



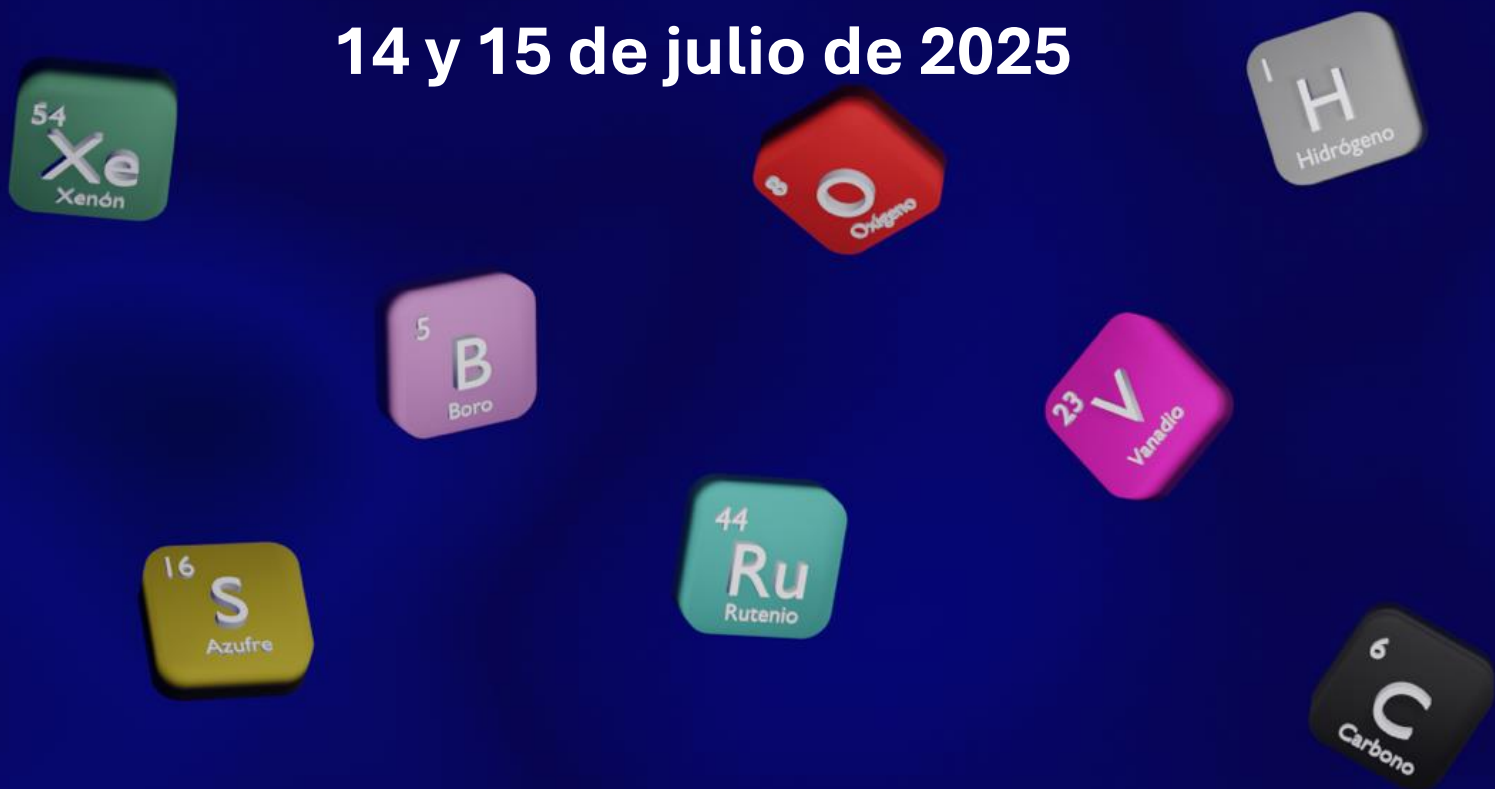
IX SIMPOSIO ANUAL EN QUÍMICA AVANZADA



FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS

Libro de resúmenes

14 y 15 de julio de 2025





FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

Comité organizador

Jonatan Gómez Granados

Jouma Katati Bote

Miguel Klaiber Aboitiz

Ramiro Juan Olmos Greco

14 de julio

9:00 – 9:15		RECOGIDA DE ACREDITACIONES
9:15 – 9:30	APERTURA Comisión del doctorado en Química Avanzada	
9:30 – 10:00	CHARLA INVITADA Departamento Química Analítica Andrés Machuca Marcos	
10:00 – 10:15	Selenio como agente protector ante la toxicidad del mercurio en poblaciones bacterianas: biosíntesis de micro/nanopartículas de Se-Hg Mónica del Rocío Villamar Aveiga	
10:15 – 10:30	Delamination of polymeric multilayer films using supercritical CO ₂ Ramiro Juan Olmos Greco	
10:30 – 10:45	Síntesis, caracterización y evaluación de derivados de fluorenonas como electrodos en baterías de ion potasio Irene Gómez Berenguer	
10:45 – 11:00	Protección de recubrimientos base acuosa funcionalizados con grupos fosfatos sobre la aleación de magnesio AZ31B Jonatan Gómez Granados	
11:00 – 11:15	Microplastics in the atmosphere: A view on the Madrilean aerosols Saed Deylami	
11:15 – 11:30	Mapping the ultrafast energetic and atomic requirements of earth-abundant catalysts and photosensitizers for artificial photosynthesis Lucía Velasco Bermejo	
11:30 – 12:00	AVISOS PROGRAMA DOCTORADO	COFFEE BREAK
12:00 – 12:15	Desarrollo de Materiales Poliméricos Avanzados para su Integración como Electrolitos en Baterías de Estado Sólido Anthony Alexander Vásquez Medina	
12:15 – 12:30	Additive manufacturing: effect on surface treatment and corrosion of biomedical implants Shaghayegh Javadi	
12:30 – 12:45	Transformación de TiO ₂ NPs y SiO ₂ NPs presentes en aditivos alimentarios mediante modelos in vitro: desde la matriz alimentaria al epitelio intestinal Elena Espada Bernabé	
12:45 – 13:00	Protein nanorotors control the size of lipid domains in phase-separated monolayers Nuria Inmaculada Carillo Godoy	
13:00 – 13:15	Electroquímica de nuevos electrolitos poliméricos libres de flúor para baterías de ion potasio: Influencia de cationes voluminosos en las propiedades de transporte Alejandro Ares Dorado	
13:15 – 13:30	Physical properties of GM130 condensates through fluorescence anisotropy Miguel Ángel Sacristán Fernández	

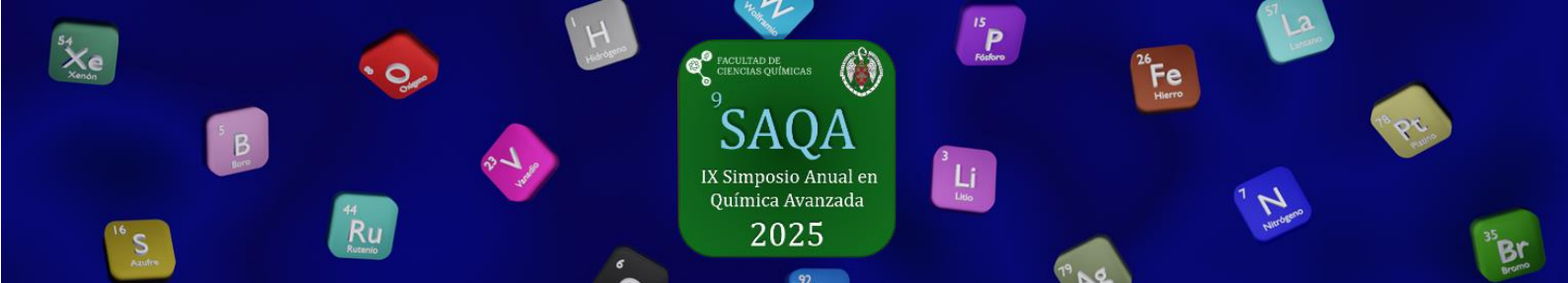
15 de julio

9:20 – 9:30	APERTURA Organizadores
9:30 – 10:00	CHARLA INVITADA Departamento Química Física Jorge Reñé Espinosa
10:00 – 10:15	Desarrollo de catalizadores estructurados para la utilización de portadores de hidrogeno basados en líquidos orgánicos María Santos Plana
10:15 – 10:30	Métodos radioquímicos basados en le extracción líquido-líquido para el estudio de zonas impactadas por actividades mineras Víctor Manuel Expósito Suárez
10:30 – 10:45	BiVO ₄ -based heterojunctions for improved OER in PEC cells Javier Llorente López
10:45 – 11:00	Iron-chloranilate frameworks as high energy and power cathodes for sustainable alkali-ion batteries Víctor Durán Egido
11:00 – 11:15	Uso de herramientas de Inteligencia Artificial para la optimización de procesos de tratamiento de muestras, para la identificación de agentes de guerra biológicos Clara Antía García Herrero
11:15 – 11:30	Metodologías fotónicas avanzadas para el estudio del patrimonio cultural tangible Laura Maestro Guijarro
11:30 – 12:00	COFFEE BREAK
12:00 – 12:15	Compuestos Pirazol Piridil e Isoquinolinil sustituidos, base de construcción de materiales bifuncionales mesomórficos y luminiscentes Rosario Criado García
12:15 – 12:30	Estrategias analíticas para la valorización de residuos agroalimentarios: Obtención de compuestos bioactivos Sandra Rodríguez Blázquez
12:30 – 12:45	Molecular photodissociation and quantum control of chemical processes with femtosecond laser pulses Ignacio Martínez Casasús
12:45 – 13:00	Optimización y estudio mecanístico del SnS preparado por síntesis hidrotermal asistida por microondas como electrodo en baterías de ion potasio Marta María González Barrios
13:00 – 13:15	Predicción de concentraciones de saturación de condensados de proteínas mediante simulación molecular Eduardo Pedraza Granado
13:15 – 13:30	CLAUSURA Comisión del doctorado en Química Avanzada

PRIMERA SESIÓN

14 de julio de 2025

9:30 – 11:30



SELENIO COMO AGENTE PROTECTOR ANTE LA TOXICIDAD DEL MERCURIO EN POBLACIONES BACTERIANAS: BIOSÍNTESIS DE MICRO/NANOPARTÍCULAS DE Se-Hg

^{1,2}Mónica Villamar-Aveiga, ¹Beatriz Gómez-Gómez, ¹Gustavo Moreno-Martín, ¹Yolanda Madrid-Albarrán

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

²Facultad de Ciencias e Ingeniería, Universidad Estatal de Milagro, Cda. Universitaria Km 1.5 vía Milagro-Virgen de Fátima, 091050, Milagro, Guayas, Ecuador
monicadv@ucm.es

Palabras clave: bioacumulación, nanopartículas Se-Hg, *E. coli*, *S. aureus*, selenio, mercurio, spICP-MS

La contaminación por mercurio (Hg) representa una seria amenaza ambiental y sanitaria debido a su alta toxicidad y capacidad de bioacumulación. Diversos estudios han señalado que el selenio (Se) puede atenuar los efectos tóxicos del Hg mediante mecanismos de interacción química y biotransformación [1,2]. Sin embargo, aún se conoce poco sobre estos efectos en sistemas bacterianos modelo, pese a su relevancia en procesos ambientales como la biorremediación [3].

Este estudio evaluó el efecto protector del Se(IV) frente a la toxicidad inducida por Hg(II) en *Escherichia coli* y *Staphylococcus aureus*. Se analizaron la viabilidad celular (mediante turbidez), la bioacumulación de metales (por ICP-MS) y la formación biogénica de nano/micropartículas (mediante TEM, XRD y spICP-MS), bajo condiciones de co-exposición y pretratamiento con Se y a distintas concentraciones de exposición de mercurio y selenio.

Los resultados revelaron que la capacidad protectora del Se depende fuertemente del tipo de exposición. La co-adición de Hg y Se al inicio del cultivo redujo significativamente la viabilidad bacteriana, sin efecto protector detectable por parte del selenio sobre la toxicidad inducida por el mercurio. En cambio, cuando el Hg se añadió tras 8 horas de crecimiento, la viabilidad de la *E. coli* no se vio afectada, y en *S. aureus* la toxicidad fue parcialmente mitigada por el Se. El análisis por TEM y single particle ICP-MS evidenció la formación de nano/micropartículas biogénicas en todas las condiciones, incluso en ausencia de actividad metabólica de la bacteria, con composiciones de Se, Hg o ambos elementos. Solo bajo co-exposición simultánea se detectó la formación de HgSe, según el análisis por XRD. Estos datos ponen de manifiesto el potencial del Se para modular la toxicidad por Hg en bacterias, y su posible aplicación en estrategias de biorremediación microbiana.

Agradecimientos

La realización del presente trabajo ha sido posible gracias al proyecto PID2023-148425NB-I00, financiado por el MCIU/AEI/10.13039/501100011033 y por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER), Unión Europea.

Mónica Villamar-Aveiga agradece asimismo a FUNDACIÓN CAROLINA por la concesión de la beca doctoral.

Referencias:

- [1] Khan, M.A.K.; Wang, F. Mercury-selenium compounds and their toxicological significance: Toward a molecular understanding of the mercury-selenium antagonism. *Environ. Toxicol. Chem.* **2009**, *28*, 1567–1577.
- [2] Björklund, G.; Dadar, M.; Mutter, J.; Aaseth, J. The toxicology of mercury: Current research and emerging trends. *Environ. Res.* **2017**, *159*, 545–554.
- [3] Wang, X.; Li, J.; Zhang, Y.; Chen, S. Selenium-mediated mitigation of mercury toxicity through microbial biotransformation in contaminated environments. *Agronomy* **2023**, *14*, 1928.



