados muestran la viabilidad del método para estudios bioacumulativos y abre la posibilidad a estudios metabólicos con larvas de pez cebra, que es un campo muy poco desarrollado sin test oficiales ni regulación.

Abstract

Polybrominated diphenyl ethers (PBDEs) are emerging pollutants used as flame retardants in electronics, household appliances, textiles, etc. They are persistent in the environment, bioaccumulative and produce mutagenic, carcinogenic and endocrine disrupting effects (EDCs). In addition, its derivatives OH-BDEs and MeO-BDEs have similar toxic properties. For this study, BDE-47 has been chosen because of its bioavailability, its toxicity and its high abundance in environmental samples, including humans [1]. An alternative method to the official guideline 305 OECD [2], developed recently [3] with zebrafish larvae (*Danio rerio*) is used, reducing dramatically the time, reagents, and animal suffering. Toxicokinetic models were used to calculate bioconcentration factors (BCF). The analytical protocol developed is based on the QuEChERS extraction method assisted by ultrasound probe and GC-MS- μ ECD determination. The profiles found show rapid absorption in the first hours of larval development and great bioaccumulative capacity (BCF > 5000), BCF 8000 and 43000 at concentrations of 10 and 1 $\mu\text{g}\cdot\text{L}^{-1}$ (< 1% LC₅₀), respectively. In addition, increasing concentrations of the metabolites BDE-28, 2'-OH-BDE-28 and 3-OH-BDE-47 were observed throughout the exposure time. These results showing the feasibility of the method for bioaccumulation and opens the possibility of metabolic studies with zebrafish larvae, which is a very underdeveloped field without official testing or regulation.



References

- [1] C. Y. Usenko, E. M. Robinson, S. Usenko, B. W. Brooks, and E. D. Bruce, "PBDE developmental effects on embryonic zebrafish," *Environ. Toxicol. Chem.*, vol. 30, no. 8, pp. 1865–1872, (2011).
- [2] OECD, "Test No. 305 Bioaccumulation in Fish: Aqueous and Dietary Exposure," *Guidel. Test. Chem.*, (2012).
- [3] J. Sanz-Landaluze, M. Pena-Aburrea, R. Muñoz-Olivas, C. Cámera, and L. Ramos, "Zebrafish (*Danio rerio*) eleutheroembryo-based procedure for assessing bioaccumulation," *Environ. Sci. Technol.*, vol. 49, no. 3, pp. 1860–1869, (2015).

Mecanismos de autorreparación intrínseca en compuestos de elastómeros

Saul Ismael Utrera Barrios^{1,2}

¹Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros (ICTP-CSIC), Centro de Química Orgánica Manuel Lora-Tamayo, Juan de la Cierva 3, 28006, Madrid, España

²Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Ciudad Universitaria, 28040, Madrid, España

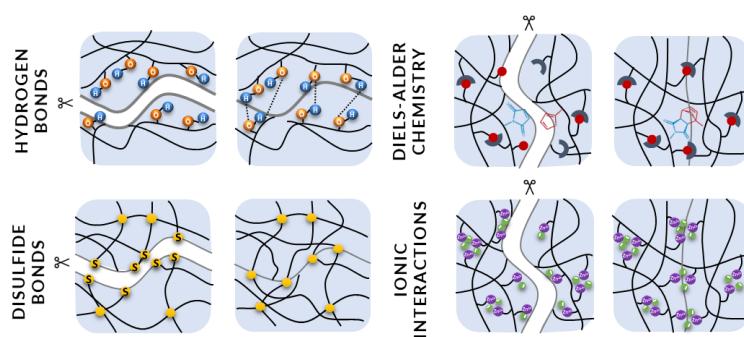
sutrera@ictp.csic.es | sutrera@ucm.es

Resumen

Durante años, el desarrollo de nuevos materiales se ha inspirado en algunas de las características extraordinarias de la naturaleza. El velcro, el loto, incluso trenes con forma de aves son algunos ejemplos en nuestra vida diaria. Desde 2001, una de las propiedades que se está estudiando cada vez más es la autorreparación. La capacidad de repararse de la piel humana y algunos animales no solo ha inspirado a personajes de ciencia ficción, sino también el desarrollo de materiales inteligentes con una vida útil prolongada. En el contexto ambiental actual, diseñar materiales con esta capacidad es, sin duda, una estrategia innovadora que puede contribuir a la evolución hacia una sociedad más sostenible. Por su naturaleza, los polímeros, especialmente los termoestables y elastómeros que no se pueden reciclar fácilmente, han encontrado en esta propiedad una segunda oportunidad. Esta tesis pretende conferir capacidad autorreparadora al caucho natural, el elastómero de mayor consumo y el único en aplicaciones comerciales que no tiene su origen en recursos no renovables. Esto se pretende conseguir modificando la química del NR mediante la inclusión de enlaces dinámicos/reversibles (como enlaces de hidrógeno, interacciones iónicas, enlaces disulfuro y la química de Diels-Alder, entre otros), capaces de restaurarse en minutos, incluso sin ningún estímulo externo.

Abstract

For years, the development of new materials has been inspired by some of the extraordinary features of nature. Velcro, waterproofing of lotus, even trains with the shape of a Kingfisher are some examples in our daily life. Since 2001, one of the properties under increasing study is self-healing. The ability to heal of human skin and some animals have not only inspired science fiction characters but also the development of smart materials with a longer lifetime. In the current environmental context, designing materials with this ability is, without a doubt, an innovative strategy that can contribute to the evolution of a more sustainable society. By their nature, polymers, especially thermosets and elastomers that cannot be easily recycled, have found in this property a second opportunity. This thesis aims to confer self-healing capacity to natural rubber (NR), the elastomer with the highest consumption and the only one in commercial applications that does not have its origin in non-renewable resources. This is intended to be achieved by modifying the chemistry of the NR by including dynamic/reversible bonds (like hydrogen bonds, ionic interactions, disulfide bonds, Diels-Alder chemistry, among others), capable of restoring in minutes, even without any external stimuli.



References:

- [1] Utrera-Barrios et al. *Mater. Hor.*, 7 (2020), 2882-2902.
[2] Utrera-Barrios et al. *ACS Omega*, 5, 4, (2020), 1902-1910.

Selenium enrichment of fermented beverages with selenized lactic acid bacteria

Fernando Gabriel Martínez^{1,2}

¹Centro de Referencia para Lactobacilos (CERELA-CONICET), Chacabuco 145, Tucumán, Argentina

²Departamento de Química analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avenida Complutense s/n, 28040, Madrid, España

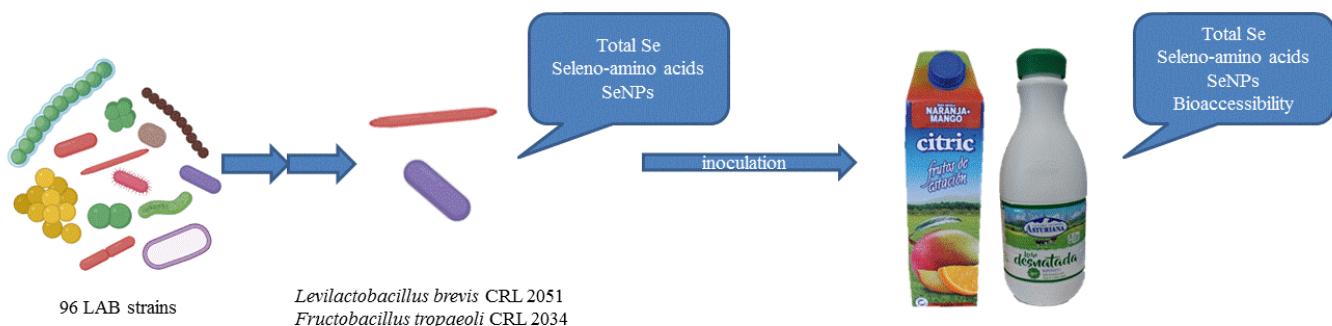
fmartinez@cerela.org.ar

Resumen

El selenio (Se) es un micronutriente esencial para la salud humana que se encuentra como selenocisteína (SeCys) en el sitio activo de numerosas enzimas involucradas en la respuesta a estrés oxidativo y funciones tiroideas¹. Las formas inorgánicas son tóxicas. Algunas bacterias lácticas (BAL) pueden reducir estas sales en seleno-nanopartículas (SeNPs) y seleno-aminoácidos, formas menos tóxicas y con mayor biodisponibilidad. En diversos países de Europa como así también en Argentina, la ingesta de Se es menor a la ingesta diaria recomendada (IDR). El enriquecimiento de alimentos con Se es una estrategia atractiva para aumentar su ingestión². En este trabajo se evaluaron 96 cepas de BAL aisladas de frutas autóctonas del noroeste argentino. Se analizó el crecimiento y la biotransformación de Se para identificar cepas candidatas para elaborar una bebida fermentada enriquecida en este elemento. Se destacaron las cepas selenizadas de *Levilactobacillus brevis* CRL 2051 y *Fructobacillus tropaeoli* CRL 2034 por sus valores de Se total y producción de seleno-aminoácidos y SeNPs. Se formuló una bebida a base de leche y zumo de naranja-mango y se fermentó con ambas cepas. La bebida resultante demostró una gran bioaccesibilidad de Se aportando 64% de la IDR en 250 mL del cual el 28% está compuesto por seleno-aminoácidos. La selenización de estas cepas podría ser una buena estrategia de enriquecimiento para mejorar la ingesta de Se.

