

FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

VIII

Simposio Anual en Química Avanzada

LIBRO DE RESÚMENES

18 de julio de 2023

UNIVERSIDAD COMPLUTENSE DE MADRID

Organizadores:

Departamento de Química Analítica

Cristina Muñoz San Martín

Departamento de Química Inorgánica

Elena García Chamocho
Marta María González Barrios

Departamento de Química Física

Alfredo Casanovas Melián

Departamento de Ingeniería Química y de Materiales

Esther López Martínez

Patrocinadores:



**Madrid UCM
Student Chapter**

ÍNDICE

Programa	2
----------	---

Resúmenes	
-----------	--

Charlas invitadas

Sánchez Ahijón, Elena	<i>elena.sanchez@imdea.org</i>	4
Valverde de la Fuente, Alejandro	<i>alejaval@ucm.es</i>	5

Departamento de Química Analítica

Cárdenas Escudero, Jafet	<i>jafetcar@ucm.es</i>	6
Expósito Suárez, Víctor Manuel	<i>victorex@ucm.es</i>	7
Fernández Bautista, Tamara	<i>tamarf02@ucm.es</i>	8
Guadaño Sánchez, Miriam	<i>miriguad@ucm.es</i>	9
Jiménez Amezcua, Ignacio	<i>ignjim03@ucm.es</i>	10
Tejerina Miranda, Sandra	<i>sandrate@ucm.es</i>	11

Departamento de Química Inorgánica

Coloma Manjón-Cabeza, Isabel	<i>iscoloma@ucm.es</i>	12
García Chamocho, Elena	<i>elegar21@ucm.es</i>	13
Giraldo García, David Agustín	<i>dgiraldo@ucm.es</i>	14

Departamento de Química Física

Cachón Ortiz, Javier	<i>jacachon@ucm.es</i>	15
Carbone, Carlo	<i>carlcarb@ucm.es</i>	16
Martínez Weinbaum, Marina Gabriela	<i>marinagm@ucm.es</i>	17

Departamento de Ingeniería Química y de Materiales

Lambrecht, Mickaël	<i>milambre@ucm.es</i>	18
López Martínez, Esther	<i>eslope03@ucm.es</i>	19
Marín Sánchez, Miguel	<i>migumari@ucm.es</i>	20

PROGRAMA

Lugar: Salón de Actos – Edificio QD (Biblioteca) de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid

9:00 - 9:50	REGISTRO Recogida de acreditaciones
9:50 - 10:00	APERTURA Albertina Cabañas Poveda
	Moderadores: Cristina Muñoz San Martín y Alfredo Casanovas Melián
10:00 - 10:30	CHARLA INVITADA: El Doctorado: el principio del camino Alejandro Valverde (UCM)
10:30 - 10:45	Metodologías multianalíticas avanzadas para el aseguramiento de la calidad y revalorización de complementos alimenticios de origen vegetal Ignacio Jiménez Amezcua
10:45 - 11:00	Análisis y aplicación de las series radiactivas naturales para la resolución de problemas medioambientales Víctor Manuel Expósito Suárez
11:00 - 11:15	Redes cristalinas metal-orgánicas (MOFs): potencial aplicación como electrodos de baterías de ion litio Elena García Chamocho
11:15 - 12:15	PAUSA - CAFÉ // Cafetería de la Facultad de Ciencias Físicas
	Moderadores: Elena García Chamocho y Marta M. González Barrios
12:15 - 12:30	Protección activa de aleaciones de aluminio Esther López
12:30 - 12:45	Microscopía y espectroscopía láser para el estudio de materiales del patrimonio cultural Marina Martínez Weinbaum
12:45 - 13:00	Método FTIR-ATR para la detección de adulterantes emergentes derivados de plantas c3 en miel: jarabes de remolacha, dátiles y algarroba Jafet Cárdenas Escudero
13:00 - 13:15	Fotodisociación de moléculas poliatómicas mediante el uso de láseres de nanosegundos pulsados Javier Cachón
13:15 - 13:30	Diseño y desarrollo de sistemas de liberación de fármacos basados en compuestos de dirrutenio Isabel Coloma
13:30 - 13:45	Análisis ex situ de α-MnO₂ como electrodo en baterías de aluminio ion David A. Giraldo
13:45 - 14:00	Immunoplateforma electroquímica para determinar dos glicoproteínas epiteliales relacionadas con el pronóstico del cáncer colorectal Sandra Tejerina Miranda

PROGRAMA

Lugar: Salón de Actos – Edificio QD (Biblioteca) de la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid

14:00 – 15:30	PAUSA - ALMUERZO // Cafetería de la Facultad de Matemáticas
	Moderadores: <i>Esther López Martínez y Alfredo Casanovas Melián</i>
15:30 – 16:00	CHARLA INVITADA: ¿Cansados de las baterías de ion litio? Sujétame el cubata <i>Elena Sánchez Ahijón (IMDEA)</i>
16:00 – 16:15	Pretratamientos superficiales de aleaciones de titanio para uniones adhesivas estructurales de estructuras aeroespaciales híbridas Ti₆Al₄V / CFRC <i>Miguel Marín</i>
16:15 – 16:30	Determinación de especies de Se y Hg e identificación de partículas de HgSe en pescados y productos derivados mediante HPLC-ICP-MSy spICP-MS <i>Tamara Fernández Bautista</i>
16:30 – 16:45	Reología interfacial de monocapas de nanosuspensiones, tensioactivos y polímeros <i>Carlo Carbone</i>
16:45 – 17:00	Fluidos y aleaciones de alta temperatura, hacia una nueva generación de plantas termo-solares <i>Mickaël Lambrecht</i>
17:00 – 17:15	Rápida y sencilla síntesis de polímeros de impronta molecular de tipo core-shell con carácter magnético, mediante inducción de microondas <i>Miriam Guadaño Sánchez</i>
17:15 – 17:30	CLAUSURA <i>Ángel Gutiérrez Alonso</i>

¿CANSADO DE LAS BATERÍAS DE ION LITIO? SUJÉTAME EL CUBATA

Elena Sánchez-Ahijón¹

¹IMDEA Materiales, Tecnogetafe, Calle Eric Kandel, 2, 28906 Getafe, Madrid, España
elena.sanchez@imdea.org

Las baterías de ion litio (LIBs) son hoy en día los dispositivos predilectos de almacenamiento de energía. Sin embargo, su incorporación en aplicaciones de alta demanda energética junto con la urgencia de disminuir el uso de los combustibles fósiles, hace que se requiera una mayor eficiencia energética. Los materiales de aleación como el silicio pueden proporcionar esta mayor capacidad energética a las LIBs al no tener las limitaciones de los materiales de inserción que disponen de sitios limitados para los iones Li^+ en su estructura. El Silicio es un ánodo prometedor por su alta capacidad teórica (3579 mAh/g) comparada con el grafito utilizado actualmente en las baterías (372 mAh/g).^[1] Sin embargo, el desarrollo de este material se ve impedido por su pérdida de capacidad durante el proceso de carga y descarga de la batería, causada por una gran expansión volumétrica del material, inestabilidad de la interfase con el electrolito líquido y otras reacciones adversas. Aunque algunos autores ya han sugerido soluciones a estos problemas (adición de recubrimientos, aglutinantes, mezclas con grafito, etc.)^[2], la integración del Si con electrolitos sólidos está dando buenos resultados últimamente por mejorar aspectos como la estabilidad de la interfase electrodo/electrolito. De acuerdo con esto, un mejor conocimiento de la aleación es necesaria para el desarrollo del silicio y otros materiales similares como ánodo para LIBs. Además, su estudio en baterías de estado sólido (ASSBs) completaría la información ya disponible además de añadir ciertas ventajas sobre los electrolitos líquidos.

De este modo, un ánodo seco de nanohilos de silicio (SiNWs) puros producidos en fase gas (FCCVD)^[3] ha sido estudiado sin aditivos ni recubrimientos de carbono conductor integrado con un electrolito sólido basado en sulfuro. Las propiedades electroquímicas del electrodo de SiNWs se estudiaron en medias celdas mediante ciclado galvanostático, voltamperometría de barrido lineal e impedancia compleja para esclarecer la propagación de la aleación en el electrodo seco. Además, los cambios morfológicos del electrodo durante y después de la reacción de aleación han sido monitorizados mediante imágenes transversales tomadas con microscopía electrónica de barrido. Esta comunicación no solo pretende introducir un novedoso ánodo de silicio, si no que también pretende proporcionar nuevas ideas sobre lo que queda aún por estudiar en las LIBs y alentar nuevos estudios de materiales de aleación para ASSBs.