Delamination of Polymeric Multilayer Films Using Supercritical CO₂

R. Olmos-Greco¹, E. Pérez¹, L. Calvo² and A. Cabañas¹

¹Department of Physical Chemistry, ²Department of Chemical and Materials Engineering, Complutense University of Madrid, 28040 Madrid, Spain

ramolmos@ucm.es

Keywords: multilayer films, supercritical carbon dioxide, delamination

Polymeric materials (plastics) are ubiquitous in modern life and essential to maintaining our current way of living. However, the massive accumulation of plastics causes serious risks to both public health and the environment. Consequently, one potential solution to the global plastic waste crisis is to develop innovative recycling techniques.

Multilayer films are composites made of two or more layers of different materials with varied compositions. They are particularly relevant in the packaging and food industries due to their barrier properties, stiffness, lightweight nature, and antimicrobial activity. The combination of different layers enhances the barrier properties, which helps preserve the freshness, flavor and quality of food [1-2]. Polyethylene (PE) and polyethylene terephthalate (PET) are some of the materials frequently used. Multilayer films are difficult to recycle because of the complexity of their composition, which requires different treatment processes.

Transforming plastic waste into valuable resources enables the transition to a circular economy. There are different recycling methods, classified into physical recycling (melting, extrusion or dissolution) and chemical recycling (pyrolysis or solvolysis). In both cases, it is beneficial to begin with a feedstock that exhibits the highest possible degree of chemical homogeneity.

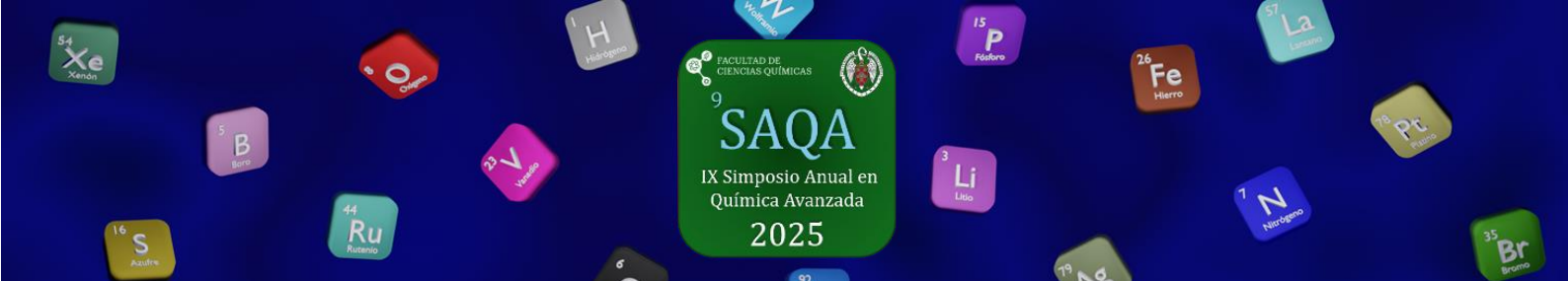
A sustainable approach to plastic recycling involving the use of supercritical CO₂ (scCO₂) is proposed. scCO₂ is considered a green solvent due to its low-cost, non-combustibility, innocuousness and moderate critical parameters (31 °C and 7.4 MPa). It becomes a gas at ambient temperature so it leaves no residue. Furthermore, scCO₂ significantly modifies the properties of polymers as it dissolves into their amorphous regions [3]. This results in the expansion of the distance between polymeric chains, causing swelling and a decrease in the glass transition (T_g) of the polymers, leading to plasticization. scCO₂ can also decrease the melting temperatures (T_m) of many polymers [3].

In this communication, we report for the first time the use of scCO₂ to delaminate multi-layered polymer films used for packaging and wrapping. We explored different variables such as pressure, temperature, depressurization rate or cosolvent addition to accomplish the separation of the different layers of three composite systems: PE/PET, PE/MDO-PE (*MDO: Machine Directed Oriented*) and PolyAl from TetraBrik®. The resulting delaminated layers were identified using different analytical techniques such as ATR-FTIR, DSC or SEM to evaluate the physical and chemical changes that may have happened. This innovative process enables the separation of multilayer plastics, improving waste sorting as a crucial first step towards effective recycling.

Acknowledgements: financial support from MICIU project PID2022-137847OB-100.

References:

- [1] F. Xie. Biopolymer-Based Multilayer Films and Coatings for Food Preservation: an Update of the Recent Development. *Curr. Food Sci. Tech. Rep.* **2023**, *1*, 1-12.
- [2] P. Tamizhdurai, et al. A state-of-the-art review of multilayer packaging recycling: Challenges, alternatives, and outlook. *J. Clean. Prod.* **2024**, *447*, 141403.
- [3] D. L. Tomasko, et al. A Review of CO₂ Applications in the Processing of Polymers. *Ind. Eng. Chem. Res.* **2003**, *42*, 6431-6456.



SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y EVALUACIÓN DE DERIVADOS DE FLUORENOS COMO ELECTRODOS EN BATERÍAS DE ION POTASIO

Irene Gómez-Berenguer^{1,2}, José Manuel Amarilla³, Bernardo Herradón¹, Patricia Delgado-Martínez⁴, Elizabeth Castillo-Martínez²

¹ Instituto de Química Orgánica General, IQOG (CSIC), c/ de Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid, España

² Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, España

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

⁴ Unidad de Difracción de Rayos X, Centro de Asistencia a la Investigación de Técnicas Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid, España

iregom12@ucm.es

Palabras clave: baterías de ion potasio, electrodos orgánicos, fluorenos

Los materiales orgánicos están ganando protagonismo como electrodos en baterías de ion potasio (KIBs) debido a su bajo coste, versatilidad estructural y la posibilidad de modificar su estructura química para ajustar propiedades como el potencial redox, la estabilidad o la solubilidad. Entre ellos, las moléculas pequeñas con grupos carbonilo destacan por su capacidad para participar en procesos redox reversibles y su potencial de funcionalización. [1]

En este trabajo se presenta la síntesis y caracterización del 9-oxo-9H-fluoreno-4-carboxilato de potasio, así como su evaluación como material activo en KIBs. Se obtuvieron distintas fases sólidas en función de las condiciones de reacción, las cuales fueron caracterizadas mediante técnicas estructurales, espectroscópicas, térmicas y morfológicas. La respuesta electroquímica se estudió en “medias celdas” frente a potasio metálico. Los materiales mostraron actividad redox, aunque también ciertos retos relacionados con su estabilidad durante el ciclado. Estos resultados subrayan el interés de esta familia de compuestos y la necesidad de continuar investigando su diseño y optimización para aplicaciones energéticas sostenibles.

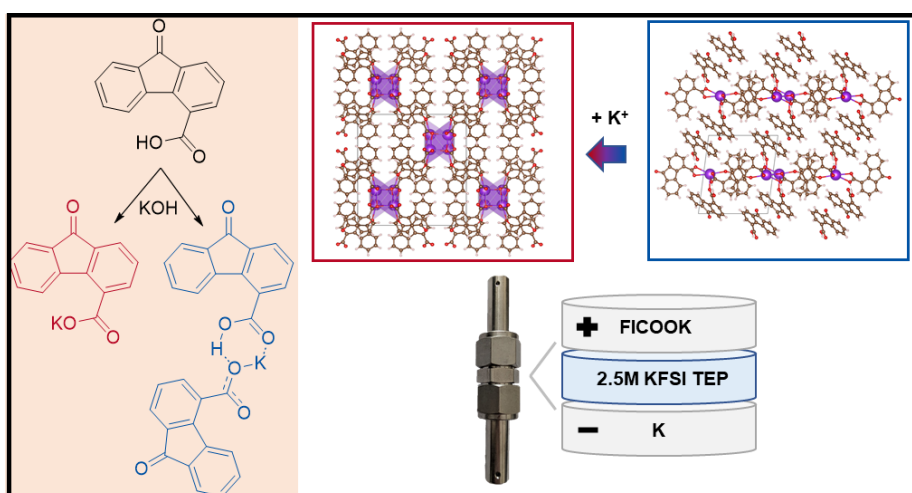


Figura 1. Síntesis, estructuras cristalinas y esquema de la batería.



PROTECCIÓN DE RECUBRIMIENTOS BASE ACUOSA FUNCIONALIZADOS CON GRUPOS FOSFATOS SOBRE LA ALEACIÓN DE MAGNESIO AZ31B

J. Gomez-Granados¹, E. Lopes-Brito², M. Paulis², M. Mohedano¹, R. Arrabal¹, J.R. Leiza², J.M. Vega¹.

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

²POLYMAT, Kimika Aplikatua Saila, Kimika Fakultatea, Universidad del País Vasco UPV/EHU, Joxe Mari Korta Zentroa, 20018, Donostia-San Sebastián (Calibri Cursiva 11 puntos)

jhogomez@ucm.es

Palabras clave: *corrosión, recubrimientos orgánicos, pretratamientos*

Los recubrimientos orgánicos suponen una de las estrategias más eficaces para mejorar la resistencia a la corrosión de los materiales metálicos. Aunque tradicionalmente se han empleado los basados en disolvente para aplicaciones industriales, debido a razones medioambientales, los recubrimientos base acuosa son cada vez más relevantes. Uno de los principales retos asociados a estos sistemas es evitar la corrosión instantánea de la interfase metal/recubrimiento (denominada “*flash-rust*” en aceros). Normalmente, este fenómeno se mitiga incorporando aditivos que actúan como inhibidores de la corrosión, pero una de las alternativas se basa en la funcionalización de monómeros con grupos fosfatos capaz de formar una capa protectora en la superficie del acero al carbono [1].

En el presente trabajo se obtuvo un recubrimiento de base acuosa (compuesto de metacrilato de metilo (MMA) y acrilato de butilo (BA)) utilizando un tensioactivo polimerizable de base fosfatada, el cual se aplicó sobre la superficie de una aleación de magnesio AZ31B. Se utilizaron diferentes pretratamientos superficiales para evaluar la adherencia y el comportamiento frente a la corrosión: a) lijado mecánico, b) limpieza química, c) recubrimiento de conversión de base circonatos (ZrCC), y d) hidróxidos dobles laminares (LDHs). La formación del recubrimiento orgánico se llevó a cabo en una cámara climática bajo condiciones controladas (23°C y 60% de humedad relativa durante 24 horas).

Este estudio incluyó la caracterización de muestras en términos de morfología y composición mediante microscopía electrónica de barrido y espectroscopia de dispersión de energía de Rayos X (SEM-EDS) y la evaluación de la protección frente a la corrosión mediante espectroscopia de impedancia electroquímica (EIS) en una solución de NaCl al 3,5 % en peso. Además, se evaluaron medidas del ángulo de contacto (con agua como disolvente) y los parámetros de rugosidad.

Referencias:

[1] Stefano Chimenti, Jesús Manuel Vega, Eva García-Lecina, Hans-Jürgen Grande, María Paulis, Jose Ramón Leiza, “In-situ phosphatization and enhanced corrosion properties of films made of phosphate functionalized nanoparticles” *React. Funct. Pol.* 143 (2019) 104334 <https://doi.org/10.1016/j.reactfunctpolym.2019.104334>.



MICROPLASTICS IN THE ATMOSPHERE: A VIEW ON THE MADRILEAN AERSOLS

S. Deylami¹, J. Cárdenas-Escudero¹, M. López Ochoa¹, J. Ayuso Haro¹, J. Urraca Ruiz¹, D. Galán- Madrugá², J.O. Caceres¹

¹ *Laser Chemistry Research Group, Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemistry, Complutense University of Madrid, Plaza de Ciencias 1, 28040 Madrid, Spain*

² *National Centre for Environmental Health, Carlos III Health Institute, Ctra. Majadahonda-Pozuelo km 2.2, 28220 Majadahonda, Madrid, Spain*

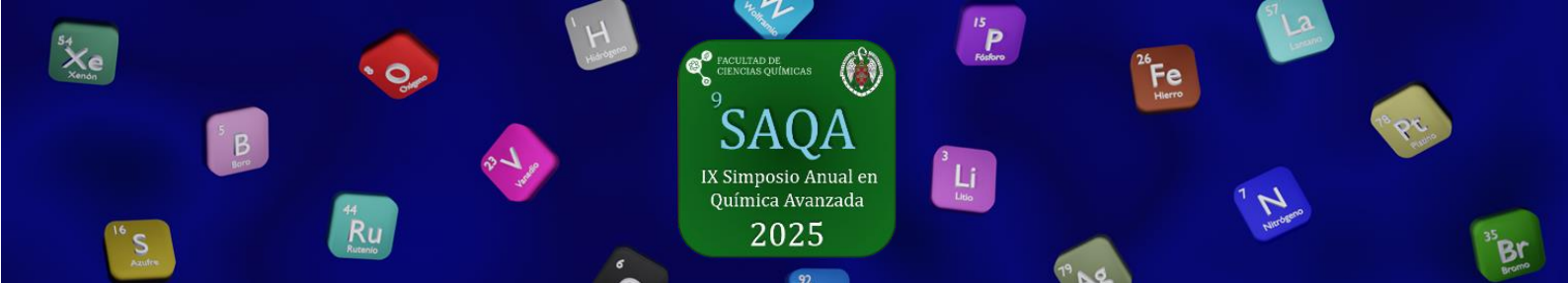
sdeylami@ucm.es

Palabras clave: *microplastics, urban air pollution, aerosol, Madrid City, indoor, outdoor*

This study investigates the seasonal presence of microplastics (MPs) in indoor and outdoor urban aerosols in Madrid, Spain. Compared with the research conducted in the hydrosphere and lithosphere, atmospheric MPs pollution is considered relatively unexplored [1]. PM₁₀ aerosol samples were collected over one year using the standard EN 12341:2014 method to address this gap. Two rapid quantification methods based on UV-assisted optical microscopy were used, with and without prior extraction. MPs were characterized morphologically using field-enhanced scanning electron microscopy with energy dispersive X-ray detection (FE-SEM-EDX) and identified through μ Raman spectroscopy and pyrolysis coupled with gas chromatography-mass spectrometry (Py-GC-MS). The hybrid single particle Lagrangian integrated trajectory (HYSPLIT) modelling software was used to link MPs' potential sources. The study found that outdoor MPs exposure (124 ± 25 particles m³/day) was higher than indoor levels (29 ± 7 particles m³/day). Indoor exposure was 88 ± 32 MPs m³/day during the warm season (April–September) and 122 ± 14 MPs m³/day in the cold season (October–March). Outdoors, exposure was relatively consistent year-round (29 ± 8 and 31 ± 6 particles m³/day, warm and cold, respectively). The composition of MPs in indoor samples and outdoor samples during the warm season was similar, mainly polystyrene (45.8%), polyethylene (22.8%), polyethylene terephthalate (20.0%), and polymethylmethacrylate (11.4%). However, outdoor MPs during the cold season showed notable differences. Fibres dominated over fragments, mostly smaller than 100 μ m. The highest fibre-to-fragment ratios occurred in December outdoors (0.76) and February indoors (0.88). Atmospheric back-trajectory analysis indicated that many MPs likely originated from distant sources, especially oceanic ones, confirming their long-range transport. Overall, the findings highlight significant indoor MPs exposure, especially in colder months, and suggest a general increase in MPs exposure over time across both environments. All these results would be presented in the IX Simposio Anual en Química Avanzada.

