

# UCM SIMPOSIO ANUAL EN QUÍMICA AVANZADA

**CUÁNDO**

**20 de Julio de 2022**

**09:30 a 16:00**

**DÓNDE**

**Salón de actos de la  
facultad**

**Edificio de la Biblioteca, acceso trasero**

**Moderadores** • **Maria José Mayoral – Noemi Encinas –  
Macarena Calero – Pedro Recio – Roberto Álvarez-  
Fernandez – Gustavo Moreno** • **Comité organizador** •  
**Guillermo Aragoneses - Marianela Gómez - Almudena  
Inchausti - Borja Pillado** • **Patrocina** • **Iberlabo S.A.**

**QUIMICAS.UCM.ES/**



**PROGRAMA**

**APERTURA 9:15**

**PRIMERA SESIÓN  
9:30-11:00**

**Daniel Gutiérrez Martín  
Beatriz Arévalo Pérez  
David Valdivieso González  
Fernando Pradanas González  
Andrea Canal Martín  
Héctor Estévez Sánchez**

**PAUSA ALMUERZO**

**SEGUNDA SESIÓN  
11:30-13:00**

**Helga Ruíz  
Aarón Terán More  
Anabel Villalonga Chico  
Pedro Liz Basteiro  
Raluca Loredana Vasile  
Andrés Machuca Marcos**

**PAUSA COMIDA**

**TERCERA SESIÓN  
15:00-16:30**

**Silvia Guerra Rodríguez  
Marianela Gómez Toledo  
Guillermo Aragoneses Cazorla  
Olivia Borrell Grueiro  
Carmen Martínez Alonso  
Iván Romero Sánchez**

**Programa de Doctorado en  
Química Avanzada**



**Iberlabo, s. a.**  
c/ Téllez, 30 local 17  
Teléfono: (34) 915 511 491 - (34) 915 013 578  
Fax: (34) 915 525 403  
28007 - MADRID  
www.iberlabo.com  
e-mail: info@iberlabo.com  
NIF: A22641632

VI Simposio  
Anual en  
Química  
Avanzada



Facultad de  
Ciencias  
Químicas

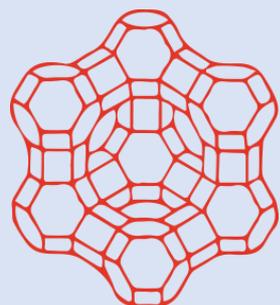


**iberlabo, s. a.**  
c/ Tellez, 30 local 17  
Teléfono: (43) 915 511 491 - (34) 915 013 578  
Fax: (34) 915 529 403  
28007 - MADRID  
www.iberlabosa.com  
e-mail: info@iberlabosa.com  
NIF: A/28416832

Libro de resúmenes



# VI Simposio Anual en Química Avanzada

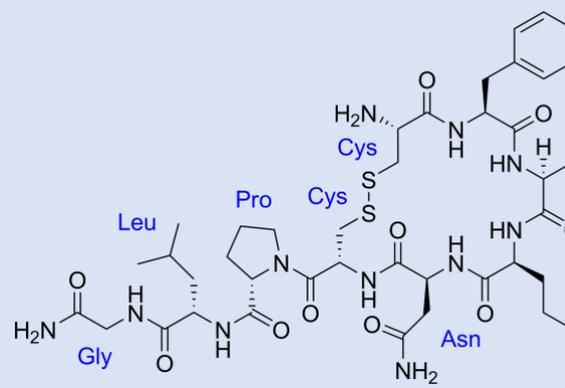
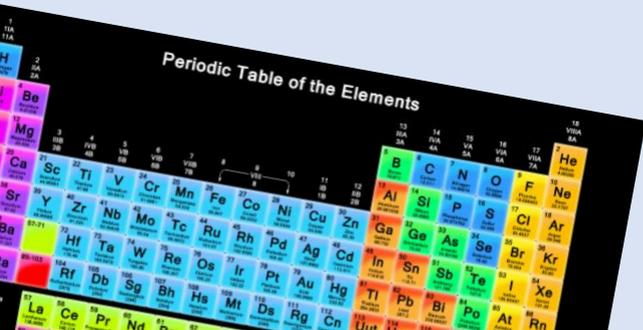


Programa de Doctorado Química Avanzada

Madrid

20 de Julio de 2022

Patrocina Iberlabo S.A.