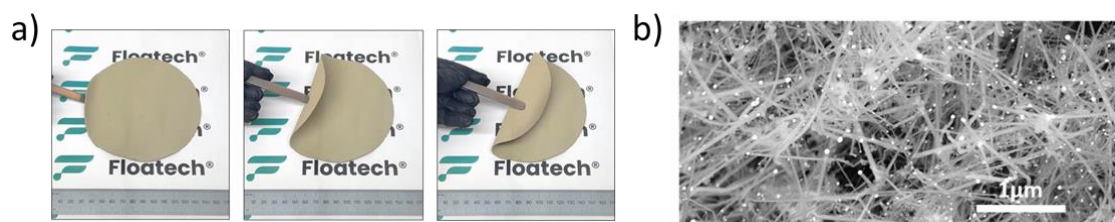


Figura 1. a) Foto del ánodo de silicio tal cual se extrae del reactor y b) imagen de SEM de la superficie del ánodo donde se aprecian los SiNWs.^[3]

Referencias

- [1] M. T. McDowell, S. W. Lee, W. D. Nix, Y. Cui. *Adv. Mater.* **2013**, 25(36), 4966-4985.
- [2] K. Feng, M. Li, W. Liu et al. *Small.* **2018**, 14(8), 1702737.
- [3] M. Rana, A. Pendashteh, R. Schäufele, J. Gispert, J. J. Vilatela. *Adv Energy Mater.* **2022**. 12(26), 2103469.

EL DOCTORADO: EL PRINCIPIO DEL CAMINO

Alejandro Valverde¹

¹Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avda. Complutense s/n 28040-Madrid, España
alejaval@ucm.es

“La descentralización del sistema sanitario a laboratorios clínicos, centros de atención primaria, ambulatorios o incluso el hogar del paciente, resulta imprescindible para seguir avanzando en el diagnóstico eficaz y tratamiento de las enfermedades prevalentes, con el objetivo de aplicar la acción terapéutica en el menor tiempo posible y que esta no se vea ralentizada cuando se produce el colapso de las instituciones sanitarias centrales. Este hecho implica disponer de métodos sensibles, cuantitativos, precisos, rápidos, asequibles, fáciles de usar y mínimamente invasivos para un diagnóstico fiable y descentralizado que pueda ser implementado incluso en entornos de bajos recursos, retos en los que la tecnología de biosensores electroquímicos puede contribuir de manera satisfactoria.

En esta Tesis Doctoral se demuestran y discuten críticamente, apoyándose en los conocimientos y resultados derivados de las investigaciones realizadas, las oportunidades que ofrecen los biosensores electroquímicos para el diagnóstico y estadificación fiables de enfermedades prevalentes como el cáncer o los trastornos neurodegenerativos. Los resultados alcanzados convierten a las bioplataformas desarrolladas en herramientas atractivas y prometedoras para su uso rutinario en entornos de hospitalización o descentralizados, con el propósito de progresar hacia una medicina personalizada accesible para todos que mejore las estadísticas clínicas y la calidad de vida de los pacientes, además de aliviar tanto la carga financiera que soportan los sistemas sanitarios como la presión económica y moral que recae sobre las familias de los pacientes.”

Estos dos párrafos resumen el enfoque y las líneas de investigación seguidas durante la realización de mi Tesis Doctoral [1] en el Programa de Doctorado en Química Avanzada de la Universidad Complutense de Madrid. En esta presentación se abordarán los principales retos y desafíos encontrados en el diseño, preparación y aplicación con muestras reales de bioplataformas electroquímicas novedosas capaces de contribuir al diagnóstico rápido y fiable de enfermedades tan importantes para la sociedad actual como son el cáncer colorrectal y de la enfermedad de Alzheimer. Las estrategias desarrolladas presentan grandes ventajas con respecto a las metodologías actuales de diagnóstico en términos de simplicidad, coste, rapidez, análisis multiplexado y carácter descentralizado; lo cual favorecerá su implementación tanto en el punto de atención clínico como en entornos de bajos recursos.

Además, durante la presentación también se expondrán las oportunidades tanto a nivel profesional como personal que ofrece el Programa de Doctorado: estancias predoctorales, asistencia y participación en congresos y reuniones científicas, actividades de divulgación científica, talleres y seminarios, etc. Todo ello para conseguir unas competencias inter y pluridisciplinarias únicas que supondrán el complemento perfecto para la formación de los futuros Doctores del Programa de Doctorado, ya que esta etapa tan solo marca el principio de vuestro camino como investigadores.

Referencias

- [1] **Tesis Doctoral Alejandro Valverde De la Fuente.** Herramientas de diagnóstico rápido basadas en el empleo de plataformas bioelectroanalíticas aplicables a entornos de bajos recursos (Universidad Complutense de Madrid).

MÉTODO FTIR-ATR PARA LA DETECCIÓN DE ADULTERANTES EMERGENTES DERIVADOS DE PLANTAS C3 EN MIEL: JARABES DE REMOLACHA, DÁTILES Y ALGARROBA

J. Cárdenas-Escudero¹, D. Galán-Madruga², J.O. Cáceres¹

¹Grupo de Investigación de Química Láser, Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Plaza de Ciencias 1, 28040 Madrid, España.

²Centro Nacional de Sanidad Ambiental, Instituto de Salud Carlos III, Ctra. Majadahonda-Pozuelo km 2.2, 28220 Majadahonda, Madrid, España

jafetcar@ucm.es

En la reciente acción coordinada de la Unión Europea con el Centro Común de Investigación para determinar ciertas prácticas fraudulentas en el sector de la miel, se ha indicado que el 74% de las muestras analizadas, importadas de China, y el 93% de las muestras analizadas, importadas de Turquía, los dos mayores productores de miel del mundo, presentaban al menos un indicador de azúcar exógeno o sospecha de estar adulteradas[1]. Esta situación ha puesto de manifiesto el estado crítico del problema de la adulteración de la miel en todo el mundo y la necesidad de desarrollar técnicas analíticas para su detección. Aunque la adulteración de la miel se realiza de forma general con jarabes azucarados derivados de plantas C4, estudios recientes han indicado el uso emergente de jarabes derivados de plantas C3 para la adulteración de la miel[2]. Este trabajo consiste en el desarrollo de un método rápido, sencillo y económico basado en la técnica de espectroscopia infrarroja por transformada de Fourier, con reflectancia total atenuada, para la determinación cualitativa, cuantitativa y simultánea de jarabes de remolacha, dátiles y algarroba, derivados de plantas C3; cuya bibliografía disponible es muy escasa y analíticamente poco concluyente para su uso por las autoridades. El método se ha basado en el establecimiento de las diferencias espectrales entre la miel y los mencionados jarabes en ocho puntos distintos de la región espectral comprendida entre 1200-900 cm⁻¹ del infrarrojo medio, característica de los modos vibracionales de los azúcares en la miel, lo que permite la pre-discriminación de la presencia o ausencia de los jarabes estudiados, y su posterior cuantificación, con niveles de precisión inferiores al 2,0% de desviación estándar relativa y errores relativos inferiores al 2,0% (m/m).

Referencias

- [1] T. Ždiniaková *et al.*, *EU coordinated action to deter certain fraudulent practices in the honey sector: analytical testing results of imported honey*. Publications Office of the European Union, 2023.
- [2] J. Cárdenas-Escudero, D. Galán-Madruga, and J. O. Cáceres, "Rapid, reliable and easy-to-perform chemometric-less method for rice syrup adulterated honey detection using FTIR-ATR," *Talanta*, vol. 253, p. 123961, 2023/02/01/ 2023, doi: <https://doi.org/10.1016/j.talanta.2022.123961>.

ANÁLISIS Y APLICACIÓN DE LAS SERIES RADIATIVAS NATURALES PARA LA RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS MEDIOAMBIENTALES

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

¹Unidad de Radiactividad Ambiental y Vigilancia Radiológica, Dpto. Medio Ambiente, CIEMAT,
Avda. Complutense, 40, 28040, Madrid, España

²Dpto. Química Analítica, Fac. Ciencias Químicas, UCM, Avda. Complutense s/n, 28040, Madrid, España
victorex@ucm.es, VictorManuel.Exposito@ciemat.es

El impacto de las actividades humanas sobre el medio ambiente es un tema de interés en la sociedad actual. Esta tesis se centra principalmente en el impacto de las actividades mineras. La extracción del mineral de interés puede venir acompañada de altas concentraciones de radionucleidos naturales, los cuales quedan abandonados en las escombreras una vez cesa la actividad.