Referencias:

[1] Deylami, S.; Cárdenas-Escudero, et al. Microplastics in Antarctic air: revealing current findings. *Antarct. Sci.* **2025**;37(2):104–16.



MAPPING THE ULTRAFAST ENERGETIC AND ATOMIC REQUIREMENTS OF EARTH-ABUNDANT CATALYSTS AND PHOTSENSITIZERS FOR ARTIFICIAL PHOTOSYNTHESIS

Lucía Velasco¹, Dooshaye Moonshiram¹

¹Instituto de Ciencia de materiales de Madrid-CSIC, C. Sor Juana Inés de la Cruz, 3, 28049, Madrid

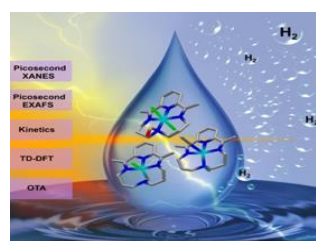
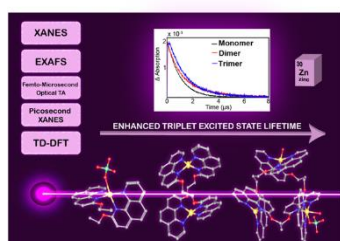
lucia.velasco@csic.es

Palabras clave: artificial photosynthesis, spectroscopy, catalysis, X-ray absorption spectroscopy

The development of inexpensive and efficient visible light-driven devices, capable of mimicking natural photosynthetic processes, represents a critical step towards a future free from fossil fuels. On the molecular front, the characterization of earth-abundant metal-based catalysts and photosensitizers that can participate in water-splitting reactions is indispensable for their subsequent integration in photoelectrochemical cells. In our group, we focus on the spectroscopic characterization of these complexes and their key intermediates, offering valuable insights into their catalytic mechanisms. We use ultrafast time-resolved X-ray absorption spectroscopy (XAS) in the pico-nanosecond timescale to unravel the elusive and relevant structures present in water-splitting reactions. By coupling this technique with steady-state XAS, transient absorption measurements, Resonance Raman, UV-Visible spectroscopy, electron paramagnetic resonance, and Density Functional theory (DFT) calculations, we have successfully disentangled the electronic, spin and vibrational states of a wide number of complexes^{1,2} (Left Figure).

In particular, through the application of these techniques, we have effectively described the catalytic mechanisms of three Co-based photocatalysts for H₂ evolution, which feature equatorial tetraazamacrocyclic ligands with varying substituents on a secondary amine. These complexes exhibit solubility in pure aqueous media, and by capturing key intermediates, we determined that the substituent on the amine group plays a crucial role in the H₂ bond formation step (Right Figure)³.

Currently, we are investigating three Ir-Co dyads for H₂ photo-evolution, along with a series of ligand-based water oxidation catalysts with bibenzimidazole ligands. Our objective is not only to elucidate their catalytic mechanisms, but also to identify key intermediates, thereby enabling the optimization of their structural features and catalytic performance.



Referencias:

- [1] Sauvan, M.; Velasco, L.; Zinc(II) Monomeric, Dimeric and Trimeric Photosensitizers with Microsecond-lived Intra-Ligand Charge Transfer Excited States Investigated through Time-resolved Optical and X-ray Spectroscopy. *Chem. Eur. J.* **2025**, *16*, e202300719
- [2] Velasco L., Llanos L., Structure and excited-state dynamics of dimeric copper(i) photosensitizers investigated by time-resolved X-ray and optical transient absorption spectroscopy. *PCCP*, **2021**, *23*, 3656 – 3667
- [3] Velasco, L.; Liu, C.; Mapping the Ultrafast Mechanistic Pathways of Co Photocatalysts in Pure Water through Time-resolved X-ray Spectroscopy. *ChemSusChem*. **2023**, *16*, e202300719

SEGUNDA SESIÓN

14 de julio de 2025

12:00 – 13:30



Desarrollo de Materiales Poliméricos Avanzados para su Integración como Electrolitos en Baterías de Estado Sólido

^a Anthony Alexander Vásquez Medina; Alejandro Ares Dorado; Javier Carretero González; Elizabeth Castillo Martínez

^a Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, ICTP, CSIC C/ Juan de la Cierva, 3, 28006, Madrid, España.

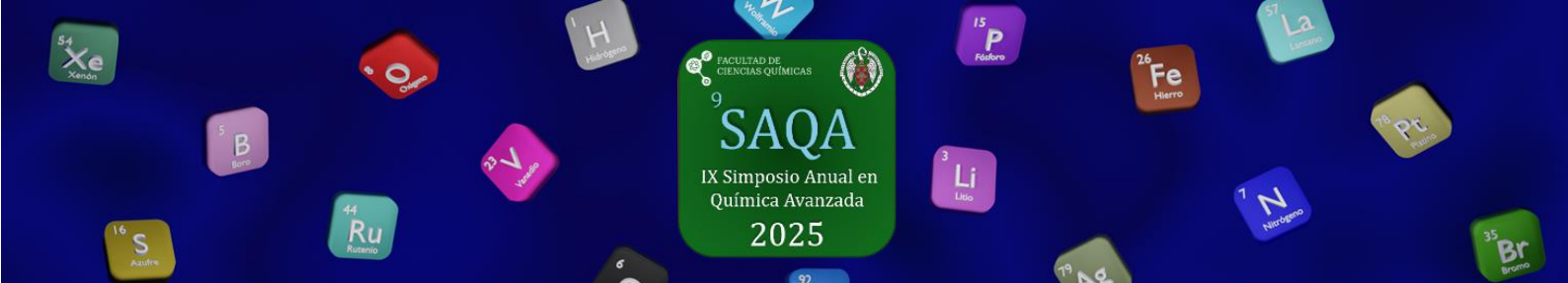
Correo: anthovas@ucm.es ; tony.vas@ictp.csic.es

Palabras clave: *Electrolitos poliméricos sólidos, electroquímica, copolímeros, baterías de estado sólido, conductividad iónica.*

En este trabajo se presenta el diseño, síntesis y caracterización de nuevos materiales poliméricos sólidos basados en copolímeros de óxido de polietileno (PEO) obtenidos mediante policondensación, con el objetivo de mejorar la eficiencia, sostenibilidad y seguridad de baterías de estado sólido de ion-litio.[1] Se desarrollaron tres formulaciones principales: 6028, 5007 y 7029, las cuales fueron mezcladas con una sal de litio a diferentes relaciones molares para evaluar su procesabilidad en seco y su desempeño electroquímico. Las membranas de electrolitos fueron obtenidas mediante un proceso de prensado en caliente en ausencia de disolventes, lo que contribuye a una fabricación más sostenible y energéticamente eficiente.[2] Las caracterizaciones térmicas (DSC, TGA), estructurales (FTIR, GPC) y electroquímicas (EIS, LSV, CV) revelaron que la incorporación de la sal de litio induce una transición hacia una fase amorfa, favoreciendo la movilidad iónica. El SPE 7029 mostró la mayor conductividad iónica ($9,49 \times 10^{-5}$ S/cm a 80 °C) y buena estabilidad electroquímica. Además, se exploraron técnicas de deposición seca, como el prensado en caliente, para aplicar los SPE sobre cátodos comerciales de LiFePO_4 , demostrando una buena adhesión y una cobertura homogénea. Las celdas Li/SPE/LiFePO_4 ensambladas demostraron un funcionamiento electroquímico operativo, con una capacidad de carga-descarga aceptable en determinados C-rates. Aunque se observaron ciertas variaciones en la eficiencia coulombica y comportamientos algo inestables, los resultados obtenidos permiten validar el sistema como una base funcional para futuras optimizaciones. Estos resultados evidencian el potencial de los copolímeros sintetizados como electrolitos sólidos sostenibles y eficientes para baterías de litio de estado sólido, y abren nuevas posibilidades para su integración en procesos de fabricación en seco a escala industrial.[3]

Referencias:

- [1] Subramani, R.; Pham, M.; Lin, Y.; Hsieh, C. Design of networked solid-state polymer as artificial interlayer and solid polymer electrolyte for lithium metal batteries. *Chemical Engineering Journal*. **2022**, 431, 133442.
- [2] Elmanzalawy, M.; Sanchez-Ahijón, E.; Kisacik, O.; Carretero-González, J.; Castillo-Martínez, E. High Conductivity in a Fluorine-Free K-Ion Polymer Electrolyte. *ACS Appl. Energy Mater.* **2022**, 5, 9009–9019. DOI: 10.1021/acsaem.2c01485
- [3] H. Zhang et al. Lithium bis(fluorosulfonyl)imide/poly(ethylene oxide) polymer electrolyte *Electrochimica*. **2014**, 133, 529–538



ADDITIVE MANUFACTURING: EFFECT ON SURFACE TREATMENT AND CORROSION OF BIOMEDICAL IMPLANTS

S. Javadi, R. Arrabal, E. Matykina

Departamento de Ingeniería Química y de Materiales, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Pl. de las Ciencias, 2, 28040, Madrid

shjavadi@ucm.es

Keywords: additive manufacturing, titanium, plasma electrolytic oxidation, drug-eluting coating, implants

This study investigates the impact of additive manufacturing (AM) on the surface treatment and corrosion resistance of Ti6Al4V alloy biomedical implants, and explores the integration of drug-delivery functionality into implantable systems. The objectives of the work are (i) understanding of the implications of selective laser melting (SLM) AM technology on implant's durability and surface properties and (ii) development of protective drug-eluting hybrid coatings for next-generation biomedical implants. Ti6Al4V alloys fabricated via selective laser melting (SLM) and conventional forging are studied. Surface treatments include (i) plasma electrolytic oxidation (PEO) [1] to produce ceramic coatings enriched with Ca, P, Si, Mg, and Zn and (ii) deposition of a porous polylactic acid layer using *breath figures* technique. Corrosion resistance was assessed in simulated body fluid (SBF) at 37 °C using AC and DC electrochemical methods. In parallel, Zn-Fe layered double hydroxide (LDH) was synthesized via co-precipitation method, loaded with gentamicin and incorporated into polycaprolactone (PCL) films. This approach aims to generate a hybrid bioactive coating system that integrates a Zn-Fe-LDH-based drug delivery into a biodegradable polymer top-coat over a ceramic PEO layer (Figure 1). It was found that SLM-Ti6Al4V alloy exhibited a greater susceptibility to localized corrosion in crevices than forged counterparts. Critical crevice size of ~10 μm was determined. Hybrid PEO/PLA coatings markedly improved corrosion resistance of SLM-Ti6Al4V, effectively mitigating localized attack induced by the AM microstructure. Zn-Fe-LDH formed a well-defined crystalline structure with intergallery spacing of ~5.7 Å. Gentamicin sulfate intercalation into LDH was confirmed by FTIR spectra and EDS mapping. LDH exhibited a 1.1 mg/mg loading capacity and a sustained release of up to 82.4% of the load over 144 h determined using UV/Vis spectrophotometry. A uniform dispersion of gentamicin-loaded Zn-Fe LDH within a PCL layer was achieved. This work proposes a strategy for surface functionalization of additively manufactured metallic implants for improved longevity and performance whose therapeutic functionalities can be customized for specific needs of the patients.

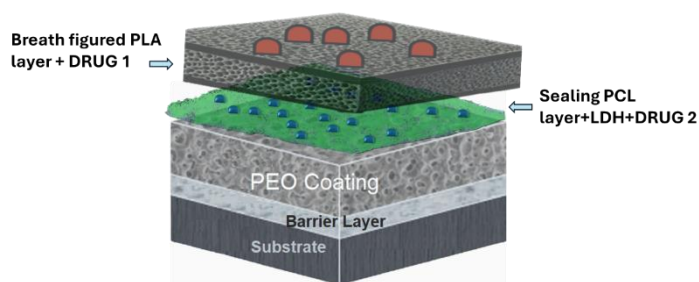


Figure 1. Schematic of the hybrid drug-eluting coating full system.

Acknowledgements: PIPF-2023/SAL-GL-30737- (Comunidad de Madrid), PLEC2023-010346 (MICIU/AEI/CDTI).

References:

[1] Mora-Sánchez, H.; Ramos, C.; Mohedano, M.; Torres, B.; Arrabal, R.; Matykina, E. Flash plasma electrolytic oxidation and electrochemical behaviour in physiological media of additive manufacturing Ti6Al4V alloy, *Trans. Nonferr. Met. Soc. China*, **2024**, 34(4), 1150-1166.