**Organizadores:**

Guillermo Aragoneses Cazorla

Marianela Gómez Toledo

Almudena Inchausti Vallés

Borja Pillado Ríos

## Programa del VI Simposio Anual en Química Avanzada

9:15-9:30	Bienvenida al VI Simposio Anual en Química Avanzada. Introducción a cargo del coordinador del Programa de Doctorado en Química Avanzada, <b>José María González Calbet</b> .
<b>Primera sesión</b>	
9:30-9:45	<i>Proyecto Gruyère Français: Electrocatalizadores nanoestructurados de NdNi<sub>1-x</sub>Fe<sub>x</sub>O<sub>3</sub>.</i> <b>Daniel Gutiérrez Martín</b> (Química Inorgánica)
9:45-10:00	<i>Visibilizando enfermedades autoinmunes con biosensores electroquímicos.</i> <b>Beatriz Arévalo Pérez</b> (Química Analítica)
10:00-10:15	<i>Enriquecimiento de la ATP sintasa en membranas curvas.</i> <b>David Valdivieso González</b> (Química Física)
10:15-10:30	<i>Inmunoensayo homogéneo basado en transferencia de energía de resonancia de Förster para el control de ácido ciclopiazónico en maíz.</i> <b>Fernando Pradanas González</b> (Química Analítica)
10:30-10:45	<i>Sistemas Químicos Dinámicos Combinatorios Dirigidos por Proteínas.</i> <b>Andrea Canal Martín</b> (Química Física)
10:45-11:00	<i>Desarrollo y caracterización funcional mediante técnicas analíticas y -ómicas de nuevos nanosistemas híbridos como herramienta frente a cáncer y tuberculosis.</i> <b>Héctor Estévez Sánchez</b> (Química Analítica)
<i>Moderadores: Gustavo Moreno Martín y Macarena Calero Calero</i>	

## 11:00-11:30: Almuerzo a cargo de la organización

<b>Segunda sesión</b>	
11:30-11:45	<i>Aplicación de los fluidos supercríticos en formulaciones farmacéuticas para administración pulmonar y tópica.</i> <b>Helga Ruíz</b> (Química Física)
11:45-12:00	<i>Síntesis sostenible para la obtención de compuestos con enlace metal-metal.</i> <b>Aarón Terán More</b> (Química Inorgánica)
12:00-12:15	<i>Nuevos dispositivos de detección para cáncer y enfermedades cardiovasculares.</i> <b>Anabel Villalonga Chico</b> (Química Analítica)
12:15-12:30	<i>Hidrogeles sensibles a temperatura y pH. Ajuste de la respuesta a los estímulos.</i> <b>Pedro Liz Basteiro</b> (Química Física)
12:30-12:45	<i>Efectos de la síntesis y la cristalización sobre la distribución de cationes en una familia de MOFs basados en tierras raras.</i> <b>Raluca Loredana Vasile</b> (Química Inorgánica)
12:45-13:00	<i>Estudio multi-ómico para la evaluación del potencial de las nanopartículas de rodio como agente fotosensibilizante en terapia fotodinámica del cáncer.</i> <b>Andrés Machuca Marcos</b> (Química Analítica)
<i>Moderadores: Pedro Recio Ibáñez y María José Mayoral Muñoz</i>	