Desarrollar métodos de separaciones radioquímicas es de vital importancia para el estudio de zonas impactadas radiológicamente. Hasta la fecha, se han desarrollado dos métodos de separaciones radioquímicas adaptados a nuestro problema centrándonos en la mejora del rendimiento químico y selectividad de dos métodos utilizados para muestras de agua. Por una parte, se ha estudiado la extracción de ²³⁸U, ²³⁵U y ²³⁴U con tri-n-butil fosfato en muestras de escombros mineros con un elevado contenido de cobre y hierro [1]. Asimismo, se ha optimizado el método radioquímico de separación del ²²⁶Ra mediante coprecipitación con BaSO₄ [2]. Se comprobó la robustez de LabSOCS calculando la eficiencia del detector de Ge para la medida de radionucleidos naturales mediante espectrometría gamma [3]. Actualmente, se están desarrollando métodos para la separación radioquímica de los isótopos del Th, Po y Pb.

Las redes neuronales se han utilizado para la caracterización radiológica de la zona de interés, obteniendo un mapa completo con datos de actividad superficial, alfa, beta, beta-gamma y tasa de dosis (revista Nuclear España).

Los factores de transferencia suelo-planta son otro aspecto importante estudiado en esta tesis. En primer lugar se ha investigado la influencia de la composición química del suelo en la incorporación de U, ²²⁶Ra y ²¹⁰Pb en las hojas y frutos del *Quercus ilex* L. [4]. A su vez, estamos investigando el empleo de la *Spergularia Rubra* como bioindicador de U y Ra en suelos.

Las series radiactivas naturales se han aplicado en el estudio de restos arqueológicos y objetos de coleccionismo. Estos estudios se realizaron utilizando la técnica de espectrometría gamma mediante la cual se diferenció la influencia histórica de un yacimiento arqueológico situado en Molina de Aragón [5]. Por otra parte, se caracterizó radiológicamente y se dató un objeto de coleccionismo de vidrio de uranio de forma no destructiva [6].

Referencias

- [1] V.M. Expósito-Suárez, *Anal. Chim. Acta.*, **2023**, vol. 1259, 341183
- [2] J.A. Suárez-Navarro, *Appl. Radiat. Isot.*, **2022**, vol. 187, 110321
- [3] A. Barba-Lobo, *Radiat. Phys. Chem.*, **2022**, vol. 205, 110734
- [4] J.A. Suárez-Navarro, *J. Environ. Radioact.*, **2023**, vol. 264, pag. 107187
- [5] V.M. Expósito-Suárez, *J. Radioanal. Nucl. Chem.*, **2022**, vol. 332, pag. 95-104
- [6] V.M. Expósito-Suárez, *Radiat. Phys. Chem.*, **2022**, vol. 199, 110299

DETERMINACIÓN DE ESPECIES DE Se Y Hg E IDENTIFICACIÓN DE PARTÍCULAS DE HgSe EN PESCADOS Y PRODUCTOS DERIVADOS MEDIANTE HPLC-ICP-MS Y spICP-MS

Tamara Fernández-Bautista, Beatriz Gómez-Gómez, Emma Gracia-Lor, Teresa Pérez-Corona,
Yolanda Madrid

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Av. Complutense s/n, 28040, Madrid, España
tamarf02@ucm.es

El pescado posee un elevado valor nutricional ya que no solo representa una fuente importante de proteínas, vitaminas y elementos traza esenciales, sino que también forma parte de una dieta equilibrada. Sin embargo, elementos tóxicos como el mercurio (Hg) pueden estar presentes de forma natural en él y acumularse en cantidades elevadas en ciertas especies de peces, sobre todo en los que se encuentran en los niveles más altos de la cadena trófica, es decir, en especies depredadoras. El mercurio ha sido reconocido como uno de los principales problemas para la salud pública por la Organización Mundial de la Salud (OMS) [1]. Su significado biológico se limita a su toxicidad, la cual depende en gran medida de la dosis ingerida, así como de la forma química en la que se encuentre el elemento.

El selenio (Se) es un elemento traza considerado esencial, ya que participa en numerosas funciones biológicas, formando parte de las selenoproteínas. Es un potente agente antioxidante y presenta además propiedades anticarcinogénicas. Está presente de manera natural en los pescados en forma de selenoaminoácidos, como la selenocisteína (SeCys) y la selenometionina (SeMet) [2]. En últimos años se le ha reconocido un efecto protector frente a la toxicidad del mercurio. Aunque los mecanismos de la interacción Se-Hg no están todavía completamente elucidados, se sabe que la toxicidad del Hg tiene lugar a través de la alteración del metabolismo del Se, más concretamente en la disrupción de la síntesis de selenoproteínas. Fruto de esta interacción, se cree que el producto final del proceso de detoxificación del Hg es la formación de nanopartículas de HgSe (HgSeNPs) [3].

En este trabajo se determinaron las especies de Se en la fracción proteica hidrosoluble proveniente de pescados y productos derivados altamente consumidos, mediante hidrólisis enzimática seguida de HPLC-ICP-MS y confirmada por HPLC-ESI-MS/MS. Además, se realizaron estudios de especiación del Hg mediante HPLC-ICP-MS. En cuanto al Se, las principales especies encontradas fueron la selenometilselenocisteína (SeMeSeCys) y la selenometionina (SeMet). En el caso del Hg, el metilmercurio (MeHg⁺) es la principal especie presente en este tipo de muestras. Finalmente, para evaluar la interacción Hg-Se, se investigó la posible presencia de HgSeNPs. Para ello, se probaron diferentes métodos de extracción para el aislamiento de HgSeNPs y se empleó spICP-MS para su detección. Se encontraron partículas de HgSeNPs en el músculo del atún con un tamaño medio de (250 ± 44) nm.

Agradecimientos

Los autores agradecen al Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2020-114714RB-I00), a la Comunidad de Madrid y Fondos Europeos por el proyecto (FSE y FEDER) (S2018/BAA-4393, AVANSECAL-II CM).

Referencias

- [1] WHO (World Health Organization), **2008**.
- [2] L.J. Raymond *et al.*, *Neurotoxicology*, **2020**, 81, 294–299.
- [3] Z. Gajdosechova *et al.*, *Scientific Reports*, **2016**, 6, 34361.

RÁPIDA Y SENCILLA SINTESIS DE POLÍMEROS DE IMPRONTA MOLECULAR DE TIPO CORE-SHELL CON CARÁCTER MAGNÉTICO, MEDIANTE INDUCCIÓN DE MICROONDAS

Miriam Guadaño Sánchez¹

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

miriguad@ucm.es

En este trabajo se presenta un nuevo enfoque como prueba de concepto para el desarrollo de nanopartículas de tipo de núcleo-coraza ("Core-Shell") [1] empleando recubrimientos de polímeros de impronta molecular (MIP) sobre nanopartículas magnéticas multinúcleo (MMC)[2], utilizando un reactor de microondas como desencadenante de la reacción de polimerización en lugar de las técnicas convencionales de luz ultravioleta o calor. Las nanopartículas magnéticas multinúcleos se sintetizaron a partir de cloruro de hierro mediante un reactor de microondas y los recubrimientos poliméricos (MIPs) se llevaron a cabo a través de una polimerización por radicales de tipo no covalente [3] sintetizados con rodamina 6G (R6G) como molécula plantilla (T), ácido metacrílico como monómero funcional (MF), y dimetacrilato de etilenglicol como entrecruzante (CL). La caracterización de los MMC-MIPs se realizó mediante difracción de rayos X (XRD), infrarrojos de transformada de Fourier (FTIR) y microscopía de transmisión electrónica (TEM) mostrando la correcta formación de la capa polimérica sobre los MMCs. Por último, se realizaron estudios cinéticos y de selectividad sobre el polímero revelando una rápida y selectiva (MIP R6G, $K_a = 7,31 \cdot 10^{-2} \text{ M}^{-1}$ y $\bar{N} = 14,14 \text{ } \mu\text{mol g}^{-1}$) unión de la molécula objetivo R6G y por tanto, una alta eficiencia en el proceso de impronta de los MMC-MIPs.