TRANSFORMACIÓN DE TiO_2 NPS Y SiO_2 NPS PRESENTES EN ADITIVOS ALIMENTARIOS MEDIANTE MODELOS *IN VITRO*: DESDE LA MATRIZ ALIMENTARIA AL EPITELIO INTESTINAL

Elena Espada Bernabé, Beatriz Gómez Gómez, Gustavo Moreno Martín, Yolanda Madrid

Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid. Avda Complutense s/n, 28040, Madrid

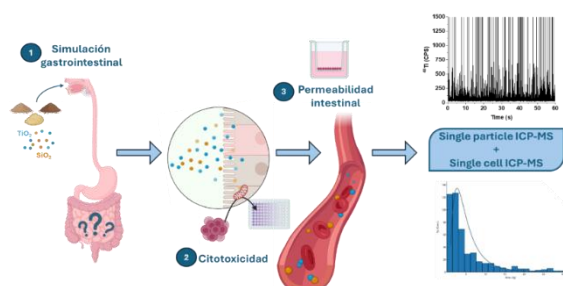
elenaesp@ucm.es

Palabras clave: (nano)partículas, TiO_2 , SiO_2 , (sp/sc)ICP-MS, matriz alimentaria

Uno de los retos actuales en seguridad alimentaria es detectar la presencia de material nanoparticulado en aditivos alimentarios. Entre ellos se encuentra la presencia de (nano) partículas de TiO_2 y SiO_2 en los aditivos E171 actualmente prohibido en la UE [1] y E551 [2], respectivamente. El presente estudio aborda la evolución de estas partículas durante la digestión gastrointestinal y su interacción con células intestinales empleando un sistema *in vitro*.

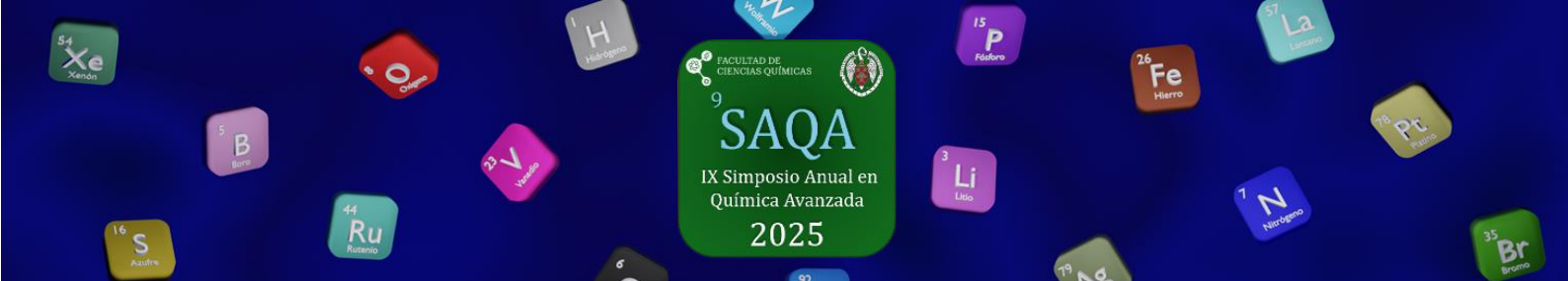
En una primera etapa, se llevó a cabo una simulación del proceso gastrointestinal *in vitro* empleando tres matrices alimentarias (cacao puro, cacao soluble y azúcar glass). Los resultados del análisis por single-particle ICP-MS (spICP-MS) mostraron que las (nano)partículas de TiO_2 permanecían inalteradas durante el proceso de digestión, mientras que las partículas de SiO_2 parecen sufrir procesos de aglomeración/agregación. Ambas son capaces de alcanzar la región intestinal, pudiendo entrar en contacto con células intestinales.

Los estudios a nivel celular se realizaron con la línea Caco-2. La viabilidad celular se evaluó mediante ensayos MTT con los extractos intestinales obtenidas en el estudio anterior, observándose una reducción del 83 ± 4 % a las 4h hasta el 25 ± 5 % tras 24h de exposición; mientras que los patrones de TiO_2 y SiO_2 , en sus formas particuladas e iónicas, a las mismas concentraciones que las encontradas en los extractos resultaron inocuos (Ti iónico: 20 y $40 \mu\text{g L}^{-1}$)/ Si iónico: 200 y $1000 \mu\text{g L}^{-1}$; $\text{TiO}_2/\text{SiO}_2$ (nano)particulado: 10-10⁷part g⁻¹). Estos datos pusieron de manifiesto que la disminución de la viabilidad fue debida a la matriz alimentaria y no a la presencia de Ti y Si. Los ensayos de permeabilidad intestinal tipo Transwell con los mismos extractos intestinales, evidenciaron que la migración de ambos tipos de partículas a través de la barrera intestinal es dependiente de la matriz alimentaria: 71-90 % en el caso de TiO_2 y 43-80 % para SiO_2 . Un aspecto novedoso de este estudio fue determinar la acumulación de Ti y Si por célula individual mediante single-cell ICP-MS. Para ello se optimizaron aspectos como la fijación celular con PFA, y la separación de las NPs puestas en contacto con el cultivo celular mediante el empleo de columnas Hi-Trap. Los resultados revelaron el bajo nivel de acumulación de Ti en Caco-2 ($1-5 \text{ fg cell}^{-1}$) a los niveles de concentración encontrados en los extractos intestinales.



Referencias:

- [1] The European Commission, *Off. J. Eur. Union*, **2022**.
- [2] EFSA Panel on Food Additives and Flavourings, Working Group meeting on FOLLOW-UP TOX, **2024**.



PROTEIN NANOROTORS CONTROL THE SIZE OF LIPID DOMAINS IN PHASE-SEPARATED MONOLAYERS

Nuria Carrillo-Godoy ^[1,2,3], David Valdivieso González ^[1,2,3], Paolo Natale ^[1,2,3] Hernán Ritacco

^[4] Francisco J. Cao-García ^[5,6] Víctor G. Almendro-Vedia ^[2,3,7] and Iván López-Montero* ^[1,2,3]

¹ *Departamento de Química Física. Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, España.*

² *Instituto de Investigación Biomédica Hospital 12 de Octubre (imas12), 28041 Madrid, España.*

³ *Instituto Pluridisciplinar. Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, España.*

⁴ *Instituto de Física del Sur (IFISUR), Departamento de Física, Universidad Nacional del Sur (UNS), CONICET, Av. L.N. Alem 1253, B8000CPB - Bahía Blanca, Argentina.*

⁵ *Departamento de Estructura de la Materia, Física Térmica y Electrónica, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, España.*

⁶ *IMDEA Nanociencia, 28049 Madrid, España.*

⁷ *Departamento de Farmacia Galénica y Tecnología Alimentaria. Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, España.*

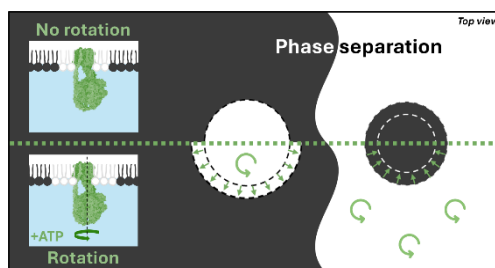
nuriac01@ucm.es

Keywords: ATP synthase, line tension, lipid monolayers, domains, biological spinners, lateral pressure

ATP synthase is a fundamental biological motor that drives ATP synthesis through rotational movement, producing the cell's primary energy molecule. Beyond ATP generation, the rotation of its F_o domain actively reshapes the surrounding lipid bilayer reducing lateral pressure [1] and thus driving both protein curvature sorting and enhanced membrane fluctuations [2].

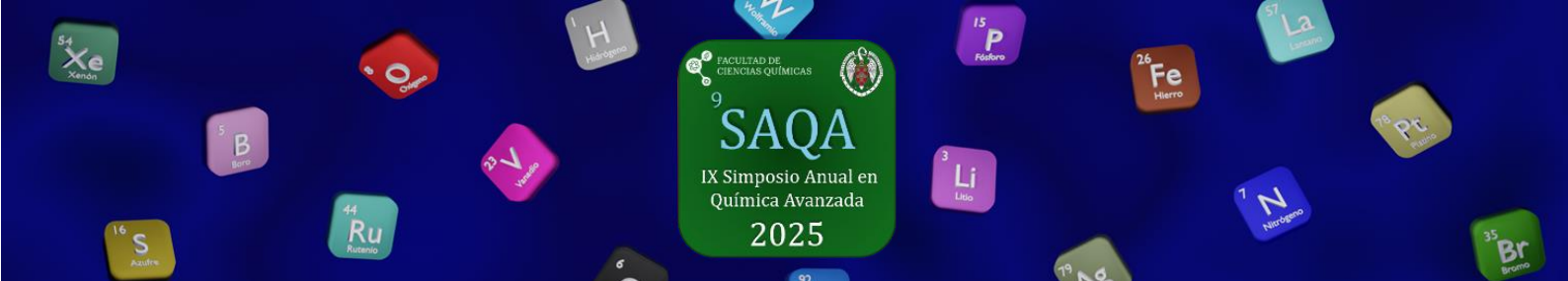
We investigate how ATP synthase's rotational motion affects the size of lipid domains in phase-separated monolayers. By taking advantage of the specific interaction between ATP synthase and cardiolipin, we incorporate the protein into the cardiolipin-rich phase and investigate the impact of rotational forces on phase behavior.

Upon ATP addition, the spinning motion of ATP synthase causes a reduction of the lateral pressure in the protein-enriched phase. Our results demonstrate that lipid domains follow the Young-Laplace equation, $\Delta\Pi=R$, with protein-enriched domains expanding in size while those protein-devoid domains decrease their surface area. This size modulation appears to balance the surface pressure difference across the fluid-fluid interface, establishing a functional relationship between nanoscale protein activity and microscopic mechanical properties.



[1] Valdivieso González, D. et al. Elastic remodeling of model and cell membranes by rotating ATP synthase. *Cell Reports Physical Science*, **2025**, 6(5).

[2] Valdivieso González, D., Makowski, M., Lillo, M. P., Cao-García, F. J., Melo, M. N., Almendro-Vedia, V. G., & López-Montero, I. Rotation of the c-Ring Promotes the Curvature Sorting of Monomeric ATP Synthases. *Advanced Science*, **2023**, 10(31), 2301606.



Electroquímica de nuevos electrolitos poliméricos libres de flúor para baterías de ion potasio: Influencia de cationes voluminosos en las propiedades de transporte

Alejandro Ares Dorado^{1,2}, Ángela Ruiz Valderrey^{1,2}, Elizabeth Castillo Martínez¹ y Javier Carretero González²

¹Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, UCM, Pl. de las Ciencias, 2, Moncloa - Aravaca, 28040 Madrid

²Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, ICTP-CSIC, C. de Juan de la Cierva, 3, Chamartín, 28006 Madrid

alares@ucm.es

Palabras clave: Electroquímica, Electrolitos poliméricos libres de flúor, baterías de ion potasio, baterías en estado sólido, Conductividad iónica

La transición energética hacia fuentes renovables requiere de robustos sistemas de almacenamiento energético para compensar la intermitencia de su suministro y su consumo en sistemas móviles. En este contexto, se debe investigar en sistemas de almacenamiento que requieran elementos de fácil obtención como las baterías de ion potasio. Estos sistemas de almacenamiento deben ser más seguros y de mayor vida útil que los dispositivos actuales, y para ello los electrolitos poliméricos sólidos son una buena alternativa a los líquidos debido a su mayor resistencia mecánica y al fuego [1]. En este trabajo, se prepararon electrolitos poliméricos sólidos mediante una síntesis sin disolventes en estado sólido en la que se mezclan óxido de polietileno (PEO), un poliéter que permite el transporte de cationes de potasio mediante enlaces de coordinación lábiles con los oxígenos de las cadenas poliméricas [2]; el tetrafenilborato de potasio, una sal con un anión voluminoso y con carga deslocalizada que favorece su disociación y la solvatación por la matriz polimérica [1], y una sal adicional con el mismo anión y un catión voluminoso basado en pirrolidinio o imidazolio, que favorecen la creación de volumen libre para el paso de los iones en la matriz polimérica [2,3] y reducen por competencia la interacción del potasio con el PEO [2], mejorando su movilidad. Se estudiaron distintas funcionalizaciones de ambos cationes para probar los efectos en las propiedades electroquímicas de los electrolitos poliméricos debidas a los efectos estéricos, la compatibilidad química y la deslocalización de carga en dichos cationes. Los resultados obtenidos demuestran que se puede controlar las interacciones del polímero con la sal de potasio y con las sales de catión voluminoso cambiando la longitud de las cadenas de sustituyentes y su composición química, consiguiendo con ello aumentos significativos de conductividad a temperaturas inferiores al punto de fusión de las fases cristalinas del PEO. Estos resultados permiten una mayor comprensión de los procesos que compiten en el transporte de iones en la matriz polimérica y proporcionan herramientas para modificar las propiedades de transporte con el objetivo de obtener altas conductividades a bajas temperaturas, permitiendo el ciclado operativo en futuras baterías de ion potasio en estado sólido.