13:00-15:00: Pausa

Tercera sesión	
15:00-15:15	<i>Caracterización de los cambios nanoestructurales producidos por la irradiación y la deformación en la susceptibilidad al agrietamiento intergranular en 316L.</i> <b>Silvia Guerra Rodríguez</b> (Ingeniería Química y de Materiales)
15:15-15:30	<i>Cálculos DFT para estudiar la relación estructura-composición-propiedades en materiales con aplicaciones en energía.</i> <b>Marianela Gómez Toledo</b> (Química Inorgánica)
15:30-15:45	<i>Desarrollo y caracterización mediante estrategias analíticas y -ómicas de nuevos nanosistemas híbridos basados en sílice mesoporosa y plata como herramienta frente a cáncer.</i> <b>Guillermo Aragonese Cazorla</b> (Química Analítica)
15:45-16:00	<i>Irradiación de nanopartículas de oro con pulsos láser ultrarápido.</i> <b>Olivia Borrell Grueiro</b> (Química Física)
16:00-16:15	<i>Efecto de las deformaciones mecánicas en la actividad catalítica de metales y compuestos intermetálicos para la economía del hidrógeno.</i> <b>Carmen Martínez Alonso</b> (Química Inorgánica)
16:15-16:30	<i>Análisis de micotoxinas fúngicas en distintas variedades de arroz.</i> <b>Iván Romero Sánchez</b> (Química Analítica)
<i>Moderadores: Noemí Encinas García y Roberto Álvarez-Fernández García</i>	

# Primera sesión

**(9:30-11:00)**

Moderadores:

Gustavo Moreno Martín

Macarena Calero Calero

# Proyecto Gruyère Français: Electrocatalizadores nanoestructurados de $\text{NdNi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$

*D. Gutiérrez-Martín<sup>1</sup>, M. Hernando<sup>1</sup>, A. Torres-Pardo<sup>1,2</sup>, J.M. González-Calbet<sup>1,2</sup>, A. Varela<sup>1</sup>, D. Portehault<sup>3</sup>, M. Parras<sup>1</sup>*

<sup>1</sup>Departamento de Química Inorgánica, Universidad Complutense de Madrid, España,

<sup>2</sup>ICTS Centro Nacional de Microscopía Electrónica, Universidad Complutense de Madrid, España

<sup>3</sup>Laboratoire de Chimie de la Matière Condensée de Paris, Sorbonne Université, CNRS, Paris, France

dangut04@ucm.es

La amenaza cada vez más real que supone el cambio climático ha resaltado la necesidad de desarrollar nuevos catalizadores económicamente viables. Estos catalizadores deben ser eficientes y capaces de plantear procesos redox como una auténtica alternativa a los procesos de obtención de energía basados en fuentes basadas en el petróleo y derivados del mismo. Dentro de estos procesos redox, destacan la ruptura electrolítica del agua, que a su vez se puede dividir en dos procesos, la reacción de generación de hidrógeno (HER) y la de generación de oxígeno (OER).

Respecto a las reacciones OER, muchos compuestos se han sugerido como electrocatalizadores, entre los que destacan los compuestos que contienen metales preciosos como el platino, el iridio o el rutenio, pero teniendo en cuenta su escasez y alto precio, no parece una alternativa razonable su uso. Una alternativa a los mismos son los óxidos con estructura tipo perovskita debido a la aparente sencillez a la hora de controlar su composición catiónica [1].

Teniendo estos factores en cuenta, hemos decidido comenzar a trabajar con la fase de composición  $\text{NdNiO}_3$ , que presenta una estructura tipo perovskita de simetría ortorrómbica que puede presentar vacantes de oxígeno en su estructura, aspecto que es especialmente relevante en OER [2]. Además, hemos planteado la síntesis desde el punto de vista de la catálisis heterogénea, tratando de maximizar el área superficial disponible del catalizador, utilizando un método de plantilla. Para este método hemos utilizado esferas monodispersas de polimetilmetacrilato (PMMA) para generar un material que presente macroporosidad ordenada a lo largo de las tres dimensiones (3DOM), aumentando así de forma significativa su área superficial. A más y más, hemos introducido ciertas cantidades de hierro como dopante mejorando significativamente las propiedades electrocatalíticas de nuestra fase.



Figura 1. Esquema del proceso de síntesis. Figura 2. Micrografía de barrido del óxido 3DOM.

## Referencias:

[1] J. W. Zhao *et al.*, *ACS Mater. Lett.*, 3(6), (2021), 721-737.