Abstract

Selenium (Se) is an essential micronutrient for human health, which is found as selenocysteine (SeCys) in the active site of Se-dependent enzymes involved in the response to oxidative stress and in thyroid functions¹. The main inorganic Se forms are toxic. Some lactic acid bacteria (LAB) can reduce Se salts into seleno-nanoparticles (SeNPs) and seleno-amino acids, which are non-toxic and highly bioavailable forms. In several European countries, as well as in Argentina, Se intake is below the recommended dietary intake (RDI). Se-enrichment of foods is an attractive strategy to increase its ingestion². In this work, 96 LAB strains isolated from native fruits of northwestern Argentina were evaluated. The growth and biotransformation of Se were analyzed to identify candidate strains to formulate a fermented beverage enriched in this element. The selenized strains of *Levilactobacillus brevis* CRL 2051 and *Fructobacillus tropaeoli* CRL 2034 highlighted for their total Se values and production of seleno-amino acids and SeNPs. A milk and orange-mango juice beverage was formulated and fermented with both strains. The resulting drink demonstrated a great bioaccessibility of Se, providing 64% of the RDI in 250 mL of which 28% is composed of seleno-amino acids. The selenization of these strains could be a good enrichment strategy to improve Se intake.



References

- [1] F.G. Martínez et al., *Front. Bioeng. Biotechnol.*, 8:506, (2020)
- [2] S.D. Pophaly et al., *Trends in Food Science & Technology*, 39, (2014) 135-14

Development of an extraction method for the recovery of bioactive polyphenols from wine by-products

Esther Gómez Mejía

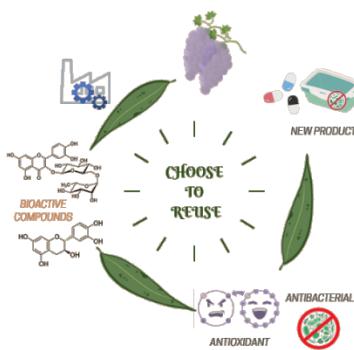
Departamento Química Analítica, Facultad Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid
egomez03@ucm.com

Resumen

En la actualidad se generan **grandes cantidades** de **biorresiduos industriales** a nivel mundial que conllevan importantes **problemas ambientales**. Por ello, una **gestión** sostenible de los mismos se considera crucial, no solo para **reducirlos**, sino también para utilizarlos como **fuente de productos** de **alto valor añadido**. Por otro lado, ha surgido una creciente demanda de **productos** con **etiquetas limpias** y **funcionalidad biológica**. Los **polifenoles** son un grupo de compuestos naturales con propiedades antioxidantes, antimicrobianas y citotóxicas, cuyo uso para el **desarrollo** de nuevos **conservantes**, **colorantes** y **nutracéuticos bioactivos** está en el punto de mira del sector Químico [1-3]. El objetivo de este trabajo fue el **desarrollo** de un **método de extracción** basado en la dispersión de matriz en fase sólida (**MSPD**) asistido con **n nanopartículas** de **dioxido de titanio**, para la **recuperación** de **polifenoles** a partir de los **orujos de uva**. Las condiciones experimentales de extracción se optimizaron mediante **diseño experimental** y análisis de superficie de respuesta. Los extractos hidroalcohólicos obtenidos se analizaron mediante cromatografía líquida capilar acoplada a un detector de matriz de diodos y un analizador de masas (**cLC-DAD-MS**), cuantificando polifenoles como el **ácido gálico** ($47 \pm 2 \text{ } \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$), la **rutina** ($44 \pm 7 \text{ } \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$) y la **catequina** ($319 \pm 50 \text{ } \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$). Asimismo, se evaluó su **actividad antioxidante** ($\text{IC}_{50} = 5.0 \pm 0.4 \text{ } \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$) y **antimicrobiana** ($\text{IC}_{50} > 21.88 \pm 0.03 \text{ mg}\cdot\text{mL}^{-1}$). Los resultados obtenidos sugieren que el método desarrollado es sencillo, eficaz y **promueve** la **reutilización** de los **subproductos vitivinícolas** [3].

Abstract

Significant amounts of **industrial bioresidues** are generated worldwide, causing serious **environmental issues**. Accordingly, **waste management** is increasingly seen as a crucial way to reduce food residues and obtain valuable **added-value materials**. Furthermore, there is a growing **demand for products** with **clean labels** and **biological benefits**. **Polyphenols** are natural compounds with **antioxidant**, **antimicrobial** and cytotoxic properties, whose use for the development of novel **bioactive preservatives**, **dyes** and **nutraceutical** are in the spotlight of chemical sector [1-3]. The aim of this work was the **development** of a matrix solid-phase dispersion (**MSPD**) extraction method assisted by **titanium dioxide nanoparticles**, for the **recovery** of **polyphenols** from **grape pomace**. The experimental conditions were **optimized** by **experimental design** and response surface methodology. Additionally, the hidroethanolic extracts were analysed by capillary liquid chromatography coupled to a diode array detector and mass analyzer (**cLC-DAD-MS**), quantifying polyphenols as **gallic acid** ($47 \pm 2 \text{ } \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$), **rutin** ($44 \pm 7 \text{ } \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$) and **catechin** ($319 \pm 50 \text{ } \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$). Moreover, the **antioxidant** ($\text{IC}_{50} = 5.0 \pm 0.4 \text{ } \mu\text{g}\cdot\text{g}^{-1}$) and **antimicrobial** activity ($\text{IC}_{50} > 21.88 \pm 0.03 \text{ mg}\cdot\text{mL}^{-1}$) was evaluated. The results obtained suggest that the MSPD developed is a successful, simple and efficient methodology, which also **promotes** the reuse of **wine by-products** [3].



References

- [1] Poveda J.M. et al., *Ind. Crop Prod.*, 112, (2018), 617-625
- [2] Gómez-Mejía et al., *J Chrom. A*, 1601, (2019), 255-265
- [3] Gómez-Mejía et al., *Food Chem.*, 337, (2021), 127998

Empleo combinado de SeNPs y cisplatino para la mejora de tratamientos contra el cáncer

Alejandro Iglesias Jiménez¹

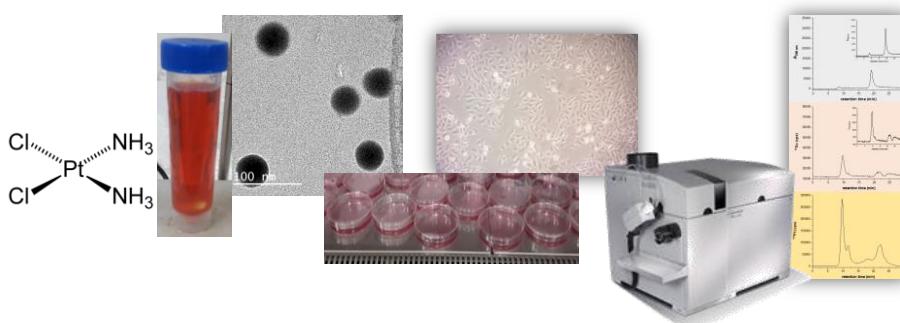
¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, España
alejandroiglesias@ucm.es

Resumen

El cisplatino es uno de los fármacos antitumorales más utilizados mundialmente, aunque su uso clínico está limitado por los serios efectos secundarios que puede ocasionar en los pacientes, como ocurre con la nefrotoxicidad.¹ Esto ha motivado, desde hace décadas, una búsqueda de estrategias renoprotectoras que permitan mejorar la eficacia del fármaco. Una posibilidad es el empleo de nanopartículas de selenio (SeNPs), objeto de investigación para diversas aplicaciones biomédicas actuales.² Por ello, en este trabajo se plantea el estudio de las SeNPs como un potencial agente nefroprotector en tratamientos con cisplatino, debido a las propiedades antioxidantes intrínsecas del selenio, que podrían reducir el daño oxidativo en las células renales. Para poder considerar una eventual capacidad nefroprotectora de las SeNPs, éstas no deberían únicamente proteger a las células renales frente a la citotoxicidad del cisplatino, sino que sería esencial que no interfirieran en la acción anticancerígena del mismo. Con este propósito, en el presente trabajo se incubaron células HeLa (de cáncer de cuello uterino) con cisplatino y/o con SeNPs estabilizadas con quitosano (Ch-SeNPs). De todos los cultivos se determinó la viabilidad celular mediante el ensayo de MTT. La morfología y tamaño de las Ch-SeNPs, así como su internalización celular, fueron estudiados mediante TEM-XEDS. El contenido intracelular de Se y Pt fue cuantificado mediante análisis por ICP-MS, tras digestión ácida de los pellets celulares. Además, se realizaron estudios de especiación de Se y Pt a nivel del citosol celular, mediante SEC-UV/VIS y SEC-ICP-MS.