Referencias:

- [1] Elmanzalawy, M., Sanchez-Ahijón, E., Kisacik, O., Carretero-González, J. & Castillo-Martínez, E. High Conductivity in a Fluorine-Free K-Ion Polymer Electrolyte. *ACS Appl Energy Mater* 5 (2022) vol. 5, no 7, p. 9009-9019
- [2] Arya, A. & Sharma, A. L. Insights into the use of polyethylene oxide in energy storage/conversion devices: A critical review. *Journal of Physics D: Applied Physics* (2017) vol. 50 no 44, 443002-443054 .
- [3] Kim, G. T. et al. UV cross-linked, lithium-conducting ternary polymer electrolytes containing ionic liquids. *J Power Sources* (2010) 195, 6130-6137



PHYSICAL PROPERTIES OF GM130 CONDENSATES THROUGH FLUORESCENCE ANISOTROPY

Miguel A. Sacristán^{1,3}, M Pilar Lillo⁴ y Iván López-Montero^{1,2,3}

¹Departamento de Química Física, Facultad de Química, UCM, Pl. Ciencias 3, 28040, Madrid

²Instituto Pluridisciplinar, UCM, Av. Juan XXIII 1, 28040, Madrid

³Instituto de Investigación Biomédica Hospital Doce de Octubre (imas12), Av. de Córdoba s/n, 28041, Madrid

⁴Departamento Química Física Biológica, Instituto de Química-Física "Blas Cabrera", CSIC, C. Serrano 119, 28006, Madrid

migsacri@ucm.com

Palabras clave: LLPS, biological condensates, Golgi, GM130, fluorescence anisotropy

Recent advances in our understanding of the behaviour of biological liquid condensates have significantly enhanced the study of the conformation and organization of cellular organelles. These condensates arise through a process known as liquid-liquid phase separation (LLPS), which is governed by molecular properties such as affinity, valency, and the dynamic interplay between inter- and intramolecular interactions.

Members of the golgin protein family have been reported to undergo phase separation under conditions of elevated concentration [1]. Golgins are Golgi-specific proteins essential for the structure of the Golgi apparatus—a membrane-bound organelle composed of stacked cisternae that are laterally interconnected to form a ribbon-like configuration. During mitosis, the Golgi apparatus undergoes fragmentation into smaller Golgi remnants, which later reassemble after telophase. It has been proposed that LLPS of specific golgins contributes critically to the reassembly and functional organization of the Golgi structure. In this context, we focus on the golgin GM130, a cis sheet-Golgi, due to evidence that genetic ablation of GM130 impairs proper Golgi morphology and assembly.

To investigate the biophysical properties of GM130 condensates, we propose the use of fluorescence anisotropy as an experimental technique [2]. By analysing the polarization of fluorescence emission, it is possible to extract parameters such as microviscosity and molecular density—quantities that are potentially linked to the condensates physical state and functional roles within the Golgi apparatus. Furthermore, these measurements can serve as reliable indicators of condensation, enabling the detection of GM130 condensates under physiological conditions *in vivo*.

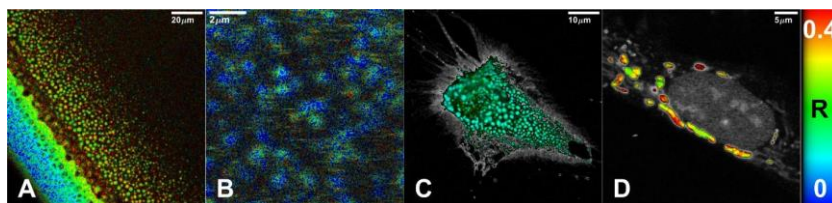


Figure 1: FAIM images of: A) 3D condensates *in vitro*, B) 2D condensates *in vitro*, C) 3D condensates *in vivo*, D) biological conditions.

Referencias:

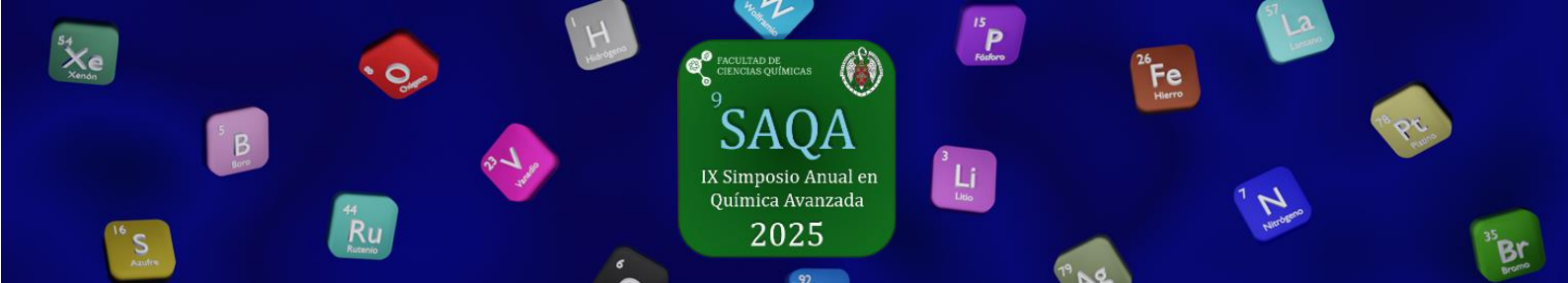
[1] Rebane, A.A.; Ziltener, P.; LaMonica, L.C.; Bauer, L.C.; Bauer, A.H.; Zheng, H.; López-Montero, I.; Pincet, F.; Rothman, J.E.; Ernst, A.M. Liquid-liquid phase separation of the Golgi matrix protein GM130. *FEBS Letters*. **2020**, *594*, 1132-1144.

[2] Joshi, A.; Walimbe, A.; Sarkar, S.; Arora, L.; Kaur, G.; Jhandai, P.; Chatterjee, D.; Banerjee, I.; Mukhopadhyay, S. Intermolecular energy migration via homoFRET captures the modulation in the material property of phase-separated biomolecular condensates. *Nature Communications*. **2024**, *15*:9215.

TERCERA SESIÓN

15 de julio de 2025

9:30 – 11:30



DESARROLLO DE CATALIZADORES ESTRUCTURADOS PARA LA UTILIZACION DE PORTADORES DE HIDROGENO BASADOS EN LIQUIDOS ORGANICOS

María Santos Plana, Manuel Jesús Benito González, Rita Ximena Valenzuela Balderrama

Departamento de Ingeniería Química y de Materiales, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Ciudad Universitaria, 28040I, Madrid

msanto34@ucm.es

Palabras clave: Hidrogenación/Des-Hidrogenación, LOHC, Tolueno, Metilciclohexano, dibenciltolueno, perhidro dibenciltolueno.

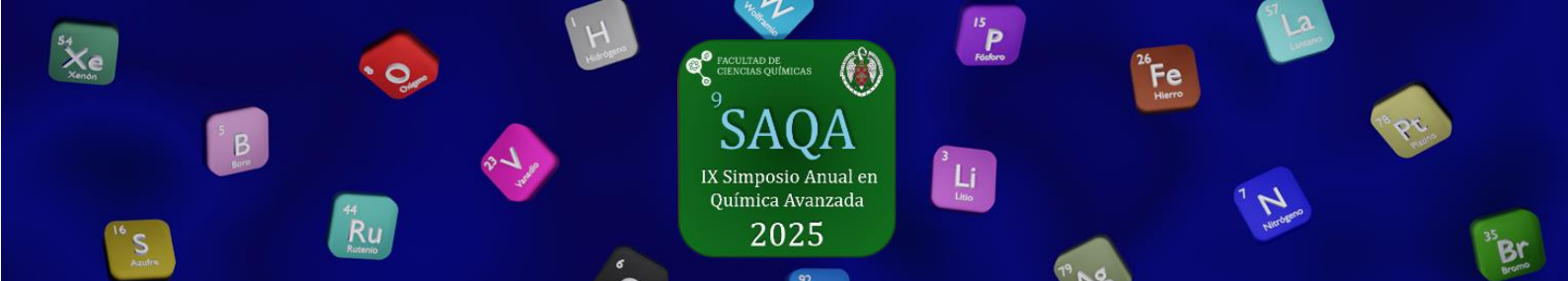
Una de las mayores limitaciones que presenta la aplicación del hidrógeno como vector energético es su baja densidad energética por unidad de volumen, y su alta densidad energética por unidad de masa ¹. Estos hechos condicionan de forma determinante su aplicación final ya que para emplearlo en fase gas se necesitan presiones del orden de 800 bar con el objeto de alcanzar suficiente densidad energética de cara a una aplicación móvil ^{2,3}. Una segunda alternativa consiste en la utilización de aleaciones metálicas capaces de formar hidruros en presencia de hidrógeno ⁴. En este caso, el elevado peso de los depósitos que contienen aleaciones metálicas, así como la cinética de los procesos de adsorción y desorción, limitan su utilización, sobre todo en aplicaciones móviles⁵.

En este escenario, la utilización de líquidos orgánicos como portadores de hidrógeno, comúnmente denominados por sus siglas en inglés (LOHCs), resulta una opción tremendamente interesante para el almacenamiento de hidrógeno debido a su elevada densidad energética en condiciones ambientales. El almacenamiento de hidrógeno se realiza mediante una hidrogenación catalítica exotérmica de los dobles enlaces presentes en la estructura de los líquidos orgánicos que se proponen (tolueno, dibenciltolueno, naftaleno, benziltolueno...) mientras que el proceso de liberación está basado en una deshidrogenación catalítica endotérmica, en la que se libera el hidrógeno retenido en la estructura del líquido orgánico (LOHC).

En esta tesis se desarrollarán catalizadores *ad hoc* para la hidrogenación de tolueno y dibenciltolueno, así como los catalizadores de deshidrogenación de metilciclohexano y perhidro dibenciltolueno.

Referencias:

- [1] Mazloomi, K.; Gomes, C. Hydrogen as an Energy Carrier: Prospects and challenges. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. **2012**, 16, 3024-3033
- [2] Nierman, M.; Beckendorff, A.; Kaltschmitt, M.; Bonhoff, K. Liquid Organic Hydrogen Carrier (LOHC): Evaluation Base don Chemical and Economic Properties. *International Journal of Hydrogen Energy*. **2019**, 44, 6631-6654
- [3] Schildhauer, T.; Newson, E.; Müller, ST. The Equilibrium Constant for the Methylcyclohexane-Toluene System. *Journal of Catalysis*. **2001**, 198, 355-358
- [4] Chandra Rao, P.; Yonn, M. Potential Liquid Organic Hydrogen Carrier (LOHC) System: a Review of Recent Advances. *Energies*. **2020**, 13, 6040
- [5] Aallo-Saksa, P.T.; Cook, C.; Kiviaho, J.; Repo, T. Liquid Organic Hydrogen Carriers for Renewable Energy Transport and Storage: Review and Discussion. *Journal of Power Sources*. **2018**, 396, 803-823



MÉTODOS RADIOQUÍMICOS BASADOS EN LE EXTRACCIÓN LÍQUIDO- LÍQUIDO PARA EL ESTUDIO DE ZONAS IMPACTADAS POR ACTIVIDADES MINERAS

Víctor Manuel Expósito Suárez^{1,2}, José Antonio Suárez Navarro¹

¹Unidad de Radiactividad Ambiental y Vigilancia Radiológica, Departamento de Medioambiente, CIEMAT, Avda. Complutense 40, 28040, Madrid, España

²Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias, 2, Moncloa-Aravaca, 28040, Madrid, España

victorex@ucm.es, VictorManuel.Exposito@ciemat.es

Palabras clave: radioquímica, uranio, torio, minería, medioambiente.

Las actividades humanas tienen un fuerte impacto sobre el medioambiente, en concreto la actividad minera no solo altera el entorno, si no que además puede dar lugar al afloramiento de altas concentraciones de radionucleidos naturales que acompañan a los minerales y que tras el cese de la explotación minera quedan abandonados en las escombreras.

El desarrollo de métodos de separación radioquímica adecuados y selectivos es de vital importancia para el estudio y la caracterización de zonas impactadas radiológicamente. En este estudio se han desarrollado dos métodos de separación radioquímica basados en la extracción líquido-líquido con tri-n-butil fosfato (TBP). Los dos elementos sobre los que se ha centrado el estudio son uranio y torio.

El método de separación radioquímica del uranio se ha centrado en la acomplejación inicial de los cationes interferentes presentes en la muestra empleando una disolución de EDTA en medio nítrico y en la selectividad del método para reextraer únicamente el uranio del resto de elementos usando diferentes disoluciones acuosas [1].

El método de separación radioquímica del torio se centró principalmente en la reducción de la interferencia que se produce en el fotopico del trazador ²²⁹Th debido al ²³⁴U. Las variaciones que aplicaron el método inicial consistieron en la modificación de la disolución ácida inicial de HNO₃ por HCl, variando la molaridad, y en la mezcla del TBP con Xileno previa a la reextracción del torio [2].

Ambos métodos mejoran significativamente el rendimiento químico de extracción y la selectividad frente a los interferentes emisores alfa y a los cationes estables presentes en la muestra.

Referencias:

[1] Exposito-Suarez, V.M., Suarez-Navarro, J.A., et al. Increasing the recovery and selectivity of ²³⁸U, ²³⁵U, and ²³⁴U extraction with tri-n-butyl phosphate in mine tailing samples with a high copper content. *Anal. Chim. Acta.*, **2023**, vol. 1259, 341183

[2] Exposito-Suarez, V.M., Suarez-Navarro, J.A., et al. Study of the Chemical Recovery and Selectivity against U in the Radiochemical Separation of Th with Tri-n-butyl Phosphate by Varying the Proportion of Xylene and HCl Concentration. *Molecules*, **2024**, vol. 29, 4225



BiVO₄-based heterojunctions for improved OER in PEC cells

Javier Llorente López¹, Mariam Barawi¹, Miguel García-Tecedor¹ y Víctor A. de la Peña O'Shea¹

¹Unidad de Procesos Fotoactivados, IMDEA Energía, Avda. Ramón de la Sagra, 3, 28935, Móstoles (Madrid)

javier.llorente@imdea.org

Palabras clave: BiVO₄, OER, photoelectrochemistry, heterojunctions, cocatalysts, CPP, oxyhydroxides

Oxygen evolution reaction (OER) is the rate limiting step in (photo)electrochemical solar fuels production processes in aqueous media like water splitting or CO₂ reduction. This is because the oxidation of water is energetically demanding (1.23 V vs RHE at pH = 0 and 25 °C) and slow, with sluggish kinetics and a complex, multistep mechanism that involves 4 electrons. Noble metal oxides are typically employed as electrocatalysts, such as RuO_x or IrO₂, but these are scarce and expensive. [1] Therefore, cheaper, more accessible alternatives are required to escalate (photo)electrocatalytic solar fuels production. In this context, photoelectrocatalysts based on transition metal-oxides are thoroughly investigate as they can harness sunlight to yield chemical reactions, their low cost and their accessibility.