[2] C. Hu *et al.*, *Adv. Funct. Mater.*, 29(30), (2019), 1902449.

# Visibilizando enfermedades autoinmunes con biosensores electroquímicos

Beatriz Arévalo

Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Av. Complutense S/N, 28040, Madrid

beaare01@ucm.es

Las enfermedades autoinmunes son trastornos caracterizados por una sobreprotección del sistema inmunitario, donde los componentes, células y tejidos propios del organismo son atacados por autoanticuerpos. Entre estas enfermedades se encuentran la artritis reumatoide (AR), el lupus eritematoso sistémico (LES) o el síndrome de Sjögren (SS), en las que se ha descrito la desregulación de autoantígenos específicos originando la producción de autoanticuerpos (AAbs) antinucleares (ANAs) y contra antígenos nucleares extraíbles (ENAs) [1]. Por un lado, los autoanticuerpos contra cadenas dobles de ácidos desoxirribonucleicos (dsDNA) incluyendo diferentes isotipos de inmunoglobulinas (IgG-, IgA-, IgM-anti-dsDNA) pertenecen a los ANAs. Por otro lado, los autoanticuerpos anti-ENAs comprenden anti-La/SSB, anti-Ro/SSA, anti-RNP70 y anti-smRNP. Todos estos autoanticuerpos son biomarcadores de diagnóstico bien reconocidos de estas enfermedades autoinmunes, y sus niveles serológicos están positivamente correlacionados con la gravedad de la enfermedad.

En este contexto, nuestro grupo de investigación ha desarrollado biosensores electroquímicos para la multideterminación rápida, sencilla y fiable de los isotipos de inmunoglobulinas anti-ANAs (IgG-, IgA-, IgM-anti-dsDNA), o el contenido total de ellas (anti-dsDNA), y de autoanticuerpos IgG anti-ENAs (anti-La/SSB, anti-Ro/SSA, anti-RNP70, anti-smRNP), en electrodos serigrafados de carbono desechables con una, cuatro u ocho electrodos de trabajo.

La metodología se basa en el uso de micropartículas magnéticas (MBs) comerciales funcionalizadas con neutravidina, grupos carboxílicos o capaces de reconocer etiquetas de Histidinas, que se modifican con dsDNA o el antígeno nuclear específico para la captura eficiente de los autoanticuerpos, anti-ANAs o anti-ENAs, respectivamente. Los autoanticuerpos capturados se conjugan enzimáticamente con anticuerpos secundarios marcados con la enzima peroxidasa (HRP).

Los bioconjugados magnéticos preparados se transfieren a plataformas desechables para la detección simple, cuádruple u óctuple, previamente colocadas en una carcasa de PMMA adecuada con imanes de neodimio embutidos, para llevar a cabo la transducción amperométrica. La variación de las corrientes catódicas registradas a un potencial de  $-0.2$  V (vs. Ag) en presencia de hidroquinona (HQ) como mediador redox, y de  $H_2O_2$  como sustrato enzimático, resultan directamente proporcionales a la concentración del autoanticuerpo diana. Se han desarrollado inmunoplateformas para la determinación cuádruple de cada tipo de biomarcadores (anti-ANAs o anti-ENAs), y para la determinación óctuple de ambas familias de autoanticuerpos, demostrando en todos los casos excelentes características analíticas y operativas para la determinación del nivel serológico de estos biomarcadores, y potencial para discriminar de manera sencilla y fiable a individuos sanos de pacientes diagnosticados con LES y SS.

La simplicidad de las metodologías desarrolladas, los reducidos tiempos de ensayo, el coste asequible, el formato desechable, las detecciones multiplexadas y la posibilidad de transferir las metodologías a dispositivos en el punto de atención (POCT) hacen de estas bioplateformas una alternativa muy atractiva a las técnicas ELISA convencionales para la detección y seguimiento fiables de estas enfermedades autoinmunes.