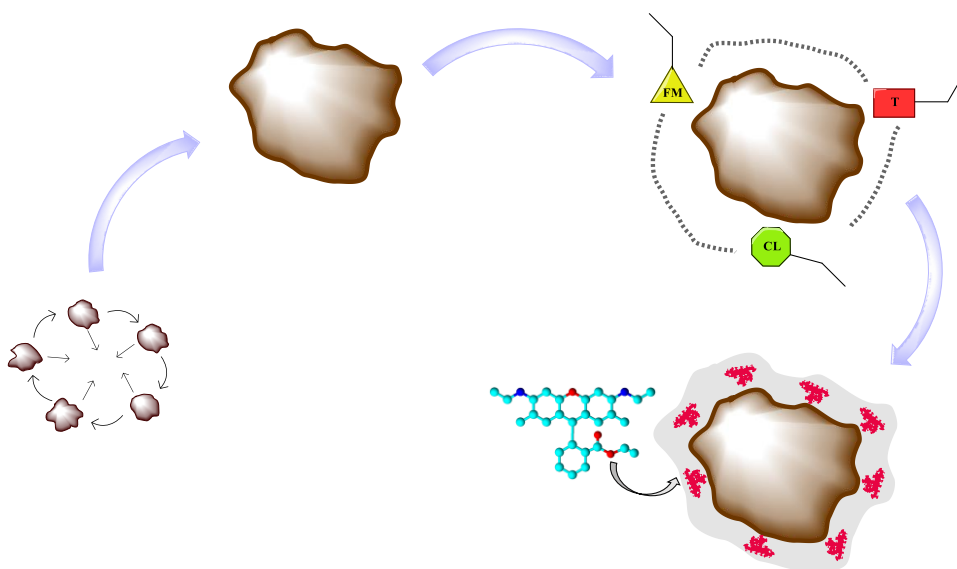


Figura 1. Esquema del proceso completo de síntesis de las nanopartículas Core-Shell.

Referencias

- [1] M. Niu, C. Pham-Huy, and H. He, *Microchim. Acta.*, **2016**, vol. 183, no. 10, pp. 2677–2695.
- [2] J. L. Urraca, B. Cortés-Llanos, C. Aroca, P. de la Presa, L. Pérez, and M. C. Moreno-Bondí, *J. Phys. Chem. C.*, **2018**, vol. 122, no. 18, pp. 10189–10196.
- [3] H. Zhang, L. Ye, and K. Mosbach, *J. Mol. Recognit.*, **2006**, vol. 19, no. 4, pp. 248–259, 2006.

METODOLOGÍAS MULTIANALÍTICAS AVANZADAS PARA EL ASEGURAMIENTO DE LA CALIDAD Y REVALORIZACIÓN DE COMPLEMENTOS ALIMENTICIOS DE ORIGEN VEGETAL

Ignacio Jiménez Amezcua (Doctorando)^{1,2}

¹Instituto de Química Orgánica General (Dpto. Análisis Instrumental y Química Ambiental, IQOG, CSIC, C/ Juan de la Cierva, 3, 28006, Madrid, España

²Pharmactive Biotech Products S.L.U. C/ Faraday, 7, Madrid, 28049, España
ignjim03@ucm.es

En los últimos años ha habido un incremento en el consumo de complementos alimenticios de origen vegetal (CAVs), empleados para complementar la ingesta de nutrientes específicos y obtener un efecto beneficioso sobre la salud, como la mejora de la estimulación del sistema inmunológico o del estado de ánimo, controlar el sobrepeso, entre otros. Los CAVs son considerados por los consumidores como una alternativa natural y ventajosa sobre los compuestos sintéticos debido al efecto sinérgico de sus componentes y sus menores efectos secundarios. Sin embargo, la regulación de estos productos a nivel europeo es muy limitada hasta el momento. Por este motivo, estos productos son susceptibles de numerosas prácticas fraudulentas que pueden afectar a su calidad y perjudicar la salud del consumidor.

Este proyecto tiene un **doble objetivo** fundamental:

1. Satisfacer la demanda de **metodologías multianalíticas**, basadas en **técnicas cromatográficas** acopladas a **espectrometría de masas** (LC-MS, GC-MS, etc.), que permitan la caracterización detallada de la composición de CAVs, con el objetivo de garantizar su calidad, así como identificar productos sospechosos de adulteración y determinar el tipo de fraude cometido [1,2]. Además, las metodologías desarrolladas podrán también implementarse para el control de calidad de CAVs por aquellas empresas líderes del sector que apuesten por la comercialización de CAVs de calidad *premium* contrastada.
2. Con el fin de favorecer la constante diversificación del mercado requerida en el sector de los CAVs, se pretende **desarrollar nuevos CAVs** mediante el empleo de **técnicas de extracción avanzadas** como la extracción asistida por microondas (MAE) o por ultrasonidos (UAE) y la extracción por líquidos presurizados (PLE), que permiten maximizar el aprovechamiento de recursos naturales dado su mayor rendimiento de extracción en tiempos cortos [3]. Por otra parte, se prestará especial atención al desarrollo de métodos por estas técnicas que sean respetuosos con el medioambiente. En este sentido, además de disolventes limpios (e.g. agua), se considerará el uso de **disolventes eutécticos profundos naturales (NADES) como alternativa más económica y de menor toxicidad que los disolventes orgánicos convencionales**, y cuya composición y propiedades físico-químicas pueden modularse para favorecer la extracción selectiva de los compuestos bioactivos de interés.

Referencias

- [1] I. Jiménez Amezcua, S. Rivas Blas, M. Díez Municio, A.C. Soria, A.I. Ruiz Matute, M.L. Sanz, Development of a multianalytical strategy for detection of frauds in *Coleus forskohlii* supplements, *J. Chromatogr. A* 1676 (2022) 4–13. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2022.463198>.
- [2] A. Mena-García, A.J. Bellaizac-Riascos, M. Rada-Mendoza, D.M. Chito-Trujillo, A.I. Ruiz-Matute, M.L. Sanz, Quality Evaluation of Dietary Supplements for Weight Loss Based on *Garcinia cambogia*, *Nutrients* 14 (2022) 1–14. <https://doi.org/10.3390/nu14153077>.
- [3] I. Jiménez-Amezcua, A. González-Prada, M. Díez-Municio, A.C. Soria, A.I. Ruiz-Matute, M.L. Sanz, Simultaneous microwave-assisted extraction of bioactive compounds from aged garlic, *J. Chromatogr. A* 1704 (2023) 464128. <https://doi.org/10.1016/j.chroma.2023.464128>.

IMMUNOPLATAFORMA ELECTROQUÍMICA PARA DETERMINAR DOS GLICOPROTEÍNAS EPITELIALES RELACIONADAS CON EL PRONÓSTICO DEL CANCER COLORECTAL

S. Tejerina-Miranda¹, M. Blázquez-García¹, V. Serafin¹, A. Montero-Calle², M. Garranzo-Asensio², M. Pedrero¹, A.J. Reviejo¹, J.M. Pingarrón¹; R. Barderas² and S. Campuzano¹

¹*Departamento de Química Analítica, Facultad de CC. Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Pza. de las Ciencias 2, 28040, Madrid, España.*

²*Programa de Enfermedades Crónicas, UFIEC, Instituto de Salud Carlos III, Majadahonda, Madrid, España.*

sandrate@ucm.es

En los últimos años se ha reafirmado la necesidad de encontrar metodologías que ayuden a desentrañar la segunda enfermedad responsable de más muertes anualmente, el cáncer. Con este propósito se ha potenciado la investigación oncológica para lograr diagnósticos más tempranos y precisos que, además de permitir la aplicación de terapias más eficientes que mejoren la supervivencia y la calidad de vida de los pacientes, conllevarían una utilización más racional de los recursos sociales. Se persigue desarrollar bioherramientas que complementen y/o superen las tecnologías que se emplean en la rutina oncológica, siendo competitivas en términos de simplicidad, coste, determinaciones multiplexadas y/o multiómicas y aplicables en el punto de necesidad (POC).

Las mucinas son proteínas de gran tamaño y altamente glicosiladas que proporcionan hidratación y lubricación a la superficie epitelial luminal de los conductos corporales [1]. Debido a su localización, estas glicoproteínas están en el centro de muchos procesos patológicos en los que se modifican las interacciones de las células epiteliales y su entorno, lo que da lugar a enfermedades infecciosas e inflamatorias y al cáncer. El estudio de las estructuras y funciones de las mucinas es un campo en expansión debido a los avances en biología molecular y a su posible uso como dianas terapéuticas.