Among them, bismuth vanadate (BiVO₄) stands out due to its: a) n-type character, b) narrow band gap (2.4 eV), c) suitable valence band (VB) position, d) non-toxicity, and e) low cost. However, this material also suffers from certain drawbacks, namely, slow carriers' transportation or surface recombination that ultimately lead to slow OER kinetics and photocorrosion -the chemical process by which BiVO₄ transforms into non-active oxides such as V₂O₅ or Bi₂O₃ as a result of the oxidizing power of photogenerated holes that are not employed into yielding the reaction of interest-. [2]

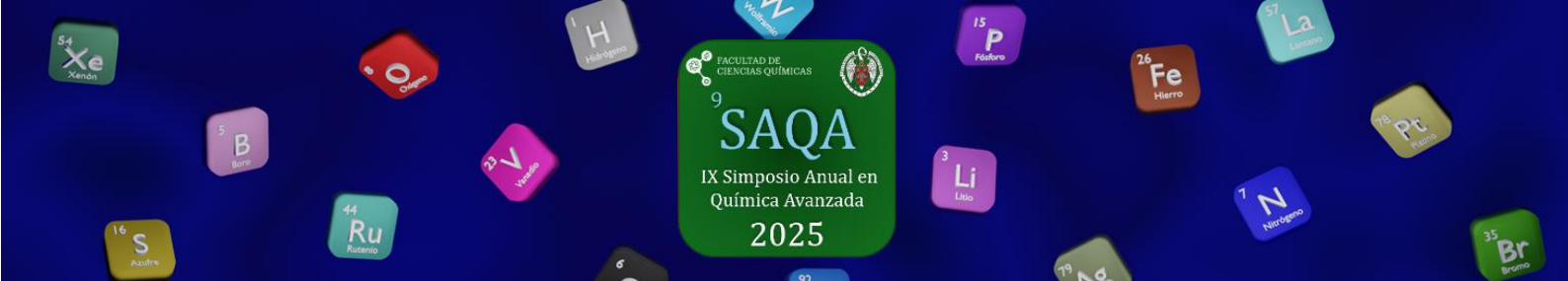
Many approaches are being studied to tackle these inconveniences like different preparation methods, nanostructuring, heterojunctions, or usage of cocatalysts. In this work, we explore two of these strategies: i) inorganic-organic heterojunctions between BiVO₄ and a conjugated porous polymer based on 1,3,5-tri(thiophen-2-yl)benzene (3TB) monomer; and ii) deposition of MOOH (M = Fe, Ni, Fe+Ni) cocatalysts over BiVO₄ films

The 3TB polymer was deposited with different thicknesses onto the BiVO₄ films by cyclic voltammetry (CV) and its presence was confirmed by energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX). The hybrid photoelectrodes were then characterized photoelectrochemically by linear sweep voltammetry (LSV) and chronoamperometry (CA) and an enhancement in stability could be observed.

In another set of BiVO₄ films, MOOH cocatalysts were deposited photo(electro)chemically. Their presence was confirmed by EDX and the morphology of the clusters was studied by field-emission sweep electronic microscopy (FE-SEM). Then, the devices were photoelectrochemically characterized by LSV -where an improvement in photocurrent, fill factor, and photocurrent onset potential could be observed- and by electrochemical impedance spectroscopy (EIS), that revealed a reduction in charge transfer resistance for all the cocatalyst-containing photoelectrodes.

Referencias:

- [1] Craig, M.J.; Coulter G.; Dolan, E. *et al. Universal scaling relations for the rational design of molecular water oxidation catalysts with near-zero overpotential. Nat. Commun.* **2019**, *10*, 4993
- [2] Barawi, M.; Gomez-Mendoza, M.; Oropeza, F.E.; Gorni, G.; Villar-Garcia, I.; Giménez, S.; De la Peña O'Shea, V.A.; García-Tecedor, M. *Laser-Reduced BiVO₄ for Enhanced Photoelectrochemical Water Splitting. ACS Appl. Mater. Interfaces.* **2022**, *14*(29), 33200-33210



RON-CHLORANILATE FRAMEWORKS AS HIGH ENERGY AND POWER CATHODES FOR SUSTAINABLE ALKALI-ION BATTERIES

Víctor Durán-Egido¹, Elizabeth Castillo Martínez¹, Javier Carretero-González².

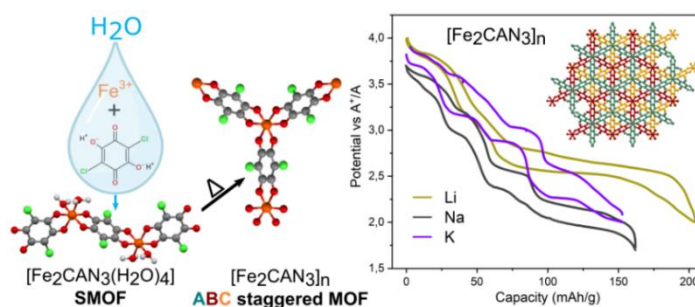
¹Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias, 2, 28040, Madrid

²Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, ICTP, CSIC, Calle Juan de la Cierva, 3, 28006, Madrid

vduran01@ucm.es

Palabras clave: Metal-organic frameworks, battery, electrochemistry, sustainable

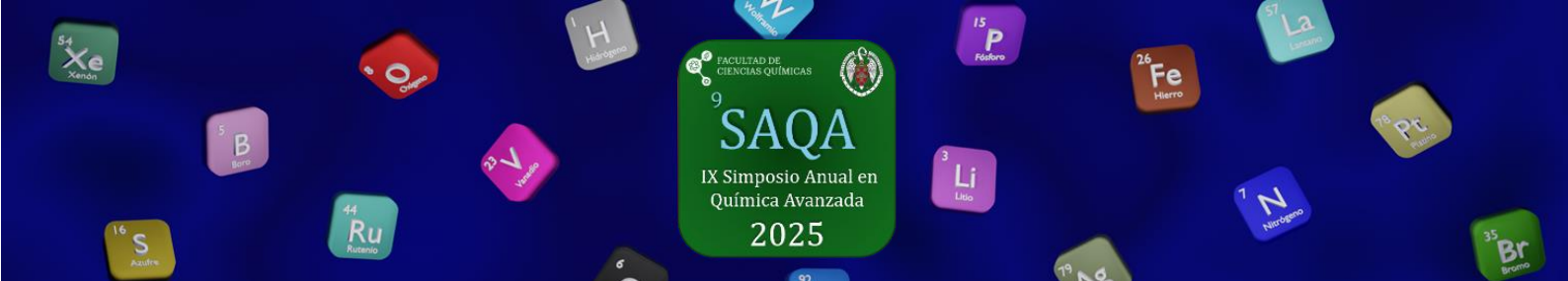
Achieving high battery performance from low-cost, easily synthesisable electrode materials is crucial for advancing energy storage technologies.¹ Metal organic frameworks (MOFs) combining inexpensive transition metals and organic ligands are promising candidates for high-capacity cathodes.² Iron-chloranilate-water frameworks are herein reported to be produced in aqueous media under mild conditions. Removal of reticular water from known $[\text{Fe}_2(\text{CAN})_3(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ yields a new supramolecular metal-organic framework (SMOF), $[\text{Fe}_2(\text{CAN})_3(\text{H}_2\text{O})_4]$. Removing coordination water, a new 2D honeycomb-like MOF forms, $\text{Fe}_2(\text{CAN})_3$, stable without counterions and solvent.³ This MOF adopts the unusual ABC layer-stacking, as determined using a combination of *ab initio* random structure searching, electron diffraction, and Rietveld refinement of powder XRD data. Magnetometry, Mossbauer and Raman spectroscopy confirm that all three $[\text{Fe}_2(\text{CAN})_3(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot \gamma\text{H}_2\text{O}$ phases contain HS-Fe^{3+} and CAN^{2-} , with magnetic ordering temperatures increasing ($5 \rightarrow 20\text{K}$) as the Fe–CAN connectivity increases. The SMOF and MOF show reversible (de)insertion of $>4\text{Li}/\text{f.u.}$ at average 2.59 V and 2.76 V vs Li/Li, respectively. $[\text{Fe}_2(\text{CAN})_3]$ achieves 146 mAh/g at 1C, thus specific energy (563 Wh/kg) and power (446 W/kg) in Li half-cells competitive with conventional LiFePO_4 ($\sim 580\text{ Wh/kg}$ and $\sim 450\text{ W/kg}$). Beyond Li, $[\text{Fe}_2(\text{CAN})_3]$ delivers 394 Wh/kg and 421 Wh/kg, for Na and K half-cells respectively, becoming a competitive cathode for sustainable batteries.



Referencias:

References

- [1] Abakumov, A. M.; Fedotov, S. S.; Antipov, E. V.; Tarascon, J. M. *Nat Commun* **2020**, *11*, 4976.
- [2] J. Wang, X. Liu, H. Jia, P. Apostol, X. Guo, F. Lucaccioni, X. Zhang, Q. Zhu, C. Morari, J. F. Gohy, A. Vlad, *ACS Energy Lett* **2022**, *7*, 668–674.
- [3] V. Durán-Egido, J. P. Darby, M. J. Cliffe, J. S. Garitaonandia, P. Grande-Fernández, A. J. Morris, J. Carretero-González, E. Castillo-Martínez. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, e202424416.



Uso de herramientas de Inteligencia Artificial para la optimización de procesos de tratamiento de muestras, para la identificación de agentes de guerra biológicos

García-Herrero, Clara A.¹, Gómez-Gómez, María Milagros² y Bermejo-Higuera, Javier³

¹Departamento de Defensa Nuclear, Biológica y Química. Departamento de Sistemas de Defensa NBQ. Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial “Esteban Terradas” (INTA). Ctra. M-301, Km 10. 28330, Madrid.

²Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Plaza Ciencias, 2, Ciudad Universitaria, 28040, Madrid

³Departamento de Sistemas TICS. Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial “Esteban Terradas” (INTA). Ctra. M-301, Km 10. 28330, Madrid.

claraa02@ucm.es

Palabras clave: IA, optimización, tratamiento de muestras.

Ante la creciente amenaza de posibles ataques terroristas con toxinas se ha generado la necesidad de desarrollar y validar procedimientos de detección e identificación de estos agentes [1]. El desarrollo de estos métodos permitiría una gestión rápida y eficaz de situaciones de crisis, minimizando el número de víctimas y el tiempo de resiliencia.

Una parte importante en la detección es la optimización del tratamiento de muestra previo a cualquier análisis. Tradicionalmente la optimización se realiza estudiando el efecto de un parámetro manteniendo constante el resto. Esta metodología no solo implica un gran número de ensayos, sino que, además, es incapaz de estudiar el efecto de la interacción entre parámetros [2].

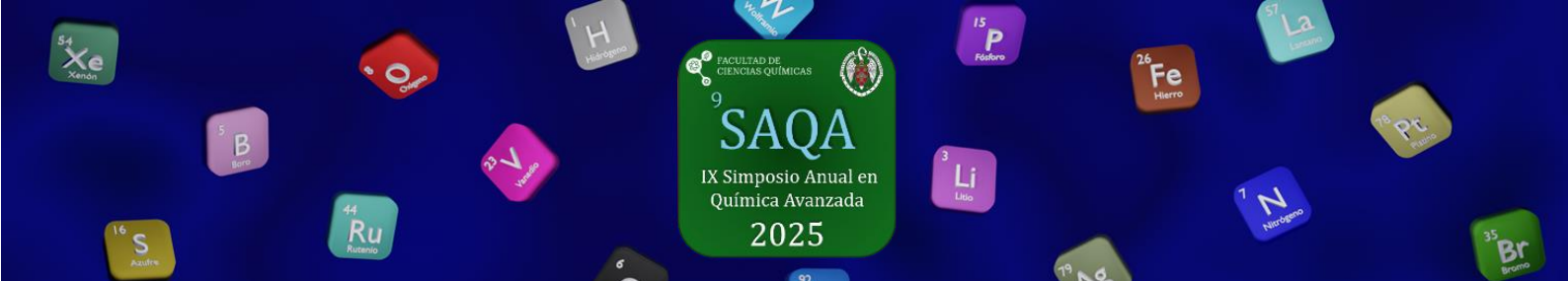
En este trabajo se presenta un protocolo utilizando el software libre R [3], que reduce el número de ensayos necesarios para optimizar el tratamiento de las muestras sin perder información y sin comprometer el resultado final [4].

Para este trabajo se ha tomado como modelo una matriz alimenticia (harina) contaminada con la micotoxina deoxinivalenol (DON) y su posterior identificación por HPLC-Q.

Se utilizó un protocolo de tratamiento de muestra basado en extracción de fase sólida dispersiva. Primero se estudió estadísticamente aquellos factores del protocolo que podían ser optimizados. Una vez seleccionados, se optimizaron mediante distintas técnicas estadísticas. Finalmente se comparó el resultado de la optimización con nuestro protocolo frente a los resultados obtenidos mediante software de pago [5], llegando a obtener resultados comparables.