Abstract

Cisplatin is one of the most widely used antitumor drugs, but its clinical use is limited by the side effects that can be found in patients, such as nephrotoxicity.¹ This has motivated, for decades, a search for renoprotective strategies that allow improving the effectiveness of the drug. One possibility is the use of selenium nanoparticles (SeNPs), the object of research for various current biomedical applications.² Therefore, in this work the study of SeNPs is proposed as a potential nephroprotective agent in treatments with cisplatin, due to the intrinsic antioxidant properties of selenium, which could reduce oxidative damage in kidney cells. To consider a possible nephroprotective capacity of the SeNPs, they should not only protect kidney cells against the cytotoxicity of cisplatin, but it would be essential that they do not interfere with its anticancer action. For this purpose, in the present work HeLa cells (from cervical cancer) were incubated with cisplatin and/or with chitosan-stabilized SeNPs (Ch-SeNPs). Cell viability was determined by the MTT assay for all cultures. The morphology and size of the Ch-SeNPs, as well as their cellular internalization, were studied using TEM-XEDS. The intracellular content of Se and Pt was quantified by ICP-MS analysis, after acid digestion of the cell pellets. Furthermore, Se and Pt speciation studies were carried out at the cellular cytosolic level, using SEC-UV/VIS and SEC-ICP-MS.



References

- [1] R.P. Miller, R.K. Tadagavadi, G. Ramesh, W.B. Reeves, *Toxins*, 2 (2010), 2490-2518
- [2] S. Chaudhary, A. Umar, S.K. Mehta, *J Biomed Nanotechnol*, 10, 10 (2014), 3004-3042

Mimotope-based immunoassays for the detection of mycophenolic acid

Á. Luque Uría, R. Peltomaa, E. Benito Peña, M.C. Moreno Bondi

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense, Ciudad Universitaria s/n, 28040, Madrid

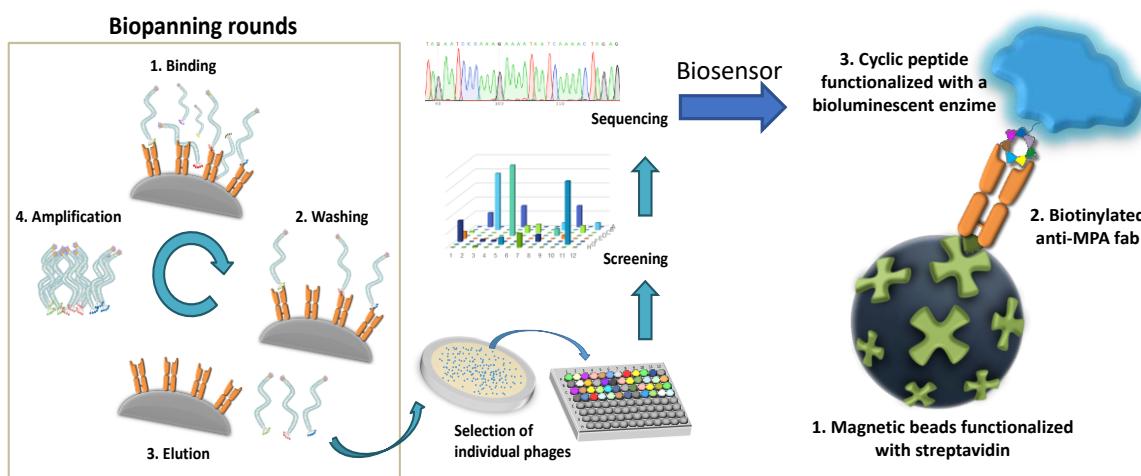
alvarluq@ucm.es

Resumen

La técnica de despliegue de fagos o “phage display” se emplea para la identificación de péptidos miméticos, también conocidos como mimotopos o mimopeptídos, así como proteínas recombinantes.¹ Los mimotopos pueden unirse al mismo parátopo del anticuerpo selectivo que la molécula diana, provocando una respuesta idéntica o muy similar a la del epítopo original. Como consecuencia de ello pueden emplearse para el desarrollo de ensayos tipo ELISA o de biosensores reemplazando al hapteno del analito de interés. El ácido micofenólico (MPA) es una micotoxina producida por hongos del género *Penicillium* que se emplea además como inmunosupresor para prevenir el rechazo de órganos en pacientes trasplantados. El MPA se puede encontrar también en alimentos, como el queso azul o la uva, así como en piensos. En este trabajo se ha empleado una librería de péptidos cíclicos para seleccionar un mimopeptido que interacciona de manera selectiva con un fragmento de anticuerpo recombinante selectivo a MPA.² Para la realización del ensayo, el MPA libre presente en la muestra compite con el péptido mimético funcionalizado con un enzima bioluminiscente por los sitios de unión del anticuerpo inmovilizado sobre las partículas magnéticas. El ensayo optimizado permite obtener un límite de detección de 0.69 nM y un IC₅₀ de 8.9 nM. En la presentación se detallarán diferentes aproximaciones sobre el desarrollo de biosensores para el análisis de MPA en muestras clínicas.

Abstract

Phage display is a commonly applied technique for identifying epitope-mimicking peptides, mimotopes, and recombinant proteins.¹ Mimotopes have the exceptional ability to bind to the same antibody paratope as the antigen and they can be applied for the development of enzyme-linked immunosorbent assays (ELISA) or biosensors in replacement of the target analyte. Mycophenolic acid (MPA) is a mycotoxin produced by *Penicillium* fungi, widely used as an anti-immunosuppressant drug to prevent organ rejection in transplanted patients. MPA can be found in foodstuff, especially in blue cheese produced in the presence of *Penicillium* fungi, in grapes and also in animal feed. In this work, a commercial phage-displayed peptide library was used to select cyclic peptides that bind to a recombinant antibody fragment (Fab)² specific for mycophenolic acid. For the competitive assay, a biotinylated derivative of the MPA recombinant antibody fragment was immobilized onto streptavidin-derivatized magnetic beads, and the competition between the free mycophenolic acid and the peptide mimetic coupled to a bioluminescent enzyme was detected by bioluminescence. The magnetic bead-based assay showed a limit of detection of 0.69 nM and IC₅₀ of 8.9 nM. Several approaches for the development of luminescent based biosensors for the analysis of MPA in clinical samples will be discussed in this presentation.



References

- [1] R. Peltomaa, E. Benito-Peña, R. Barderas, M.C. Moreno-Bondi, ACS Omega, 4 (2019), 11569.
- [2] A. Tullila; T. Nevanen, IJMS, 18 (2017), 1169.