En este trabajo se presenta una inmunoplateforma para la determinación simultánea de mucina 1 (MUC1) y mucina 16 (MUC16), cuya expresión está relacionada con un pronóstico adverso en cáncer colorrectal (CRC) [1]. La inmunoplateforma desarrollada incluye micropartículas magnéticas funcionalizadas (MBs), una pareja de anticuerpos (un anticuerpo de captura, cAb que se inmoviliza covalentemente sobre MBs, y un anticuerpo detector biotinilado, b-dAb, que se marca enzimáticamente con un polímero de estreptavidina conjugado con la enzima peroxidasa, Strep-HRP) selectivos para cada una de estas dianas y detección amperométrica en electrodos serigrafiados duales de carbono (SPdCE) utilizando el sistema hidroquinona (HQ)/HRP/H₂O₂. La inmunoplateforma dual ofrece sensibilidades (valores LOD de 0.05 ng mL⁻¹ y 1.81 pg mL⁻¹ para MUC1 y MUC16, respectivamente) y selectividades adecuadas para su aplicación en el ámbito clínico. Además, se ha demostrado su potencial para el análisis de extractos de células de CRC (1.0 µg/determinación) con diferente potencial metastásico. Estas características junto con su simplicidad, reducido tiempo de ensayo (45 o 90 min para determinar MUC1 y MUC16, respectivamente, partiendo de cAb-MBs), carácter multiplexado y compatibilidad con empleo de instrumentación de tipo POC, hacen que se ofrezca como una bioherramienta muy atractiva frente a las tecnologías ELISA y de western blotting utilizadas comúnmente en los laboratorios de análisis para la determinación de estas dos mucinas.

Referencias

- [1] S. Tejerina-Miranda, M. Blázquez-García, V. Serafin, A. Montero-Calle, M. Garranzo-Asensio, A.J. Reviejo, M. Pedrero, J.M. Pingarrón, R. Barderas, S. Campuzano, 'Electrochemical biotool for the dual determination of epithelial mucins associated to prognosis and minimal residual disease in colorectal cancer', *Int. J. Biol. Macromol.* (enviado).

DISEÑO Y DESARROLLO DE SISTEMAS DE LIBERACIÓN DE FÁRMACOS BASADOS EN COMPUESTOS DE DIRRUTENIO

Isabel Coloma¹, Miguel Cortijo¹, Cristián Cuerva¹, María Eugenia León², María José Mancheño³, Crisanto Gutiérrez⁴, Bénédicte Desvoyes⁴ y Santiago Herrero¹

¹Departamento de Química Inorgánica, ²Departamento de Química Analítica, ³Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avenida Complutense S/N, 28040, Madrid, España.

⁴Centro de Biología Molecular Severo Ochoa, CSIC-UAM, 28049 Madrid, España

iscoloma@ucm.es

Los complejos de dirrutenio con estructura tipo *paddlewheel* consisten en una unidad bimetalúca soportada por cuatro ligandos puente. Estos compuestos han sido ampliamente estudiados debido a su gran variedad de comportamientos magnéticos. No obstante, en la actualidad se están investigando posibles aplicaciones en campos muy diversos, como la biomedicina. En el grupo de investigación se han desarrollado complejos del tipo $[\text{Ru}_2\text{Cl}(\text{formamidinato})_3(\text{carboxilato})]$, que actúan como transportadores del ligando carboxilato sensibles al pH. Los compuestos son estables a pH fisiológico ($\sim 7,4$), sin embargo, liberan el ligando carboxilato en medios ligeramente ácidos ($\text{pH} = 6,5-7,0$) [1]. Esta capacidad de liberación sensible al pH es de gran interés para el desarrollo de nuevos sistemas de liberación de fármacos anticancerígenos, ya que los tumores sólidos sufren acidosis extracelular ($\text{pH} = 6,4-7,0$). Se espera que nuestro sistema pueda emplearse como sistema de liberación de fármacos anticancerígenos, en el que el fármaco se coordina a través de un grupo carboxilato para ser liberado exclusivamente en el entorno ácido del tumor.

Además, se ha estudiado de manera cuantitativa cómo afecta la modificación del carácter dador de los ligandos auxiliares formamidinato a la velocidad de liberación de los carboxilatos, con el fin de desarrollar el candidato más adecuado para quimioterapia. Estos estudios demuestran que estas variaciones afectan significativamente a la liberación, siendo más apropiados los ligandos con una capacidad dadora menor, como es el *N,N'*-difenílformamidinato (DPhF) [2].

Una vez seleccionado el formamidinato más adecuado, se ha preparado un complejo de dirrutenio que incluye tres ligandos DPhF y como cuarto ligando puente un fármaco anticancerígeno coordinado a través de un grupo carboxilato. El fármaco seleccionado ha sido el 5-fluorouracilo (5-FU), que previamente se ha funcionalizado con un ácido carboxílico (5-FUac) para su posterior coordinación. El complejo sintetizado, $[\text{Ru}_2\text{Cl}(\text{DPhF})_3(5\text{-FUac})]$ (ver figura 1a), se ha encapsulado en nanopartículas poliméricas de polimetimetaacrilato (PMMA) (ver figura 1b), ya que el compuesto bimetalúco presenta una baja solubilidad en agua. Se han comenzado ensayos de viabilidad celular *in vitro* en carcinoma de colon humano en presencia de estas nuevas nanopartículas.

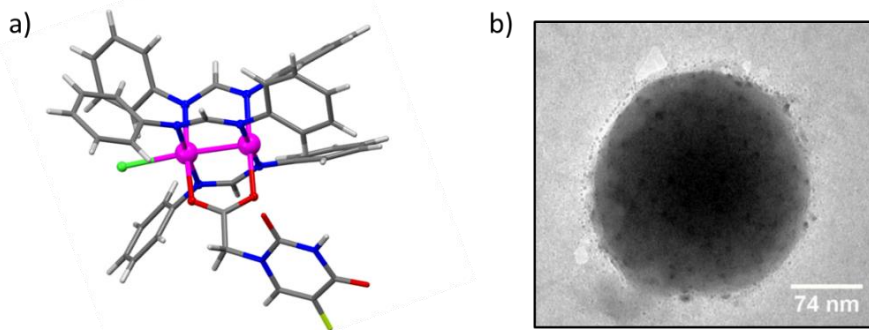


Figura 1. a) Estructura cristalina del complejo $[\text{Ru}_2\text{Cl}(\text{DPhF})_3(5\text{-FUac})]$; b) imagen de TEM de las nanopartículas de PMMA.

Referencias

- [1] I. Coloma *et al.*, *Inorg. Chem.*, **2020**, *59*, 7779-7788.
- [2] I. Coloma *et al.*, *Inorg. Chem. Front.*, **2023** (doi.org/10.1039/D3QI00399J).

REDES CRISTALINAS METAL-ORGÁNICAS (MOFs): POTENCIAL APLICACIÓN COMO ELECTRODOS DE BATERÍAS DE ION LITIO

Elena García-Chamocho¹, Elizabeth Castillo-Martínez¹ y David Ávila Brande¹.

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

elegar21@ucm.es

Actualmente vivimos en un panorama de crisis energética ocasionado por el aumento exponencial de la demanda de energía debido principalmente al crecimiento tanto de la población mundial como del nivel de desarrollo. Si a esto le sumamos la problemática medioambiental, las energías renovables se presentan como una fuerte apuesta para dejar de depender de combustible fósiles y optar por fuentes de energía más limpias y sostenibles para el planeta. Se estima que el consumo de fuentes de energías renovables sea del 80% - 90% en 2050 [1]. A pesar de esta fuerte apuesta, estas fuentes de energía presentan un gran inconveniente, y es la intermitencia en su generación, por lo que, a veces, en ciertos periodos, la demanda energética supera a la generada y a la inversa [2]. Es en este punto donde los sistemas o dispositivos de almacenamiento energético (pilas de combustible, baterías y supercondensadores) se convierten en un factor crítico para conseguir una gestión eficiente del balance entre la energía demanda y la generada a partir de recursos renovables.

En los últimos años, los avances en materiales multifuncionales han ido ganando gran relevancia debido al impacto socioeconómico de sus aplicaciones. Las Redes Metal-Orgánicas (MOFs) son materiales cristalinos relativamente recientes formados por la unión de nodos metálicos a ligandos orgánicos polidentados. Gracias a su gran variedad estructural y composicional, y sobre todo a su elevada, bien definida y sintonizable porosidad, los MOFs se convierten en potenciales candidatos para su uso como electrodos en dispositivos de almacenamiento de energía (DAE) [3].

En esta comunicación, se presenta el estudio estructural y electroquímico de la red cristalina metalorgánica denominada CPO-27-Co para su uso como material catódico en baterías recargables de ion litio (LIBs), unos de los DAE más usados en la actualidad (Figura 1).

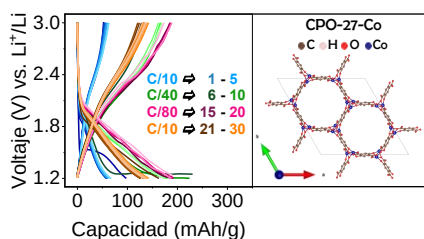


Figura 1. Estudio electroquímico de la CPO-27-Co.