Referencias:

- [1] Lopez-Muñoz F, Salas-Moreno P, Montero-Sanchez M, Suarez-Muñoz A, García-Crespín J, Díaz-Muñoz F, et al. Amenazas biológicas intencionadas: Implicaciones para la seguridad nacional. *Sanidad Militar*. **2021**, 77(2), 98–105.
- [2] Witek-Krowiak A, Chojnacka K, Podstawczyk D, Dawiec A, Pokomeda K. Application of response surface methodology and artificial neural network methods in modelling and optimization of biosorption process. *Bioresource technology*. **2014**, 160, 150–60.
- [3] R Core Team. R: A language and environment for statistical computing [Internet]. Vienna, Austria: R Foundation for Statistical Computing; **2018**.
- [4] Ferreira SLC, Bruns RE, Ferreira HS, Matos GD, David JM, Brandão GC, et al. Box-behnken design: An alternative for the optimization of analytical methods. *Analytica Chimica Acta*. **2007**, 597(2), 179–86.
- [5] Jia W, Chu X, Ling Y, Huang J, Chang J. Multi-mycotoxin analysis in dairy products by liquid chromatography coupled to quadrupole orbitrap mass spectrometry. *Journal of Chromatography A*. **2014**, 1345,107-114.



METODOLOGÍAS FOTÓNICAS AVANZADAS PARA EL ESTUDIO DEL PATRIMONIO CULTURAL TANGIBLE

Laura Maestro-Guijarro^{1,2}, Paula María Carmona-Quiroga³, Mohamed Oujja² y Marta Castillejo²

¹Dpto. Física Química, Facultad de Ciencias Químicas, UCM, Pl. de las Ciencias, 2, 28040 Madrid

²Dpto. Química Física de Materiales, Instituto de Química Física Blas Cabrera, CSIC, C/ Serrano 119, 28006 Madrid

³Dpto. Materiales, Instituto de Ciencias de la Construcción Eduardo Torroja, CSIC, C/ Serrano Galvache 4, 28033, Madrid

lmaestro@iqf.csic.es; laumaes@ucm.es

Palabras clave: Ciencia del Patrimonio, láseres, espectroscopías láser, microscopía óptica no lineal, espectroscopía Raman, limpieza láser, conservación y restauración del patrimonio cultural.

El Laboratorio Láser de Ciencia del Patrimonio (LLHS) del Instituto de Química Física Blas Cabrera se dedica al estudio y conservación de los materiales del patrimonio cultural tangible a través de la aplicación de metodologías y técnicas basadas en tecnologías láser. Debido a la dimensión histórica de estos materiales, el análisis y diagnóstico deben realizarse de forma no invasiva o, a lo sumo, micro-invasiva. Las principales líneas de trabajo que se desarrollan en el seno del grupo de investigación son:

- Análisis de materiales patrimoniales a través de las técnicas espectroscópicas de ruptura inducida por láser (LIBS), fluorescencia inducida por láser (LIF) y Raman. Se obtiene así información sobre la composición elemental y estructural de estos materiales. Estos resultados son útiles para conocer de qué material se trata, su estado de conservación, los cambios físico-químicos sufridos debido a su envejecimiento o degradación, para la ejecución de una futura restauración, etc.
- Investigación de las posibilidades de aplicación de la técnica de microscopía óptica no lineal (NLOM) en sus modalidades de fluorescencia por excitación multifotónica y de generación de segundo y tercer armónico, basada en la excitación con láser de femtosegundos, con resolución micrométrica tridimensional. Pese a su reciente utilización en el campo de la Ciencia del Patrimonio, esta técnica se muestra muy útil para la caracterización químico-estructural de forma no invasiva, tanto en superficie como en profundidad de sustratos multicapa y/o multicomponente característicos de los objetos patrimoniales.
- Desarrollo y aplicación de metodologías avanzadas de limpieza basadas en tecnología láser, las cuales permiten una mayor selectividad y control que los métodos tradicionales para la eliminación de capas de suciedad o deterioro sin afectar el material subyacente.

Un ejemplo del empleo de estas técnicas ha sido el estudio y caracterización de un conjunto de objetos de adorno personal pertenecientes a la colección arqueológica del Museo Provincial de Teruel (Aragón, España). Los objetos fueron analizados mediante las técnicas LIBS, μ -Raman y fluorescencia de rayos X (XRF), determinando la composición orgánica e inorgánica de los materiales constituyentes, como coral rojo, azabache o ágata, desconocidos hasta el momento de la realización de los análisis.

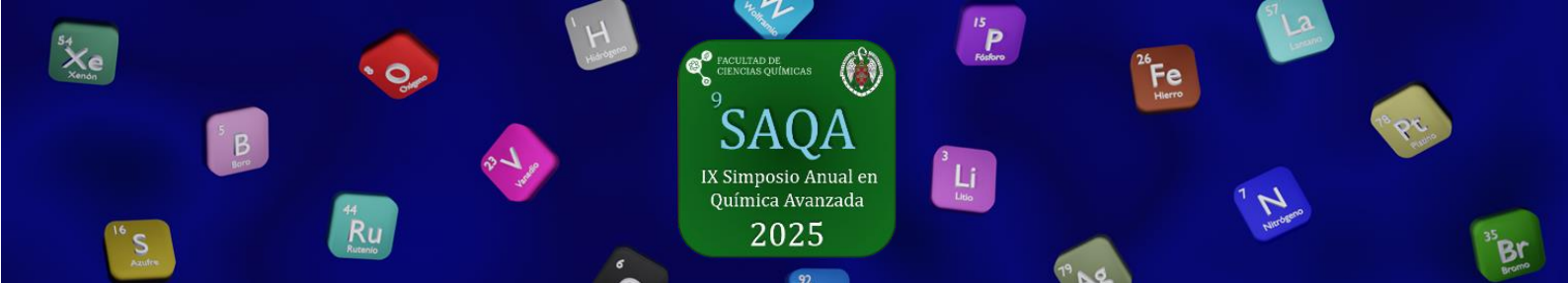
Referencias:

- [1] Maestro-Guijarro, L., et al. Authentication of glass beads from Cultural Heritage: An interdisciplinary and multi-analytical approach. *Talanta*. **2025**, 286, 127510.
- [2] Quintero Balbás, D., et al. Non-invasive stratigraphic analyzes of gelatine-based modern painting materials with linear and nonlinear optical methods. *J. Phys. Photonics*. **2024**, 6, 035018.

CUARTA SESIÓN

15 de julio de 2025

12:00 – 13:30



Compuestos PIRAZOL PIRIDIL E ISOQUINOLINIL sustituidos, base de construcción de materiales bifuncionales mesomórficos y luminiscentes.

Rosario Criado García, Cristián Cuerva de Alaíz, Mercedes Cano Esquivel

Departamento de Química Inorgánica I, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Ciudad Universitaria, 28040, Madrid

rcriado@ucm.es

Palabras clave: pirazol, cristal líquido, mesofase, luminiscencia, materiales bifuncionales.

Se describe una nueva serie de compuestos iónicos conteniendo el dicatión $[\text{HpZ}^{\text{H3NpyR}(14)}]^{2+}$ relacionado al precursor pirazol $\text{HpZ}^{\text{3NpyR}(14)}$ (Fig. 1.a) portador de cadenas extensas, y estratégicamente seleccionado. La presencia de sustituyentes piridina y/o isoquinilina se postulan como grupos idóneos para ser fácilmente protonados, así como también el grupo base pirazol. Ambos efectos generan una doble carga en el catión. Las nuevas sales derivadas de estos cationes fueron aisladas con distintos contraiones (Cl^- , BF_4^- , PF_6^- , SbF_6^- , PdCl_4^{2-} , PtCl_4^{2-}). Todas las sales exhibieron comportamiento LC, a excepción de la que contiene PdCl_4^{2-} , mostrando mesofases esméctico A en un amplio rango de temperatura (Fig.2). Adicionalmente presentan **emisión luminiscente** bajo exposición a la radiación UV de $\lambda = 365 \text{ nm}$, determinando así su carácter **bifuncional**. En un segundo aspecto se ha probado la utilidad del pirazol (g.1.a) como dopante de materiales poliméricos para sensores de medios ácidos. Se ha analizado también el efecto de la introducción de nuevas variantes sobre el grupo pirazol, como son la presencia de 2N-piridina, 3N-piridina y 2N-isoquinilina (Fig. 1.b, c, d), así como simultáneamente la duplicidad de cadenas extensas en la formación y optimización de las propiedades de nuevas sales iónicas. La naturaleza dicatenar en estos casos, conlleva a cationes monovalentes cuyas sales iónicas conteniendo Cl^- como contraión, presentan de nuevo naturaleza bifuncional.

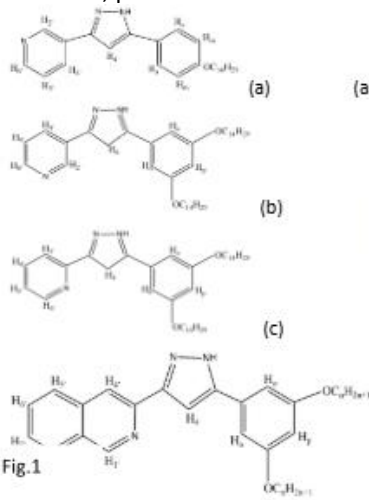
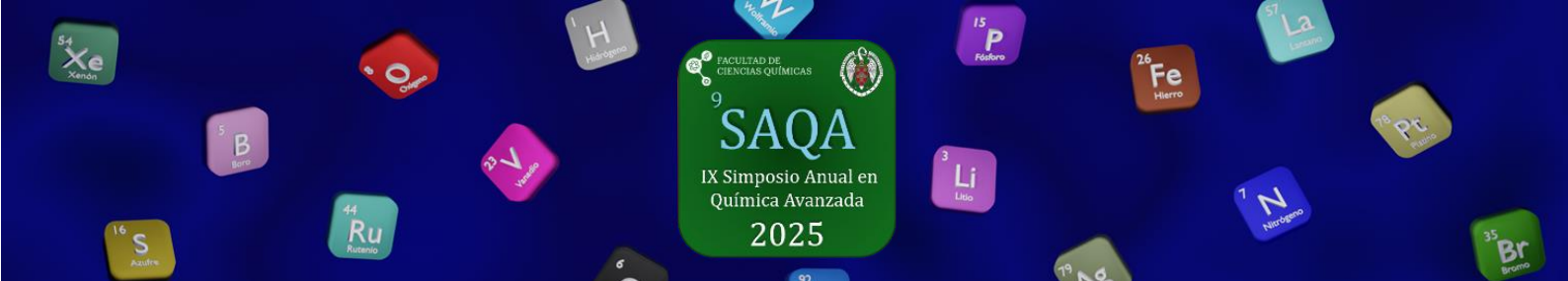


Fig.2 (a) $(\text{H}_2\text{pz}^{\text{R}(14)\text{Hpy}})\text{Cl}_2$ a 191 °C en el calentamiento. (b) $(\text{H}_2\text{pz}^{\text{R}(14)\text{Hpy}})(\text{BF}_4)_2$ at 196 °C en el enfriamiento.

References:

[1] Martínez-Cebeiro, C.; Torralba, M.C.; Duarte, F.; Herrero, S.; Cano, M.; Lodeiro, C.; Cuerva C. Mesomorphism and luminiscence in coordination compounds and ionic salts based on pyridine-functionalized \square -diketone. Influence of the pyridine nitrogen position. *J. Molecular Liquids*. **2022**, 385 (223) 122290.

[2] Criado R., Duarte F., Caro I., Cano M., Herrero S., Lodeiro C., Cuerva C. Ionic liquid crystals containing pyridinium and pyrazolium units: mesomorphism and acidochromic behaviors. *Dyes and Pigments*. **2025** (en revisión).



ESTRATEGIAS ANALÍTICAS PARA LA VALORIZACIÓN DE RESIDUOS AGROALIMENTARIOS: OBTENCIÓN DE COMPUESTOS BIOACTIVOS

Sandra Rodríguez-Blázquez, Esther Gómez-Mejía y Noelia Rosales-Conrado

Departamento de Química analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias 2, 28040, Madrid

sandro08@ucm.es

Palabras clave: *residuos agroalimentarios, compuestos bioactivos, propiedades bioactivas, sostenibilidad, economía circular*

En las últimas décadas, el incesante crecimiento de la población en todo el mundo ha desencadenado un aumento de la demanda y elaboración de productos alimenticios, que ha desembocado en la generación de **millones de toneladas de residuos agroalimentarios** al año en todo el mundo. Concretamente, datos de la Organización de las Naciones Unidas para la Alimentación y Agricultura (FAO) indican que durante el pasado año 2024 se generaron, en algún punto de la cadena de suministro, 1.300 millones de toneladas de residuos agroalimentarios que equivale a una **pérdida de 800.000 millones de euros** [1]. Entre los principales residuos derivados del procesamiento de frutas y vegetales, destacan los **biorresiduos de endrinas y cítricos**, los **sarmientos de vid** y los **erizos de castaña**.

Ante esta situación, el Objetivo de Desarrollo Sostenible nº 12 de la Agenda 2030 promueve la reducción de residuos mediante su prevención, reciclaje y reutilización. Una solución clave es su **valorización**, que permite recuperar **compuestos bioactivos** con propiedades antioxidantes, antiinflamatorias y anticancerígenas, entre otras, y que son beneficiosos para la salud. Por esta razón, resultan de gran interés para las industrias farmacéutica, cosmética y alimentaria. Además, debido a la dificultad y coste de su síntesis química, el **desarrollo de métodos analíticos sostenibles**, en línea con la química verde, que permitan su extracción, caracterización y aprovechamiento industrial resulta de especial interés [2].