Síntesis y modificación superficial de nanopartículas de oro

Vanesa Manzaneda González¹, Elena Junquera¹ y Andrés Guerrero Martínez¹

¹Departamento de Física Química, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avenida Complutense s/n, 28040, Madrid

vanesman@ucm.es

Resumen

La nanoplasmonica es la ciencia que estudia la excitación de resonancias plasmónicas superficiales localizadas (LSPR) en nanoestructuras metálicas y sus aplicaciones tecnológicas. Dichos LSPR tienen lugar debido a la interacción de la luz con los electrones de conducción confinados en una nanoestructura metálica, proporcionando diversos colores que pueden ser modificados mediante cambios en el tamaño, la morfología o composición de las nanopartículas (NPs), así como de la naturaleza dieléctrica de su entorno. En el caso de NPs anisótropas, la respuesta óptica depende de la polarización de la luz incidente, lo cual permite un grado adicional de manipulación. Dic平as LSPR originan campos eléctricos de gran intensidad en la superficie de la NP metálica, que pueden ser controlados mediante la morfología y el tamaño. Todos estos efectos abren un gran abanico de posibilidades para diseñar dispositivos con aplicaciones en campos muy diversos.[1]

Abstract

Nanoplasmonics is the science that studies the excitation of localized surface plasmon resonances (LSPR) on metal nanostructures and their technological applications. These LSPRs arise from the interaction between light and the conduction electrons confined in nanostructured metals, yielding various colors that can be tuned by changing the size, morphology or composition of the nanoparticles (NPs), as well as the dielectric nature of the surroundings. In the case of anisotropic NPs, the optical response depends on the polarization of the incident light, which allows an additional degree of manipulation. In addition, these LSPRs give rise to high electric fields at the metallic NPs surface, which can be controlled by morphology and size. All these effects open up a wide range of perspectives to design new devices with applications in very diverse fields.[1]

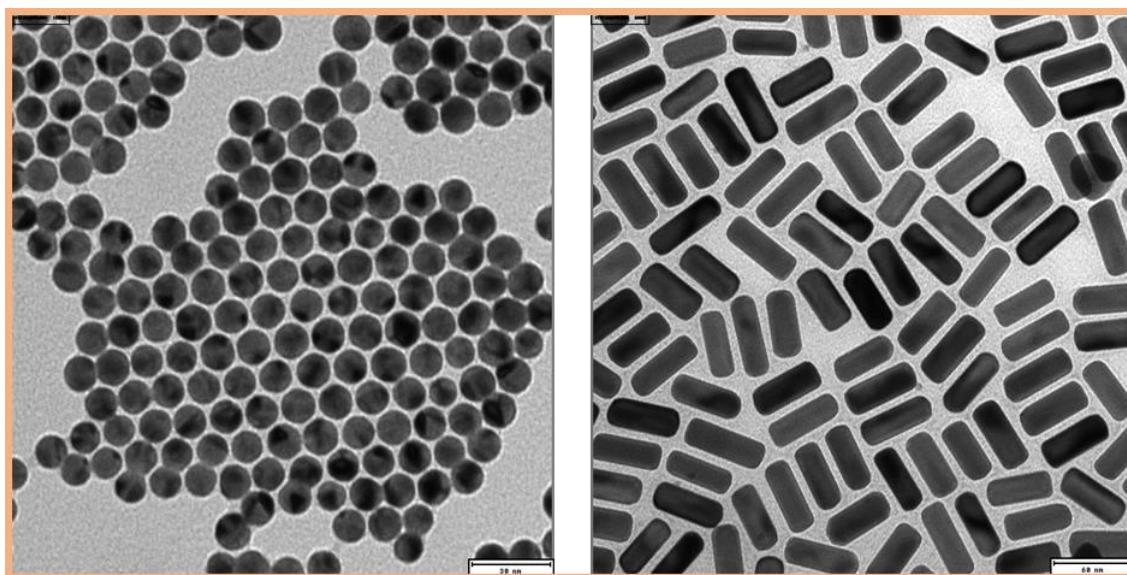


Figure 1. Gold nanoparticles

References

- [1] A. Guerrero Martínez, R. A. Álvarez Puebla, L. M. Liz Marzán, *An. la Real Soc. Española Química*, 107 (2011) 221–228.

Nanomáquinas mesoporosas luchando contra el cáncer

Beatriz Mayol Hornero

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avenida Complutense s/n, 28040, Madrid

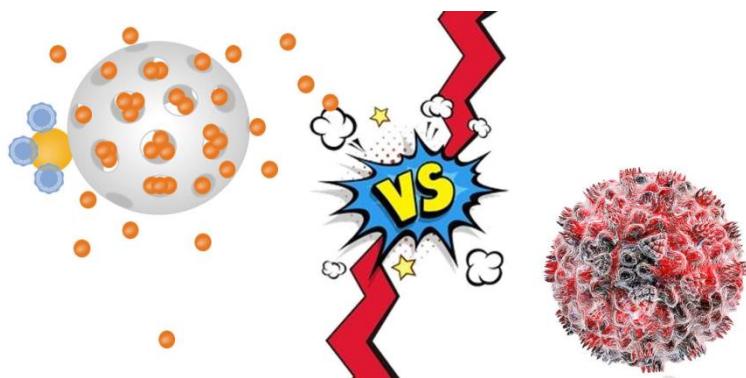
beamayol@ucm.es

Resumen

A pesar de los avances científicos, todavía existen problemas con la administración de medicamentos, que presenta importantes limitaciones. Entre ellas, se puede destacar su baja solubilidad, la aparición de efectos secundarios o dificultades en su absorción. Por ello, adquieren especial interés los sistemas de liberación controlada de fármacos, una tecnología que mejora la entrega de medicamentos en la zona específica que se quiere tratar. ¿Ciencia ficción? Desde luego que no, ya se pueden encontrar sistemas de este tipo en ensayos clínicos y en comercialización. Muchos de ellos están relacionados con el tratamiento contra el cáncer, concretamente la quimioterapia, que tantos efectos secundarios produce. Esta línea de investigación incluye la construcción y ensamblaje de nanomáquinas que constan de diferentes partes: nanopartículas de sílice mesoporosa, que permiten encapsular el fármaco deseado modificando su superficie con puertas moleculares que se alteran en presencia de un determinado estímulo; nanopartículas de oro que son el soporte del elemento que controla la nanomáquina y enzimas que actúan como control del sistema generando la liberación o no del compuesto de interés. La combinación de diferentes enzimas, puertas moleculares y moléculas encapsuladas permite crear una gran variedad de sistemas, más o menos complejos, que son prometedores para futuros tratamientos.

Abstract

Despite the scientific advances, drug administration still has limitations. Some of them are their low solubility, undesirable side effects or absorption difficulties. Because of that, drug delivery systems are really interesting, a new technology that improves the drug transportation to the specific site that is needed to treat. ¿Science fiction? Of course not, several systems are already in clinical trials and commercialization. Many of them are related to cancer treatment, especially chemotherapy, which causes a large variety of side effects. This line of research is related with the construction and assembly of nanomachines made of different parts: mesoporous silica nanoparticles, to encapsulate the desired drug, modifying their surface with molecular gates that change in the presence of a specific stimuli; gold nanoparticles as platform for the elements that control the nanomachine and enzymes that act as control unit of the system generating the release or not of the compound. The combination of different enzymes, molecular gates and encapsulated molecules, allow us to create diverse systems, more or less complex, that are promising in future medical treatments.



Estudios de oxidación de UO₂ en condiciones de almacenamiento temporal en seco

Abel Milena Pérez^{1,2}

¹CIEMAT, Avenida Complutense 40, 28040 Madrid, España

²Departamento de Química Física I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, España

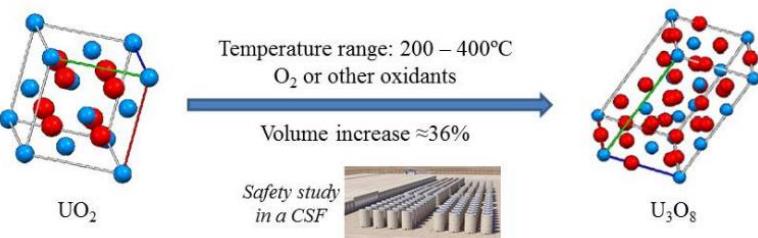
amilena@ucm.es

Resumen

Actualmente, está internacionalmente aceptado que la solución más segura para un almacenamiento definitivo de Combustible Nuclear Irradiado (CI) y, por extensión de los Residuos Radiactivos de Alta Actividad (RRAA), es el Almacén Geológico Profundo (AGP) [1, 2]. Sin embargo, la demora en la selección de emplazamiento, diferentes retos institucionales y la saturación de los almacenes de las Centrales Nucleares, han hecho necesario el diseño, construcción y operación de nuevas instalaciones donde el CI y los RRAA sean almacenados de forma temporal y segura. Estas instalaciones son llamadas Almacenes Temporales Centralizados (ATC), y están consideradas como una solución provisional para la gestión de CI. Los ATCs son instalaciones donde se llevará el CI desde las centrales nucleares. En ellas, será secado y guardado en contenedores especiales diseñados *ad hoc*. Durante todas estas etapas, podrían producirse alteraciones en los elementos de combustible, exponiendo la pastilla de combustible a una atmósfera oxidante. Como constituyente principal del CI (~95%), el dióxido de uranio (UO₂) podría oxidarse, dando como resultado la fase U₃O₈ [3], que conlleva un aumento de volumen y la pulverización de las muestras sólidas. En este escenario accidental, podría darse la eventual liberación de material radiactivo. Por tanto, para garantizar la integridad de este material, se requiere estudiar el tiempo para producir U₃O₈ a partir de UO₂, bajo estas condiciones de accidente. En este trabajo se mostrará cómo se recrean, a escala de laboratorio, los procesos potenciales de oxidación de UO₂ bajo condiciones límites correspondientes a accidentes severos. Estos experimentos se llevan a cabo actualmente en las instalaciones radiactivas del CIEMAT, e incluyen un amplio rango de técnicas analíticas, con la capacidad de medir propiedades tanto micro como macroscópicas, y de esta forma, hacer posible el escalado al combustible real. Estos análisis permitirán implementar medidas de seguridad en un ATC real.