Referencias

- [1] McKinsey & Company, "Global Energy Perspective 2022 McKinsey's Global Energy Perspective is a collaboration between Energy Insights and adjacent practices," *Exec. Summ.*, no. April, 2022, [Online]. Available: https://www.mckinsey.com/~media/McKinsey/Industries/Oil_and_Gas/Our_Insights/Global_Energy_Perspective_2022/Global-Energy-Perspective-2022-Executive-Summary.pdf
- [2] A. Jarrett, "Peaks, troughs, electricity supply and demand," *MGA Thermals*, 2018. <https://mgathermal.com/blog/peaks-troughs-electricity-supply-and-demand> (accessed Feb. 16, 2023).
- [3] C. Wang, D. Liu, and W. Lin, "Metal-organic frameworks as a tunable platform for designing functional molecular materials," *J. Am. Chem. Soc.*, vol. 135, no. 36, pp. 13222–13234, 2013, doi: 10.1021/ja308229p.

ANÁLISIS EX SITU DE α - MnO_2 COMO ELECTRODO EN BATERÍAS DE ALUMINIO ION

David A. Giraldo ^{1,2}, P. Almodóvar ², J. Chacón ², C. Díaz-Guerra ³, I. Álvarez-Serrano ¹, M. L. López ¹

¹Departamento de Química Inorgánica y ³Departamento de Física de Materiales, Universidad Complutense de Madrid, Av. Complutense s/n, 28040, Madrid, España

²Albufera Energy Storage S.L., Calle de Hermosilla, 48, 28001 Madrid, España

dgiraldo@ucm.es

En la última década, se ha investigado y desarrollado nuevos sistemas de almacenamiento de energía, como alternativas a las baterías de ion litio (Li-ion). La más prometedora parece ser la batería de ion aluminio (Al-ion), destacando por sus altas capacidades volumétrica (8046 mA.h/cm^3) como gravimétrica (2980 mA.h/g), su baja inflamabilidad, y su bajo coste (abundancia de 8,2% en la corteza terrestre). Sin embargo, para optimizar y prolongar la vida útil es esencial comprender los procesos electroquímicos y degradantes de los electrodos a lo largo de los ciclos de carga-descarga. De manera habitual, se usa como electrodo negativo (ánodo) aluminio metálico y como electrolito un líquido iónico (EMIC: AlCl_3). [1]

Entre distintos electrodos positivos (cátodo), el MnO_2 destaca por su versatilidad estructural que permite obtener y sistematizar fácilmente una variedad de configuraciones mediante el control de los procesos de síntesis. Clara ventaja en la búsqueda de soluciones de almacenamiento de energía más eficientes y personalizadas [2,3]. El MnO_2 tipo holandita (α - MnO_2), presenta octaedros (Oh) MnO_6 compartiendo aristas y formando túneles con dimensiones (2x2) Oh [2]. Con objeto de analizar el posible mecanismo de inserción-desinserción estructural de Al, se ha realizado un análisis a los electrodos mediante diferentes técnicas (XRD, FT-IR, micro Raman, EELS, HRTEM, EDS), en los procesos de carga-descarga a diferentes números de ciclos (1, 2, 5 y 10). Para ello, una vez ciclados los electrodos, se desmontaron bajo atmósfera controlada de argón (H_2O y $\text{O}_2 < 1 \text{ ppm}$) y se lavaron con dimetil carbonato (DMC) para retirar exceso de electrolito superficial.

Este análisis nos ha permitido comprender los fenómenos químicos, electroquímicos y estructurales que ocurren en el material, revelando que parecen estar relacionados con interacciones superficiales de la muestra. Esta observación pone en valor la importancia de la interfase electrodo-electrolito para poder optimizar las características de las baterías Al-ion basadas en MnO_2 .

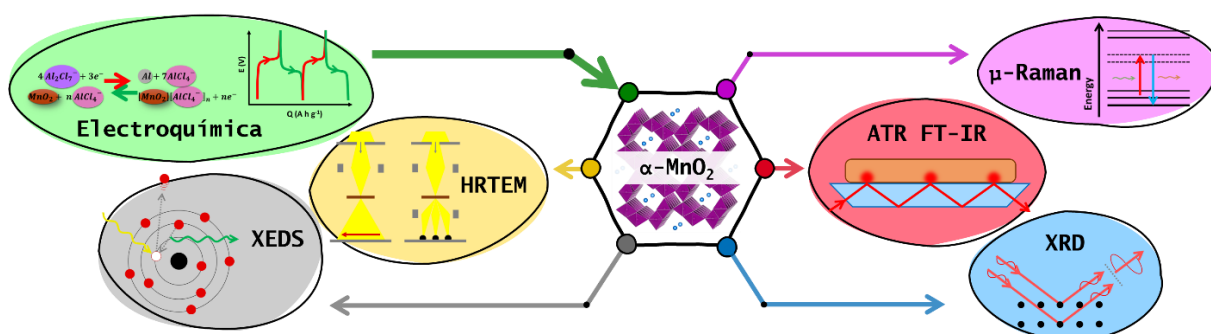


Figura 1. Esquema del proceso de análisis de los electrodos desde la medida electroquímica hasta las diferentes técnicas empleadas.

Referencias

- [1] Tu, J.; Wang, W.; Lei, H.; Wang, M.; Chang, C.; and Jiao, S. *Small*. **2022**, 18 (27), 2201362.
- [2] Giraldo, D. A.; Almodóvar Losada, P.; Chacón, J.; Álvarez-Serrano, I.; López, M. L. *J. Electrochem. Soc.* **2022**, 169 (10), 100538.
- [3] Almodóvar Losada, P.; Giraldo, D. A.; Chacón, J.; Álvarez-Serrano, I.; López, M. L. *ChemElectroChem* **2020**, 7 (9), 2102.

FOTODISOCIACIÓN DE MOLÉCULAS POLIATÓMICAS MEDIANTE EL USO DE LÁSERES DE NANOSEGUNDOS PULSADOS

Javier Cachón (Doctorando/a)¹

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

Jacachon@unican.es

La fotodisociación de moléculas poliatómicas, definida como la ruptura de enlaces atómicos mediante la absorción de fotones, es uno de los principales procesos químicos de interacción entre moléculas y radiación electromagnética caracterizada en forma de fotón. Este tipo de reacciones químicas son frecuentes en la naturaleza, pudiéndose encontrar en casos ejemplos tan diversos como: en procesos de combustión de ciertos combustibles, interacciones reactivas en la química atmosférica e interestelar, o como intermediarios en reacciones de hidrocarburos [1, 2]. Por lo tanto, comprender la física fundamental de estos procesos es necesario para obtener una mejor comprensión de nuestro mundo, así como para realizar mejoras tecnológicas donde sea oportuno.

En términos generales, el proceso se caracteriza por una primera ruptura de la molécula inicial, llamada padre, y una subsiguiente ionización del fragmento de interés para su posterior detección. Existen varias técnicas experimentales para la detección de estos fragmentos ionizados. Dos de las más utilizadas son la técnica de *Velocity map Imaging* (VMI, por sus siglas en inglés) y la técnica de *Direct Current Slicing* (DC Slicing). La técnica de DC Slicing se propone como una mejora de la técnica VMI produciendo una mejor resolución y en consecuencia suele ser la más utilizada. Sin embargo, no siempre puede ser aplicada y hay que atender al sistema experimental con el que se trabaja.

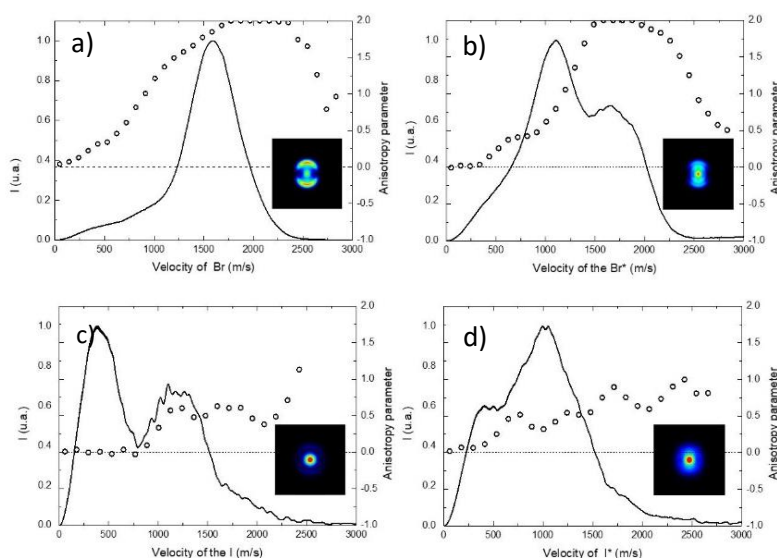


Figura 1. Figuras típicas obtenidas de varios fragmentos donde se muestra: la imagen obtenida directamente del detector mostrada como mapa de intensidad, la distribución de velocidades mostrada por la línea negra y obtenida mediante la integración angular de la imagen, y la distribución de anisotropía representada por los puntos negros obtenida mediante el ajuste a las ecuaciones de anisotropía para cada pequeña región definida por cada punto.