Por todo ello, en la presente Tesis Doctoral, se han implementado **metodologías analíticas novedosas sostenibles** para la **obtención y caracterización de compuestos bioactivos** (tocoferoles, ácidos grasos, β -carotenos, polifenoles y antocianinas) **a partir de residuos agroalimentarios**. Así, una vez realizada la caracterización fisicoquímica de los residuos, se han diseñado métodos de extracción sostenibles que combinan el uso de disolventes “verdes” de bajo impacto medioambiental con técnicas de extracción sencillas y potencial escalabilidad a nivel industrial. Los sistemas de extracción se han desarrollado para la obtención de aceites ricos en ácidos grasos saludables, tocoferoles y β -carotenos; y extractos hidrófilos enriquecidos en polifenoles y antocianinas. Posteriormente, se han desarrollado y optimizado métodos cromatográficos (HPLC-DAD-MS; HPLC-DAD; GC-MS) y espectrofotométricos (UV-Vis) para evaluar la composición de los extractos obtenidos. Finalmente, se han determinado las **propiedades bioactivas** (antimicrobiana; antioxidante; antihipertensiva; neuroprotectora) de los extractos, que se han correlacionado con su composición química mediante análisis quimiométrico. Además, con el propósito de incentivar la aplicación industrial de las metodologías desarrolladas de extracción, se ha evaluado el impacto ambiental de cada una de ellas mediante el uso de herramientas métricas sostenibles (AGREEprep).

Referencias:

- [1] Sarker, A.; Ahmed, R.; Ahsan, S. M.; Rana, J.; Ghosh, M. K.; Nandi, R. A comprehensive review of food waste valorization for the sustainable management of global food waste. *Sustain. Food Technol.* **2024**, *2*(1), 48-69.
- [2] Rodríguez-Blázquez, S.; Pedrera-Cajas, L.; Gómez-Mejía, E.; Vicente-Zurdo, D.; Rosales-Conrado, N.; León-González, M.E.; Rodríguez-Bencomo, J.J.; Miranda, R. The Potential of Plum Seed Residue: Unraveling the Effect of Processing on Phytochemical Composition and Bioactive Properties. *Int. J. Mol. Sci.* **2024**, *25*, 1236.

MOLECULAR PHOTODISSOCIATION AND QUANTUM CONTROL OF CHEMICAL PROCESSES WITH FEMTOSECOND LASER PULSES

Ignacio M. Casasús¹, L. Bañares^{1,2}

¹Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias 2, 28040, Madrid

²Instituto Madrileño de Estudios Avanzados IMDEA-Nanoscience, Calle Faraday 9, 28049, Madrid

igmart06@ucm.es

Keywords: laser, femtochemistry, photodissociation, quantum control

When a quantum system interacts with light, it can undergo a variety of transformations: molecules may dissociate, charges can relocate between functional groups, or atomic geometries can reorganize. *Femtochemistry* is the field that investigates these ultrafast chemical reactions, taking place within tens to hundreds of femtoseconds ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$) after light absorption. To resolve such rapid processes, femtosecond laser pulses—comparable in duration to the dynamics themselves—are employed.

Beyond simply observing these transformations, a major goal of femtochemistry is to *control* them. By shaping the properties of laser pulses—such as their intensity, energy or duration—it becomes possible to manipulate molecular dynamics in real time. This approach, known as *quantum control*, leverages coherent light-matter interaction to modify chemical outcomes [1-2].

In this contribution, I will present our experimental efforts to observe and control the photodissociation of gas-phase molecules. Using a pump-probe scheme, a first laser pulse initiates the bond-breaking process, while a delayed probe pulse tracks the resulting molecular fragments. We aim to introduce a third pulse—the *control* pulse—to actively influence the dissociation pathway. This control field can accelerate or delay the dynamics, shift product distributions, or even open new dissociation channels, offering a powerful tool for controlling chemical reactivity at the quantum level.

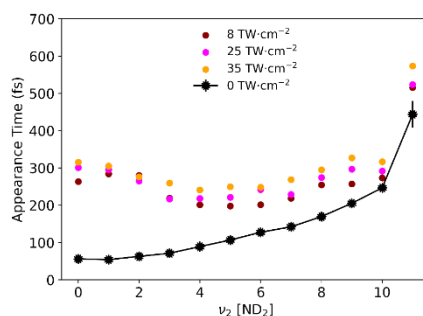


Figure 1 – Modification of the appearance times of atomic D after breakage ND_3 into $\text{ND}_2 + \text{D}$. It can be observed that the inclusion of high intensities of a NIR control pulse delays the cleavage process, making it slower with increasing field strength.

Referencias:

- [1] Benjamin J. Sussman *et al.*, Dynamic Stark Control of Photochemical Processes. *Science* (2006) 314, 278-281.
- [2]. Corrales, M. *et al.*, Control of ultrafast molecular photodissociation by laser-field-induced potentials. *Nature Chem* (2014) 6, 785–790.



Optimización y estudio mecanístico del SnS preparado por síntesis hidrotermal asistida por microondas como electrodo en baterías de ion potasio

Marta María González-Barríos¹, Elena García-Chamocho¹, José Javier Saiz Garitaonandia², Elizabeth Castillo-Martínez², David Ávila-Brandé¹, Jesús Prado-Gonjal¹

¹Departamento de Química Inorgánica, Facultad Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Pl. de las Ciencias 2, 28040, Madrid, España.

²Fisika Saila, Euskal Herriko Unibersitatea UPV/EHU, Barrio Sarriena s/n, 48940 Leioa, España.

martam57@ucm.es

Palabras clave: Baterías de ion potasio, SnS, composite, síntesis hidrotermal asistida por microondas, difracción de rayos X *in operando*, difracción de rayos X *ex situ*, espectroscopía Mössbauer.

Actualmente, las baterías de ion litio dominan el mercado energético, sin embargo, su uso intensivo presenta desafíos debido a la baja abundancia del litio (0.0017%), su distribución geográfica desigual y los elevados costes asociados a su extracción. [1] En este contexto, las baterías de ion potasio surgen como una alternativa prometedora gracias a la mayor abundancia de este metal (1.5%), su menor coste y un potencial de reducción comparable al del litio (-3.04 V Li⁺/Li y -2.93 K⁺/K vs. ENH). [2] A pesar de que el desarrollo de ánodos eficientes continúe siendo un reto en baterías de ion potasio, el sulfuro de estaño (SnS) destaca como un potencial candidato por su mecanismo combinado de conversión y aleación, que permite alcanzar altas capacidades teóricas.

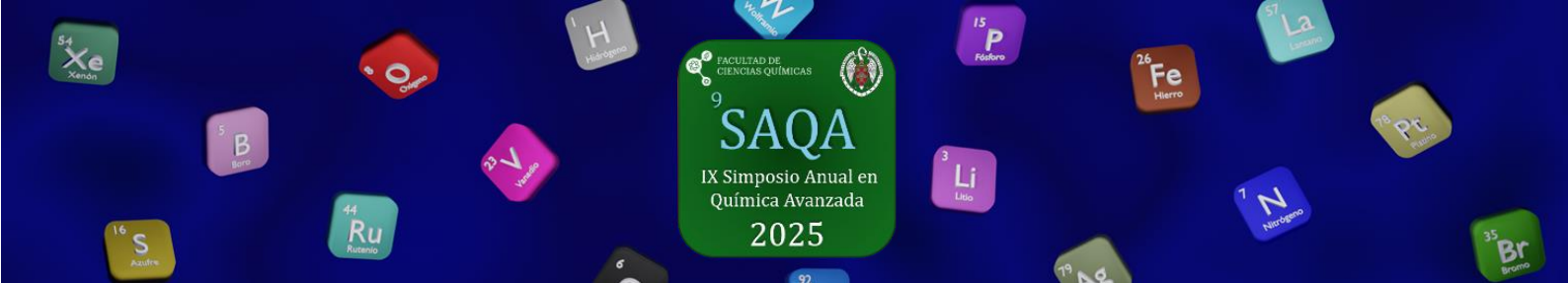
En esta comunicación se presenta la síntesis hidrotermal asistida por microondas como una ruta alternativa para la preparación de SnS a diferentes tiempos de irradiación microondas. El hecho de disminuir el tiempo de síntesis produce una evolución significativa en la morfología del material, pasando de láminas micrométricas (tras 2 horas de irradiación) a aglomerados granulares (tras solo 1 minuto). Asimismo, en los materiales sintetizados en 1 minuto se ha observado por difracción de electrones la aparición de una superestructura que no ha sido detectable en los materiales obtenidos en 2 horas.

Con el fin de estudiar las prestaciones de dichos materiales como electrodos en baterías de ion potasio, se prepararon composites incorporando diferentes proporciones de C65 y grafeno en pocas capas al SnS sintetizado en 1 minuto y 2 horas de reacción. Las mejores prestaciones se obtuvieron con el composite preparado en 1 minuto con un 24% de C65 y 1% de grafeno en pocas capas, alcanzando una capacidad reversible de 285 mAh/g a C/20. Además, se llevó a cabo un estudio del mecanismo de almacenamiento de iones potasio mediante difracción de rayos X *in operando*, donde se observaba la disminución de las reflexiones del SnS y la posible formación de estaño metálico con grupo espacial *Im3m*, cuya aparición ha sido predicha en condiciones de alta presión. Por otro lado, se realizaron análisis *ex situ* de difracción de rayos X, identificándose además la fase cristalina de α -Sn. Estos resultados constituyen una evidencia sólida de un mecanismo de reacción por conversión, confirmada mediante espectroscopía Mössbauer de ¹¹⁹Sn *ex situ*.

Referencias:

[1] Kubota, K., et al. Towards K-ion and Na-ion batteries as “beyond Li-ion”. *Chem. Rec.*, **2018**, 18 (4), 459-479.

[2] Zhang, W., Liu, Y., & Guo, Z. Approaching high-performance potassium-ion batteries via advanced design strategies and engineering. *Sci. Adv.*, **2019**, 5 (5), 7412-7422



PREDICCIÓN DE CONCENTRACIONES DE SATURACIÓN DE CONDENSADOS DE PROTEÍNAS MEDIANTE SIMULACIÓN MOLECULAR

Eduardo Pedraza¹, Andrés R. Tejedor^{2,1}, Alejandro Feito¹, Francisco Gámez¹, Rosana Collepardo-Guevara², Eduardo Sanz¹, Jorge R. Espinosa¹

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

²Yusuf Hamied Department of Chemistry, University of Cambridge, Lensfield Road, CB2 1EW, Cambridge, UK

epedra02@ucm.es

Palabras clave: Condensados biomoleculares, proteínas, dinámica molecular, integración termodinámica

La compartimentalización intracelular permite a las células organizar sus componentes para llevar a cabo diversas funciones biológicas. Además de los orgánulos con membrana, existen orgánulos sin membrana conocidos como condensados biomoleculares [1]. Estos se forman principalmente por proteínas y ácidos nucleicos a través de separación de fases líquido-líquido (LLPS) [1,2]. Este proceso de LLPS ha despertado un gran interés en diferentes áreas debido a que las alteraciones en la formación y disolución de los condensados se han visto relacionadas con múltiples enfermedades neurodegenerativas [3]. Factores como mutaciones y modificaciones postraduccionales [4] regulan su transición entre estados líquido y sólido. En los últimos años, las simulaciones moleculares se han convertido en una herramienta clave para estudiar tanto la LLPS como alteraciones en las propiedades viscoelásticas de biocondensados. Gracias a modelos de grano grueso con resolución a nivel de residuo [5], varias propiedades físico-químicas de los condensados pueden ser determinadas. En este trabajo presentamos nuevos métodos computacionales [6] para determinar de forma eficiente y precisa concentraciones umbral de proteínas (concentración de saturación) a partir de las cuales ocurre la condensación en la LLPS. Esta concentración de saturación, es un parámetro clave que indica la formación de condensados biomoleculares, por lo que su determinación resulta fundamental. Mientras que la medida experimental de dicho parámetro es posible con relativa sencillez, hasta ahora su determinación de forma computacional era un reto dada su baja magnitud. Nuestros métodos ofrecen un enfoque robusto y fundamentado para mejorar y validar modelos a partir de las concentraciones de saturación, cerrando la brecha existente entre la simulación y los experimentos.

Referencias:

- [1] S. F. Banani, H. O. Lee, A. A. Hyman, and M. K. Rosen. Biomolecular condensates: Organizers of cellular biochemistry. *Nat. Rev. Mol. Cell Biol.* (2017), 18, pp. 285-298.
- [2] S. Alberti, A. Gladfelter, and T. Mittag. Considerations and challenges in studying liquid-liquid phase separation and biomolecular condensates. *Cell.* (2019), 176, pp. 419-434.
- [3] B. Portz, B. L. Lee, and J. Shorter. FUS and TDP-43 phases in health and disease. *Trends Biochem. Sci.* (2021), 46, pp. 550-563.
- [4] A. Patel, H. O. Lee, L. Jawerth, S. Maharana, M. Jahnel, M. Y. Hein, S. Stoykov, J. Mahamid, S. Saha, T. M. Franzmann, et al. A liquid-to-solid phase transition of the ALS protein FUS accelerated by disease mutation. *Cell.* (2015), 162, pp. 1066-1077.
- [5] A. R. Tejedor, A. Aguirre Gonzalez, M. J. Maristany, P. Y. Chew, K. Russell, J. Ramirez, J. R. Espinosa, and R. Collepardo-Guevara, Chemically Informed Coarse-Graining of Electrostatic Forces in Charge-Rich Biomolecular Condensates. *ACS Cent. Sci.* (2025), 11, pp. 302-321.
- [6] E. Pedraza, A. R. Tejedor, A. Feito, F. Gámez, R. Collepardo-Guevara, E. Sanz, and J. R. Espinosa. Predicting Saturation Concentrations of Phase-Separating Proteins via Thermodynamic Integration. *bioRxiv.* (2025), doi: 10.1101/2025.05.09.653068.



IX SIMPOSIO ANUAL EN QUÍMICA AVANZADA



FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS

Libro de resúmenes

14 y 15 de julio de 2025