Abstract

Currently, it is internationally accepted that the safest solution for a definitive disposal of Spent Nuclear Fuel (SNF) and, by extension, of High-Level Waste (HLW), is the Deep Geological Disposal concept (DGD) [1, 2]. However, the delay in site selection, institutional issues and the saturation of the Nuclear Power Plants (NPPs) storage facilities, have made necessary the design, construction and operation of new facilities where the SNF & HLW can be stored temporarily and safely. They are called Centralised Storage Facilities (CSFs), and they are considered as an interim solution for the SNF management. CSFs are facilities where SNF will be transported from NPPs. In the facility, SNF will be, dried and saved in special-designed casks. While these processes are happening, alterations of fuel elements could be produced, exposing the fuel pellet to an oxidant atmosphere. As the main constituent of SNF, uranium dioxide (UO₂) could undergo an oxidation, giving as a result of the U₃O₈ phase [3], which comes along with a volume increase and pulverization of the solid samples. Under this accidental scenario, the possible release of radioactive material could happen. Therefore, to guarantee the integrity of this material, the study of the corrosion time to produce U₃O₈ from UO₂, under incident/accident conditions is required. In this work, we will show how the potential oxidation processes of UO₂ are reproduced at laboratory level under several accident boundary conditions. These experiments are currently carried out at radioactive facilities available at CIEMAT, and include a wide range of analytical techniques, that are able to measure both micro and macroscopical properties of the sample, and thus, make possible the scaling to real fuel. This information will allow implementing security measures in a real CSF.



References

- [1] S. Tikkanen, *Nova Science Publishers*, 2020.
- [2] OECD/NEA, *NEA Report Nº 7532*, 2020.
- [3] J.M. Elorrieta, L.J. Bonales, N. Rodríguez-Villagra, V.G. Baonza, J. Cobos, *MRS Advances*, 2 (2017), 675-680.

Polímeros conjugados porosos redox basados en antraquinona para baterías de litio de alto rendimiento

Antonio Molina

Electrochemical Processes Unit, IMDEA Energy, Avda. Ramón de la Sagra 3, 28935 Móstoles, Spain

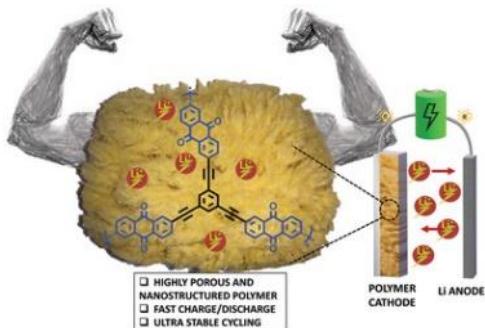
antonio.molina@imdea.org

Resumen

Desde hace dos décadas la investigación y desarrollo de baterías de Litio Ion (LIBs) se ha visto fuertemente incrementado debido a la alta demanda de sistemas de almacenamiento de energía. Hoy en día, las principales LIBs están formadas por electrodos de carbón y componentes inorgánicos de intercalación. A pesar de su éxito comercial existe la necesidad de obtener material de electrodo a gran escala que sea ecológico, sostenible y más seguro. Una de las mejores alternativas son los electrodos orgánicos y, específicamente, los polímeros activos redox (RAPs)¹. Entre la gran variedad de RAPs, en esta conferencia se presenta nuestra investigación sobre polímeros conjugados porosos con funcionalidad redox (RCMPs) como excelentes candidatos para electrodos en baterías. La síntesis de RCMPs se realiza mediante la adición de un bloque activo redox de antraquinona en una estructura 3D de un polímero conjugado. En esta charla discutiremos sobre la síntesis de RCMPs basados en antraquinona a través de un método de polimerización en miniemulsión como estrategia para obtener polímeros nanoestructurados² fáciles de procesar para fabricas electrodos de alto rendimiento. Seguidamente se discutirá su optimización añadiendo carbones³. Además, se investiga el efecto de las condiciones de síntesis sobre sus propiedades físico-químicas y electroquímicas demostrando que la técnica de miniemulsión combina un excelente comportamiento redox y un transporte rápido de carga gracias a la estructura π-conjugada junto con una rápida movilidad iónica y extraordinaria estabilidad (electro)química debido a su naturaleza porosa. Debido a ello se aumenta la vida útil de la batería, su capacidad y rendimiento

Abstract

In the last two decades the develop and research of Lithium ion batteries (LIBs) has been greatly increased. Nowadays, LIBs are dominated by carbon composite electrodes and inorganic intercalation compounds which often contains toxic and scarce metals such cobalt or nickel. Even though their success in commercial LIBs, there is a need for cost-effective, large scale, environmentally friendly, sustainable and safer electrode materials. One of the best alternatives are organic electrodes and specifically redox-active polymers (RAPs)¹. These materials have extraordinary properties such as, environmentally friendly, cheap, abundant and can be obtained from natural sources. Among huge variety of RAPs, here we present our recent research on Conjugated Microporous Polymers (CMPs) having redox functionalities as excellent candidates for battery electrodes. Redox-active conjugate microporous polymer (RCMPs) were synthesized by addition of anthraquinone redox-active building block into the conjugated 3D polymer structure. In this talk we will discuss on the synthesis of anthraquinone-based RCMPs by combining miniemulsion polymerization method as a strategy to get nanostructured polymers easy to process as high performing electrodes. We investigate the effect of synthesis conditions on the physico-chemical and electrochemical properties of obtained polymers. We demonstrated that RCMPs synthesized by miniemulsion technique combine excellent redox behaviour due to antraquinoyl redox groups, fast charge transport due to π-conjugated backbone, fast ion mobility due to porous structure and extraordinary (electro)chemical stability over cycling due to the shape-persistent 3D microporous nature. All these characteristics increased the battery performance as longevity, service life and enhanced redox-active sites utilization and thus higher capacity^{2,3}



References

- [1] S. Muench, A. Wild, C. Fribe, B. Häupler, T. Janoschka and U. S. Schubert, *Chem. Rev.*, 2016, 116, 9438–9484.
- [2] A. Molina, N. Patil, E. Ventosa, M. Liras, J. Palma and R. Marcilla, *Adv. Funct. Mater.*, 2019, 1908074, 1908074.
- [3] A. Molina, N. Patil, E. Ventosa, M. Liras, J. Palma and R. Marcilla, *ACS Energy Lett.* 2020, 5, 9, 2945–2953

Growth of nanocolumnar thin films on patterned substrates deposited by magnetron sputtering at oblique angles

Sandra Muñoz Piña¹

¹Departamento de Ingeniería Química y de Materiales, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avda. Complutense s/n, 28040, Madrid

smuoz@ucm.com

Resumen

Las películas delgadas porosas nanocolumnares depositadas en geometrías oblicuas están recibiendo mucha atención hoy en día debido a sus características morfológicas únicas y a sus propiedades notables. La técnica de pulverización catódica con magnetrón operada en ángulos oblicuos (MS-OAD, de sus siglas en inglés), se ha convertido en uno de los procedimientos más interesantes en términos de eficiencia, fiabilidad, reproducibilidad y escalado industrial potencial. La variedad de morfologías porosas típicas que se pueden lograr mediante la técnica de MS-OAD es rica, lo que permite la personalización de películas nanoestructuradas con un rendimiento óptimo para numerosas aplicaciones funcionales. Sin embargo, hasta donde sabemos, existen importantes condiciones inexploradas que requieren un mayor estudio y que podrían ampliar aún más las posibilidades de este método. En este trabajo hemos analizado la influencia de los patrones del sustrato en el desarrollo nanocolumnar de películas delgadas de SiO₂ crecidas mediante pulverización catódica con magnetrón en ángulo oblicuo en sustratos con patrones inducidos por iones.^[1] Estos resultados han proporcionado conocimientos sobre las aplicaciones potenciales de este tipo de capas nanoestructuradas.^{[2][3]}

Palabras clave: Pulverización catódica con magnetrón, nanoestructuras, crecimiento en ángulo oblicuo, sustrato con patrones, películas delgadas.