Referencias

- [1] Tanya M. Ramond, Gustavo E. Davico, Rebecca L. Schwartz, and W. Carl Lineberger, *Vibronic structure of alkoxy radicals via photoelectron spectroscopy*, Journal of Chemical Physics **112**, 1158 (2000).
- [2] Kellyn M. Patros, Jennifer E. Mann, a) Marissa A. Dobulis, Michael C. Thompson, and Caroline Chick Jarrold, *Probing alkenoxy radical electronic structure using anion PEI spectroscopy*, J. Chem. Phys. **150**, 034302 (2019).

REOLOGIA INTERFACIAL DE MONOCAPAS DE NANOSUSPENSIONES, TENSIOACTIVOS Y POLIMEROS

Carlo Carbone¹, Ramón González Rubio¹, Eduardo Guzmán Solís¹, Francisco Ortega Gómez¹

¹Departamento de Química-física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias 2, 28040, Madrid, España

carlcarb@ucm.es

La investigación se enfoca en estudiar la reología interfacial dilacional a baja frecuencia (Barreras oscilantes), media frecuencia (Ondas Electro-Capilares) y alta frecuencia (SQELS), de varios sistemas:

- Monocapas de polímeros insolubles en agua (PtBA)
- Monocapas de surfactantes iónicos (CTAB) hidrosolubles
- Monocapas de surfactantes non-iónicos hidrosolubles (Pluronic F-68)
- Monocapas de poli-electrolitos (quitosano)
- Sistemas de nanopartículas-tensioactivos o nanopartículas-poli-electrolitos

El estudio se complementa con medidas de tensión superficial (métodos de gota pendiente y plato de Wilhelmy) y caracterización en bulk (conductividad, permitividad dieléctrica, dispersión dinámica de luz, potencial de interacción, pH).

Parte del trabajo se ha dedicado en optimizar el diseño experimental de la técnica de ondas electro-capilares (reduciendo el tamaño y mejorando la calidad de la señal).



Figura 1. Equipo de ondas electro-capilares

Uno de los problemas abiertos es determinar el impacto que la fuerza iónica tiene en la reología interfacial, en particular en la elasticidad y en la viscosidad dinámicas medidas a través de ondas electro-capilares: se han observado anomalías en la reología de surfactantes catiónicos (viscosidades negativas [1]) y en disoluciones agua-sal (elasticidades negativas [2]): esos resultados se piensa que se deben al hecho de que la ecuación de dispersión utilizada no tenga en cuenta de la disipación debida a la presencia de iones que se mueven en desfase respecto del voltaje aplicado.

El trabajo incluye también el estudio de dispersiones sílica-quitosano, con particular enfoque en la relación entre reología interfacial y el proceso de formación de espuma (y su estabilidad): dicho estudio se ha realizado en colaboración con el CNR de Genova (Italia), en la red europea NanoPaInt.

Referencias

- [1] F. Monroy et al., J. Non-Equilib. Thermodyn., **2000**, vol. 25, pp. 279-299
[2] M. Safouane et al., ChemPhysChem., **2009**, vol. 10, pp. 222 – 225

MICROSCOPIA Y ESPECTROSCOPIA LÁSER PARA EL ESTUDIO DE MATERIALES DEL PATRIMONIO CULTURAL

Marina Martínez-Weinbaum, Laura Maestro Guijarro, Paula Carmona Quiroga, Mohamed Oujja Ayoubi, Marta Castillejo Striano

Dpto. Química Física de Materiales, Instituto de Química Física Blas Cabrera, Consejo Superior de Investigaciones Científicas, Calle Serrano 119, 28006, Madrid, España.

mgmartinez@iqfr.csic.es

El Laboratorio Láser para la Ciencia del Patrimonio (LLCP) del Instituto de Química Física Blas Cabrera (IQF-CSIC), ofrece nuevas estrategias analíticas específicamente diseñadas para aplicaciones en Ciencia del Patrimonio basadas en el uso de métodos láser. Estas incluyen técnicas y sistemas para análisis químico no invasivo y metodologías avanzadas de limpieza con láser. Las principales líneas de investigación del grupo de la doctoranda son:

- Investigar las capacidades de la técnica de microscopía óptica no lineal (NLOM) de reciente implementación en el campo del patrimonio cultural en sus modalidades de fluorescencia por excitación multifotónica y generación de segundo y tercer armónico, basada en la excitación con láser de femtosegundos, para la caracterización estructural y composicional no invasiva, con resolución micrométrica tridimensional de sustratos del patrimonio cultural.
- La determinación no invasiva de la composición elemental y molecular de materiales y sustratos del patrimonio cultural basada en la aplicación combinada de espectroscopias de ruptura inducida por láser (LIBS), espectroscopía de fluorescencia inducida por láser (LIF) y Raman. Estas técnicas están bien establecidas para el análisis de los materiales en el campo del patrimonio cultural proporcionando, además, información sobre las transformaciones fisicoquímicas asociadas con el envejecimiento, degradación o restauración de estos materiales.
- Desarrollar y validar estrategias láser avanzadas para una eliminación controlada de capas de materiales no deseados sobre sustratos del patrimonio.

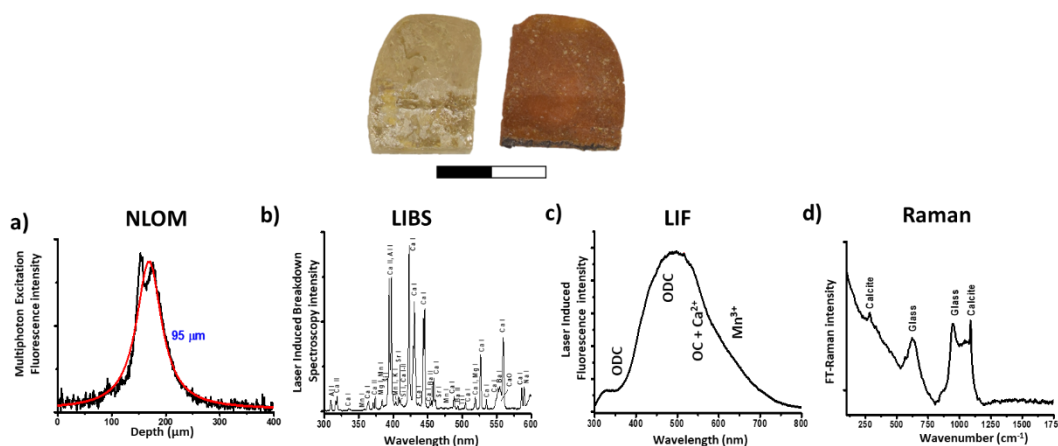


Figura. Arriba, imagen de vidrios degradados; abajo, a) el espesor de la capa degradada determinada por la NLOM y sus correspondientes espectros b) LIBS, c) LIF y d) Raman.

Referencias

- [1] M. Oujja, T. Palomar, M. Martínez-Weinbaum, S. Martínez-Ramírez, M. Castillejo, *Eur. Phys. J. Plus*, 2021, vol. 136, pags. 859-881.
- [2] M. Martínez-Weinbaum, M. Lozano-Carbó, L. Maestro-Guijarro, P. M. Carmona-Quiroga, M. Oujja, y M. Castillejo, *Heritage*, 2023, vol. 6, pags. 957-967.