Abstract

Nanocolumnar porous thin films deposited at oblique geometries are nowadays receiving much attention due to their unique morphological features and remarkable properties. The magnetron sputtering technique operated at oblique angles (MS-OAD), has emerged as one of the most interesting procedures in terms of efficiency, reliability, reproducibility and potential industrial scalability. The variety of typical porous morphologies that can be achieved by MS-OAD is rich, allowing the customization of film nanostructures with optimum performance for numerous functional applications. However, to our knowledge, there are important unexplored conditions that require further study and that might widen the possibilities of the method even more. In this work we have analyzed the influence of substrate patterns on the nanocolumnar development of thin films of SiO₂ thin films on ion-induced patterned substrates grown by magnetron sputtering at oblique angles.^[1] These results have provided insights on the potential applications of these nanostructured layers given.^{[2][3]}

Keywords: magnetron sputtering, nanostructures, oblique angle deposition, patterned substrate, thin films.

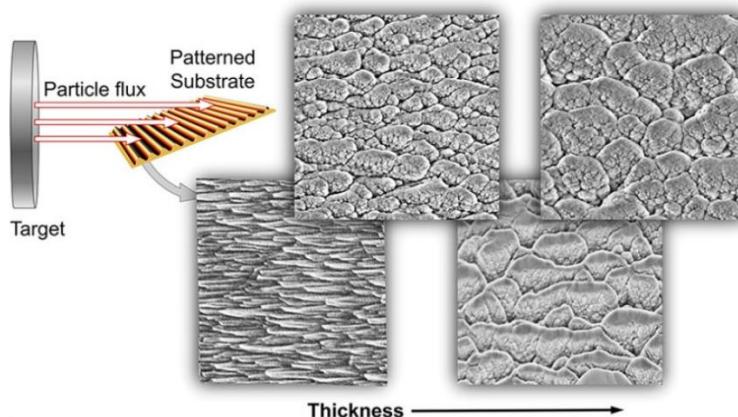


Figure 1. Oblique angle deposition on patterned substrates presents different growth regimes. ^[1]

References

- [1] A. García-Valenzuela, S. Muñoz-Piña, G. Alcalá, et al. *Plasma Process Polymers*, 16 (2019)
- [2] R. Alvarez, S. Muñoz-Piña, et al. *Nanomaterials*, 9 (2019), 1217
- [3] S. Muñoz-Piña, et al. *Nuclear Fusion*, 60 (2020)

Assisting diagnosis and staging of prevalent cancers by targeting specific proteases and hypoxia biomarkers using electrochemical biosensors

Cristina Muñoz-San Martín¹, María Gamella¹, María Pedrero¹, Ana Montero-Calle², Rodrigo Barberas², Susana Campuzano¹, José M. Pingarrón¹.

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de CC. Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid

²UFIEC, Instituto de Salud Carlos III, Majadahonda, 28220, Madrid, Spain.

cmunoz04ucm.es

Resumen

La metástasis es responsable de hasta el 90 % de las muertes por cáncer. En su desarrollo intervienen un gran número de mecanismos complejos. La hipoxia (caracterizada por bajos niveles de oxígeno en el microambiente tumoral) juega un papel fundamental en este proceso sobreexpresando ciertas proteínas como la HIF-1α y la PD-L1. Además, algunas proteasas como la tripsina también están asociadas con la progresión del cáncer mediante la activación de las metaloproteininas de la matriz. Todas estas biomoléculas se encuentran hiperexpresadas en gran variedad de cánceres y su determinación permitiría controlar el estadio de la enfermedad y la eficiencia de la terapia. En este contexto, esta comunicación discute el desarrollo de biosensores electroquímicos capaces de determinar tripsina, HIF-1α y PD-L1 en muestras clínicas reales [1, 2]. Todas estas bioplataformas están basadas en el uso de micropartículas magnéticas como soporte sólido para la implementación del formato de bioensayo (de tipo directo y basado en el empleo de un péptido para la proteasa, o de tipo sándwich y basados en anticuerpos específicos para los biomarcadores de hipoxia) y de electrodos serigrafiados de carbono para la medida amperométrica. Estas bioplataformas electroquímicas demostraron un buen rendimiento analítico y operacional, así como, potencial para la determinación directa en muestras clínicas de complejidad y naturaleza variables (saliva, suero y lisados celulares) empleando protocolos sencillos y reducidos tiempo de ensayo y cantidad de muestra, lo que las hace particularmente atractivas para su empleo en la rutina oncológica.

Abstract

Metastasis is responsible for up to 90 % of cancer deaths. A large number of complex mechanisms are involved in its development. Hypoxia (characterized by low levels of oxygen in the tumour microenvironment) plays a fundamental role in this process by overexpressing certain proteins such as HIF-1α and PD-L1. In addition, some proteases such as trypsin are also associated with cancer progression by activating matrix metalloproteinases. All these biomolecules are hyperexpressed in a wide variety of cancers and their determination would allow control of the stage of the disease and the efficiency of therapy. In this context, this communication discusses the development of electrochemical biosensors capable of determining trypsin, HIF-1α and PD-L1 in real clinical samples [1, 2]. All these bioplatforms are based on the use of magnetic microparticles as a solid support for the implementation of the bioassay format (direct type and based on the use of a short peptide for the protease or sandwich type and based on specific antibodies for hypoxia biomarkers) and on screen-printed carbon electrodes to carry out the amperometric measurement. These electrochemical bioplatforms demonstrated good analytical and operational performance and a great potential for direct determination of the target analyte in clinical samples of different complexity and nature (saliva, serum and cell lysates) using simple protocols and reduced test time and sample quantity, this making them particularly attractive for their use in routine oncology.

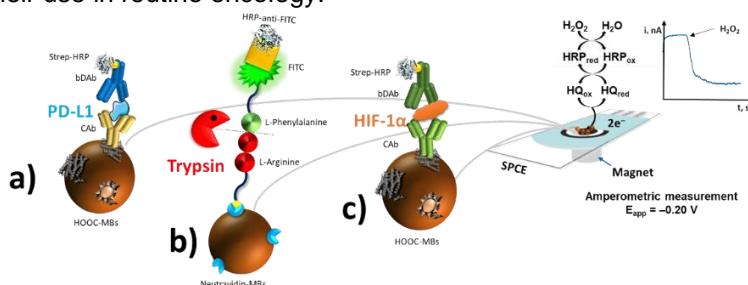


Figure 1. Schematic representation of the developed biosensors for the determination of PD-L1 (a), trypsin (b) and HIF-1α (c).

References

- [1] C. Muñoz-San Martín et al., *Anal. Bioanal. Chem.* 412, (2020), 6177–6188.
[2] C. Muñoz-San Martín et al., *Sens. Actuators. B.* 307, (2020), 127623.

Desarrollo y materiales para sondas multiorificios para medida de emisiones cuasi representativas en chimeneas de sección rectangular y baja altura para aplicación en banco de ensayos para turborreactores

Enrique Rojas-García¹

¹Departamento Medio Ambiente, CIEMAT, Avda. Complutense, 40, 28040, Madrid.

enrique.rojas@ciemat.es

Resumen

El muestreo de aerosoles, desde las fuentes de emisión al medio ambiente, debe ser representativo, para que la medición pueda evaluarse adecuadamente [1a]. En las chimeneas de escape industriales es común un flujo de emisión estable, pero no siempre completamente homogéneo, por lo que se requiere un muestreo secuencial ubicado en diferentes puntos [1b]. En algunos casos, el caudal de escape puede ser heterogéneo y transitorio, esto ocurre en la Celda de Ensayos ubicada en INTA (España), que cuenta con una chimenea de 25 m de altura con una sección cuadrada de 15x15 m. Por tanto, se requiere una solución adecuada para la caracterización de emisiones con el fin de obtener múltiples muestras simultáneamente. Para obtener medidas representativas en la chimenea de escape del INTA que caractericen las emisiones de motores turborreactores una solución es el desarrollo de la sonda multiorificio que se plantea en esta tesis. Se diseñó mediante CFD (software ANSYS), con 17,24 m de longitud y con seis puntos de muestreo (SP1 a SP6) distribuidos a lo largo de la sonda (Figura 1), se fabricó de acero inoxidable en el CIEMAT [2]. De las piezas en contacto con la emisión se hizo análisis de ciclo de vida (ACV). Se han realizado calibraciones y validaciones tanto teóricas como experimentales para diferentes partes y el conjunto de la sonda [3]. Incluidos ensayos con motores reales (Figura 2) donde la sonda es la sección de colección de la muestra del sistema de muestreo y medida de la chimenea del AT/INTA.