FLUIDOS Y ALEACIONES DE ALTA TEMPERATURA, HACIA UNA NUEVA GENERACIÓN DE PLANTAS TERMO-SOLARES

Mickaël Lambrecht¹

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

milambre@ucm.es

La producción de energía eléctrica desde fuentes de energía renovable se ha convertido en uno de los principales retos de esta década. Entre las diferentes tecnologías, las plantas de concentración solar (CSP) están consideradas entre las primeras opciones para la producción de electricidad a gran escala, concentrando la radiación solar y son las únicas, entre las diferentes tecnologías renovables, que pueden almacenar la energía en un fluido caloportador. Este mecanismo de almacenamiento basado en el calor sensible permite generar electricidad durante la noche, pudiendo responder a la demanda eléctrica con robustez. Sin embargo y a pesar de estas ventajas, estas CSP tienen un bajo rendimiento debido al estrecho rango de temperatura de trabajo que tiene el fluido caloportador que actualmente se emplea, una mezcla de nitratos (60%NaNO₃-40%KNO₃, “Sal Solar”). Por lo tanto, la mayor parte de las investigaciones se centran en mejorar su rendimiento a través del diseño de nuevos fluidos de almacenamiento y de transferencia de calor. En ese sentido, la mezcla ternaria de cloruros de Mg-Na-K tiene unas propiedades físico-químicas muy óptimas, para reemplazar la “Sal Solar”, al poder operar a altas temperaturas, hasta 700°C. Esta temperatura permitiría utilizar turbinas supercríticas, con ciclo Brayton de dióxido de carbono supercrítico para generar electricidad a menor coste [1]. No obstante, es muy importante valorar la compatibilidad de este prometedor fluido con los materiales contenedores (aceros), lo cual es uno de los mayores retos a la hora de usarse, al ser altamente corrosivo, debido a su alta higroscopicidad. Teniendo en cuenta todos estos aspectos, han sido realizadas simulaciones termodinámicas, para calcular las propiedades termo-físicas de la mezcla ternaria, así como, sus efectos corrosivos sobre la aleación base níquel IN617, bajo atmósferas controladas [2]. Las simulaciones, fueron corroboradas mediante estudios experimentales de termoanálisis y ensayos de corrosión de larga duración en las mismas condiciones [3].

Referencias

- [1] M. Lambrecht et al., Past research and future strategies for molten chlorides application in concentrated solar power technology. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, **2022**. 237
- [2] M. Lambrecht et al., Computational modelling of the local structure and thermophysical properties of ternary MgCl₂-NaCl-KCl salt for thermal energy storage applications. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **2022**. 196
- [3] M. Lambrecht et al., Corrosion study of Ni-based alloy in ternary chloride salt for thermal storage application, **2022**. 208

PROTECCIÓN ACTIVA DE ALEACIONES DE ALUMINIO

Esther López¹, Marta Mohedano¹, Raúl Arrabal¹

¹Departamento de ingeniería química y de materiales, Facultad de ciencias químicas, Universidad Complutense de Madrid, Av. Complutense s/n, 28031, Madrid, España
eslope03@ucm.es

La oxidación electrolítica por plasma (PEO, por sus siglas en inglés) se presenta como una alternativa al anodizado en ácido crómico (CAA) para el tratamiento superficial anticorrosión de aleaciones ligeras [1]. Los recubrimientos PEO presentan un comportamiento a desgaste mejorado y una resistencia a la corrosión que puede ser comparable a la de CAA. Sin embargo, los recubrimientos PEO tradicionales suelen presentar espesores elevados ($>10\text{ }\mu\text{m}$) lo que supone una desventaja en términos de comportamiento a fatiga en aplicaciones aeronáuticas [2]. Una manera de superar esta limitación es el proceso Flash-PEO, por el que se pueden producir recubrimientos finos ($\leq 10\text{ }\mu\text{m}$) en tiempos de tratamiento muy cortos (1-3 min). Sin embargo, las propiedades frente a la corrosión de dichos recubrimientos suelen verse mermadas [2].

El presente trabajo estudia el efecto de sol-geles híbridos (HSGs por sus siglas en inglés), con y sin presencia de Ce como especie inhibidora, como una forma de sellar los recubrimientos Flash-PEO en una aleación de aluminio 2024-T3. La caracterización de los recubrimientos se llevó a cabo mediante diferentes técnicas como perfilometría óptica, difracción de rayos X (DRX), microscopía electrónica de barrido (SEM) y espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR). También se evaluaron las superficies mediante medidas de ángulo de contacto y ensayos de adhesión. El comportamiento a corrosión se estudió mediante espectroscopía de impedancia electroquímica (EIS) y un ensayo de inmersión a 21 días realizado en una solución de NaCl (3,5 % en masa) en una superficie con un defecto artificial para evaluar las propiedades de protección activa de los sellados sol-gel y sol-gel + Ce.

Referencias

- [1] B. L. Jiang, Y. M. Wang, "Plasma electrolytic oxidation treatment of aluminium and titanium alloys," *Surface Engineering of Light Alloys: Aluminium, Magnesium and Titanium Alloys*, **2010**, vol.150, p. 110-154
- [2] E. Wierzbicka, R. Arrabal, "Flash-PEO as an alternative to chromate conversion coatings for corrosion protection of Mg alloy," *Corrosion Science*, **2021**, vol. 180, p. 109-189

PRETRATAMIENTOS SUPERFICIALES DE ALEACIONES DE TITANIO PARA UNIONES ADHESIVAS ESTRUCTURALES DE ESTRUCTURAS AEROESPACIALES HÍBRIDAS TI6AL4V / CFRC

Miguel Marín¹, Ignacio García¹, Endzhe Matykina²

¹Departamento de Ingeniería de Superficies, Corrosión y Durabilidad, Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas CENIM-CSIC, Av. Gregorio del Amo 8, Madrid, España

²Departamento de Ingeniería Química y de Materiales, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, 28040, España

migumari@ucm.es

La sustitución progresiva de materiales metálicos por compuestos reforzados con fibra de carbono (CFRC) en estructuras aeronáuticas, obliga al rediseño de las estructuras híbridas metal/CFRC. Dentro de las estructuras híbridas, destacan las formadas por aleaciones de titanio y CFRC, ya que estas ofrecen excelentes propiedades mecánicas y resistencia a la corrosión [1].

Actualmente, el principal proceso de unión en estructuras híbridas sigue siendo el remachado mecánico. Sin embargo, la elevada sensibilidad a la concentración de tensiones de los materiales compuestos, hace que las uniones adhesivas sean una ventaja respecto a las uniones mecánicas.

El proceso de adhesión es muy complejo y depende en gran medida de la preparación de la superficie de los adherentes [2]. Para que un tratamiento superficial sea eficaz, se debe lograr una rugosidad superficial que proporcione un aumento en el área disponible para la unión química, la creación de topografías donde el adhesivo pueda entrelazarse mecánicamente, además de una óptima adsorción y contacto entre el adhesivo y el adherente, proporcionado por una energía superficial adecuada.

Por tanto, el diseño de uniones adhesivas con una elevada durabilidad requiere de la adecuada selección del pretratamiento superficial del titanio. Hasta la fecha, el anodizado en ácido crómico (CAA) es el pretratamiento que proporciona mejores resultados de adherencia y durabilidad. Sin embargo, la toxicidad del Cr (VI) y su naturaleza cancerígena obliga a la búsqueda de alternativas.

Por todo ello, en este trabajo se ha buscado caracterizar diferentes tratamientos superficiales de la aleación Ti6Al4V, en base a criterios técnicos de morfología, rugosidad, energía superficial y composición. Para la evaluación de la adherencia y durabilidad que desarrollan en una unión adhesiva, con los tratamientos determinados previamente como los más prometedores, se formaron uniones adhesivas para la realización de ensayos de propagación de grieta (Wedge Crack y Double Cantilever Beam). Estos ensayos de durabilidad se han realizado en tres medios de envejecimiento diferentes, que simulan las atmósferas a las que se ven expuestas las uniones en una aeronave: ciclos de calor/humedad; ciclos combinados de humedad/secado/atmósfera corrosiva/choque térmico; y ensayos de inmersión en una disolución que simula la composición del electrolito encontrado en uniones solapadas de una aeronave.

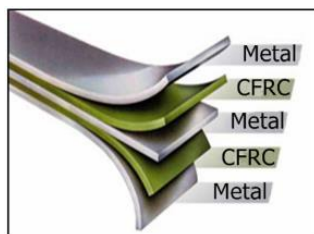


Figura 1. Esquema de estructura híbrida Metal – CFRC unido mediante unión adhesiva.

Referencias

- [1] T. Mertens, F.J. Gammel, M. Kolb, O. Rohr, L. Kotte, S. Tschöcke, S. Kaskel, U. Krupp, *Investigation of surface pre-treatments for the structural bonding of titanium*, *International Journal of Adhesion and Adhesives*, **2012**, vol. 34, pag. 46-54
- [2] A. Baldan, *Adhesion phenomena in bonded joints*, *International Journal of Adhesion and Adhesives*, **2012**, vol. 38, pag. 95-116.



VII
Simposio Anual en Química Avanzada
18 de julio de 2023