Abstract

Aerosol sampling, from emission sources to the environment, must be representative, so that the measurement can be properly evaluated [1a]. In industrial exhaust stacks, a stable, but not always completely homogeneous, emission flow is common, thus requiring sequential sampling at different location points [1b]. In some cases, the exhaust flow can be heterogeneous and transient, this occurs in the Test Cell located at INTA (Spain), which has a stack 25 m tall with a square section of 15x15 m. Therefore, a suitable solution for the emission characterisation is required in order to obtain multiple samples simultaneously. To obtain representative measurements in the exhaust stack at INTA that characterize the emissions of turbojet engines, a solution is the development of the multi-hole probe that is proposed in this thesis. It was designed using CFD (ANSYS software), with 17.24 m in length and with six sampling points (SP1 to SP6) distributed along the probe (Figure 1), it was manufactured in stainless steel at CIEMAT [2]. LCA analysis was performed on the parts in contact with the emission. Both theoretical and experimental validations have been performed for each part of the probe and set of all of them [3]. Including tests with real engines (Figure 2) where the probe as the sample collection section of the AT / INTA stack sampling and measurement system.

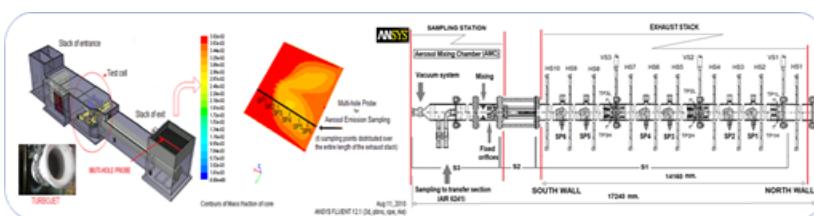


Figura 1. Celda ensayo área de turborreactor (INTA) (izquierda). Simulación CFD de distribución de emisiones en chimenea de escape (centro). Esquema de sonda de múltiples orificios (derecha)



Figura 2. Concentración partículas respecto al tiempo en función del promedio de potencia motor 50. Muestreo representativo

References

- [1] a) Normas U.S. EPA (1991), EPA 40 CFR PART 60; b) UNE-EN 15259:2008; UNE-EN 13284-1:2018.
- [2] Rodríguez Maroto, J.J. et al (2016), Informes técnicos CIEMAT; 1382, ISSN: 1135-9420; NIPO:721-16-070-6.
- [3] Rojas-García, E. et al. RICTA '17- Barcelona, RICTA '18- Bilbao, AT2018- Bilbao, RICTA '19- Lisboa, EAC2020- Aachen (on-line).

Nuevas redes metal-orgánicas y composites: síntesis y aplicaciones

Pablo Salcedo-Abraira¹, Thomas Devic², David Ávila³, Patricia Horcajada¹

¹Unidad de Materiales Porosos Avanzados, Instituto IMDEA Energía, Avda. Ramón de la Sagra 3, Madrid, España.

²Institut des Matériaux Jean Rouxel, Université de Nantes, 2 Rue de la Houssinière, Nantes Cedex 3, Francia

³Dpto de Química Inorgánica, Facultad de CC Químicas, Universidad Complutense de Madrid, España

pablo.salcedo@imdea.org

Resumen

Las Redes Metal-Orgánicas (o MOFs por sus siglas en inglés) son una nueva clase de materiales híbridos cristalinos formados por unidades metálicas (iones, clústeres...) unidas mediante ligandos orgánicos polidentados (carboxilatos, fosfonatos, sulfonatos, etc). Estos materiales destacan por su alta porosidad, su gran variedad estructural y por su versatilidad química derivada de la posibilidad de modificar su composición. Estas características hacen que dichos materiales puedan ser aplicados en una elevada cantidad de aplicaciones (catalisis, separación de fluidos, biomedicina, sensores...).¹ Este trabajo se centra en el desarrollo de nuevos materiales tipo MOF y materiales compuestos derivados para su uso en diferentes aplicaciones industriales. Para ello, se han seguido dos estrategias (Figura 1): i) síntesis de nuevos materiales basados en metales de transición y semimetálicos y ii) inserción de especies activas en la porosidad de MOFs. En particular, siguiendo la primera ruta, se han sintetizado seis nuevas estructuras basadas en los ligandos pireno tetrafosfonato,² triazina trifosfonato³ y ácido escuarico con Cu²⁺, Bi³⁺ y Zr⁴⁺, Ni²⁺ y Ti⁴⁺. Estos materiales presentan en general una estabilidad destacable (química, térmica y mecánica) y, entre otras, actividad fotocatalítica en la generación de hidrógeno y conductividad iónica de hasta 5·10⁻³ S·cm⁻¹. Utilizando la segunda estrategia, se ha insertado un polímero conductor en la porosidad del carboxilato de hierro(III) mesoporoso MIL-100(Fe).⁴ El material composite resultante presenta propiedades mejoradas. También se han mejorado las propiedades del fosfonato de zirconio(IV) UPG-1, el cual ha aumentado su conductividad iónica en dos órdenes de magnitud mediante el intercambio catiónico de los protones lábiles de su estructura por distintos iones alcalinos (Li⁺, Na⁺, K⁺).

Abstract

Metal-Organic Frameworks (MOFs) are a new type of hybrid crystalline solids built up from metallic units (ions, clusters...) and organic polydentate linkers (carboxylates, phosphonates, sulfonates...). Their high porosity, large structural variety and their chemical versatility made the MOFs excellent candidates to be applied in different socioeconomically key applications (catalysis, fluid separation, biomedicine, sensing...).¹ This work is focused in the develop of new MOF materials and composite based MOF materials for their use in different industrial applications. Two strategies have been followed (Figure 1): i) synthesis of new materials based on transition metals and semimetals and ii) insertion of active species into the already described MOF porosity. By following the first strategy, six new structures based on the pyrene tetraphosphonate,² triazine triphosphonate³ and squarate with Cu²⁺, Bi³⁺ y Zr⁴⁺, Ni²⁺ y Ti⁴⁺ has been synthesized. These materials present a remarkable stability and, among others, photocatalytic activity in hydrogen production and ionic conductivity up to 5·10⁻³ S·cm⁻¹. Using the second strategy, one conducting polymer has been inserted into the mesoporous iron(III) carboxylate MIL-100 porosity.⁴ The resulting composite material exhibit enhanced properties. The ionic conductivity of the zirconium(IV) phosphonate UPG-1 has been also improved in two magnitude orders by replacing the labile protons of the structure by different alkaline ions (Li⁺, Na⁺, K⁺).

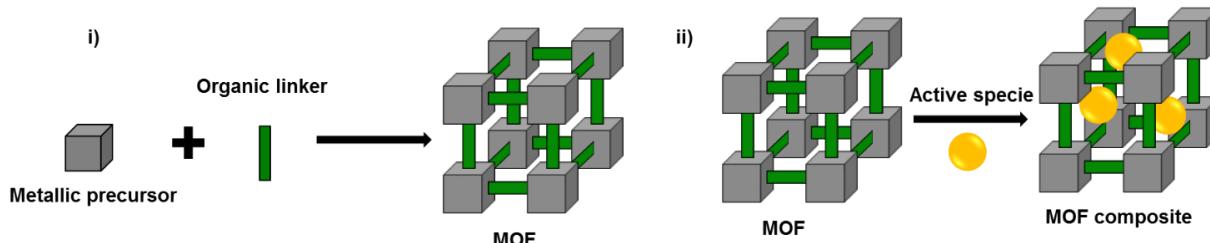


Figure 1. Strategies for MOF and composites preparation.

References

- [1] Themed issue: *Chem. Soc. Rev.*, 2014, 5415
- [2] P. Horcajada et al, *P201912095*
- [3] P. Salcedo-Abraira et al, *Nano research*, 2020 DOI: 10.1007/s12274-020-3056-6
- [4] P. Salcedo-Abraira et al, *Dalton Trans*, 2019, 48, 9807-9817

Endocitosis a diferentes escalas: desde la estructura molecular a la funcionalidad. Endocytosis across scales: from molecular structures to a functional

Andreas Santamaría^{1, 2}

¹Departamento de Química Física, Universidad Complutense de Madrid, España.

²Institut Laue-Langevin, Grenoble, France

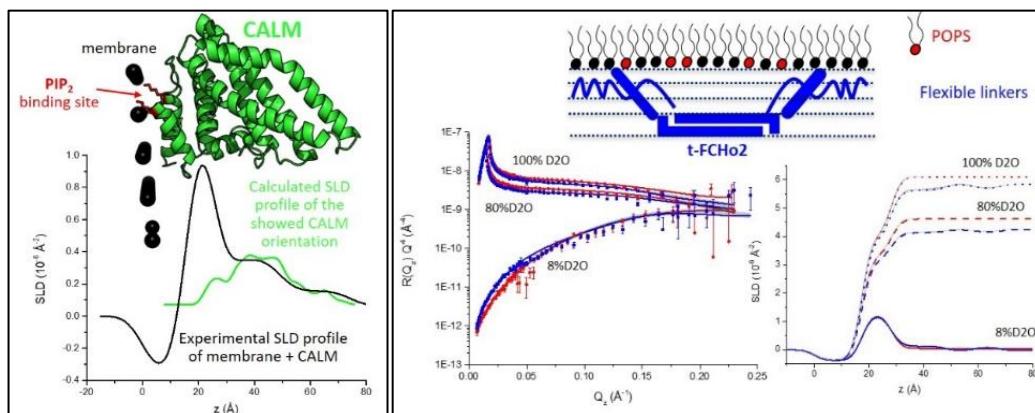
santamariaaa@ill.fr; andreass@ucm.es

Resumen

La endocitosis mediada por clatrina es el mecanismo principal usado por las células eucariotas para internalizar y reciclar la mayor parte de las proteínas de membrana. Este proceso se encuentra regulado por diferentes Proteínas Adaptadores (ej. CALM), que se unen directamente el esqueleto de clatrina a las moléculas a transportar, y por otras proteínas accesorias (ej. FCHo2) que regulan temporalmente el ensamblaje y ruptura de vesículas recubiertas por clatrina. La aparición de mutaciones que afectan a la endocitosis ha venido ligada al cáncer y otras enfermedades, incluyendo el Alzheimer¹ o el síndrome de Stiff-man². *In vivo*, la mayoría de las proteínas adaptadoras solo interaccionan con la capa lipídica interna de la membrana, la cual se encuentra enriquecida en fosfatidil inositol 4,5-difosfato (PIP₂). Este lípido con carga negativa, junto con la 1-palmitoil-2-oleil-sn-glicero-3-fosfo-L-serina (POPS), es esencial para la asociación de las proteínas adaptadoras y las moduladoras con la membrana. Por lo tanto, este trabajo se ha centrado en la construcción de modelos lipídicos simples, los cuales imitan la película interna de la membrana celular e investigar la orientación y las estructuras formadas por CALM y FCHo2 en asociación con monocapas lipídicas enriquecidas en PIP₂ o POPS. La simplicidad de este modelo permite su estudio mediante elipsometría, isotermas de presión-área y reflectometría de neutrones. Aprovechando el contraste isotópico de la Reflectometría de Neutrinos, ha sido posible comprender la orientación tanto de la CALM como de FCHo2.

Abstract

Clathrin-mediated endocytosis is the main mechanism by which eukaryotic cells internalize and recycle most membrane proteins. It is driven by different Adaptor Proteins, which directly link the clathrin scaffold to cargos, and modulated by accessory proteins that temporarily regulate clathrin coated vesicles assembly and disassembly. Mutations affecting endocytosis have been directly linked to cancer and other diseases such as Alzheimer¹ and Stiff-man² diseases. *In vivo*, most clathrin adaptors solely interacts with the inner leaflet, which is enriched in phosphatidyl inositol 4,5-diphosphate (PIP₂). Indeed this negatively charged lipid, together with 1-palmitoyl-2-oleyl-sn-glycero-3-phospho-L-serine (POPS), is essential for the interaction of adaptor and modulator proteins to the membrane. Therefore, the main approach exploited in this work, so far, has been to build simple, *in vitro*, lipid models to mimic the inner leaflet of the cell membrane and investigate the orientation and physical structures formed by CALM and FCHo2 on association to cargo-embedded lipid monolayers enriched in PIP₂ or POPS (for FCHo2 and its truncated version interaction). The simplicity of these models enables their study using ellipsometry, pressure – area isotherms and Neutron Reflectometry. Exploiting the isotopic contrast with Neutron Reflectometry (i.e. using subphase with different scattering length density), this approach allowed us to understand which is the orientation of both CALM and the truncated version of FCHo2.



Evaluation of selenium species as potential multifunctional compounds for alzheimer's disease treatment

David Vicente-Zurdo

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

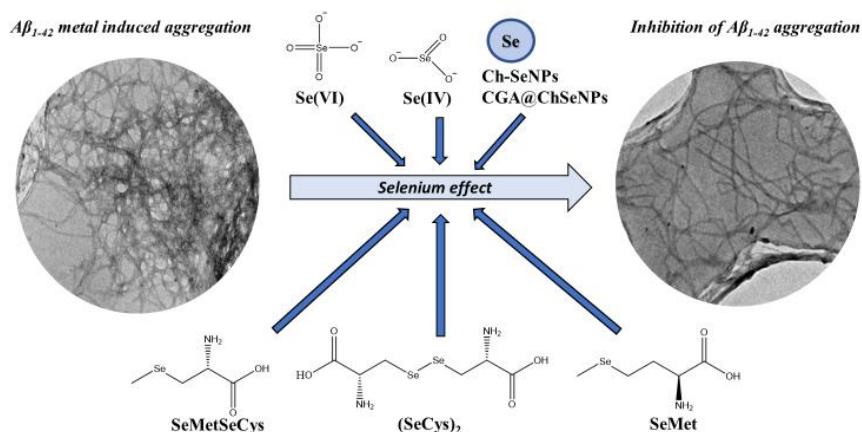
davidvic@ucm.es

Resumen

La enfermedad de Alzheimer (AD) es uno de los mayores retos para los países desarrollados, ya que afecta a 50 millones de personas en todo el mundo. Actualmente, no existe ningún tratamiento ni cura para el AD¹. Algunos de los esfuerzos en este campo están centrados en la inhibición y reversión de la agregación de las fibras de proteína beta-amiloide ($A\beta$) causada por biometálicos como Fe(II), Cu(II) y Zn(II). El selenio ha demostrado tener diversas propiedades beneficiosas para la salud debido a sus propiedades quelantes y antioxidantes, las cuales varían dependiendo de sus especies químicas². El trabajo actual evalúa por primera vez el potencial papel de diferentes especies de selenio, incluyendo dos tipos de nanopartículas de selenio basadas en quitosán (Ch-SeNPs y CGA@ChSeNPs), como agentes multifuncionales contra el AD. Se evaluaron las propiedades antioxidantes y quelantes de las especies de selenio, a la vez que sus efectos en la agregación $A\beta$, para averiguar si alguna de ellas podría ser adecuada para el tratamiento y/o prevención del AD. Entre todas las especies de selenio estudiadas, las CGA@ChSeNPs aportaron las mejores capacidades antioxidantes. Mientras que las Ch-SeNPs mostraron los mejores resultados con respecto a la inhibición de la agregación $A\beta$ inducida por metales, siendo extremadamente útiles como agentes anti-AD para próximos experimentos de la enfermedad de Alzheimer.

Abstract

Alzheimer's Disease (AD) is one of the main challenges for developed countries, since it affects 50 million people worldwide. At the present moment, no treatment or cure for AD has been developed¹. Some of the efforts in this field are focused on the inhibition and reversion of amyloid beta protein ($A\beta$) fibrils aggregation caused by biometals such as Fe(II), Cu(II) and Zn(II). Selenium has proved to have several health beneficial properties regarding its chelating and antioxidant capacities, which vary depending on its chemical species². The present work evaluates for the first time the potential role of several selenium species, including two types of chitosan-based selenium nanoparticles (Ch-SeNPs and CGA@ChSeNPs), as multifunctional anti-AD agents. Antioxidant and chelating properties of selenium species, as well as their effects on $A\beta$ aggregation were evaluated, in order to establish if any of them could be suitable for AD treatment and/or prevention. Among the selenium species tested, CGA@ChSeNPs provided the best antioxidant capacities. While Ch-SeNPs showed the best results in terms of inhibition of metal induced $A\beta$ aggregation, being extremely useful as anti-AD agent for further Alzheimer's disease studies.



References

- [1] J. Hardy, D.J. Selkoe, *Science*, 297, (2002), 353–356.
- [2] D.L. Hafstead, P.A. Tsuji, B.A. Carlson, V.N. Gladyshev, *Trends Biochem Sci*, 39, (2014), 112–120.