## Referencias:

[1] B. Arévalo, V. Serafín, M. Sánchez-Paniagua, A. Montero-Calle, R. Barderas, B. López-Ruiz, S. Campuzano, P. Yáñez-Sedeño, J. M. Pingarrón, *Biosens. Bioelectron.*, 166, (2020), 112233 (DOI: <https://doi.org/10.1016/j.bios.2020.112233>)

# Enriquecimiento de la ATP sintasa en membranas curvas

David Valdivieso González<sup>1,2,3</sup>, Marcin Makowski<sup>1,3,4</sup>, M. Pilar Lillo<sup>5</sup>, Manuel N. Melo<sup>4</sup>,

Víctor G. Almendro-Vedia<sup>1,2,6</sup> and Iván López Montero<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Dto. Química Física, Universidad Complutense de Madrid, Avda. Complutense s/n 28040 Madrid

<sup>2</sup>Instituto de Investigación Hospital Doce de Octubre (Imas12), Avda. de Córdoba s/n, 28041 Madrid

<sup>3</sup> Instituto Pluridisciplinar, Universidad Complutense de Madrid, Ps. Juan XXIII 1, 28040 Madrid

<sup>4</sup> Instituto de Tecnología Química e Biológica António Xavier, Universidad de Nova de Lisboa, Av. da República, 2780-157 Oeiras, Portugal

<sup>5</sup> Dto. Química Física Biológica, Instituto de Química-Física "Rocasolano" (CSIC), c/Serrano 119, 28006 Madrid

<sup>6</sup> Sección Departamental Farmacia Galénica y Tecnología Alimentaria, Universidad Complutense de Madrid, Avda. Complutense s/n, 28040 Madrid

davivald@ucm.com

Las ATP sintasas son proteínas catalíticas encargadas de la formación del ATP mediante la disipación de un gradiente de protones a través de la membrana, generando la rotación de su región transmembrana. Estas proteínas rotoras también pueden hidrolizar el ATP cuando se encuentra en exceso, favoreciendo la rotación y bombeo de protones en sentido inverso. En este trabajo estudiamos la relación entre la rotación de la proteína y su preferencia por regiones de alta curvatura, en ausencia de interacciones bioquímicas entre proteínas. Reconstituyendo las ATP sintasas de *E. coli* en vesículas gigantes unilamelares (GUVs), estudiamos su preferencia por membranas de alta curvatura en nanotubos lipídicos extraídos de GUVs (Figura 1A). Nuestros experimentos muestran la acumulación de las ATP sintasas en los filamentos lipídicos cuando están activas, como consecuencia de la presencia de ATP. Este comportamiento de preferencia por curvatura de las ATP sintasas rotoras yace en el reblandecimiento de la membrana causada por su actividad, tal como ha sido descrito previamente en la literatura [1] y estudiado mediante microaspiración. Por ello, nuestros resultados, apoyados por simulación *coarse-grained* (Figure 1B), sugieren un nuevo papel de la rotación de la ATP sintasa en la organización de las membranas biológicas.

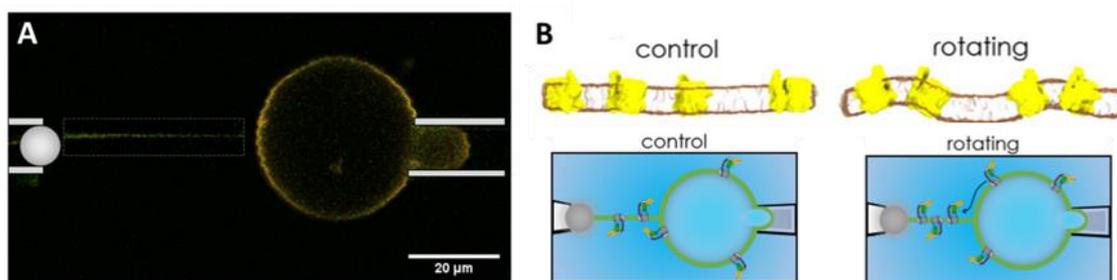


Figura 1. Micrografía confocal de nanotubo lipídico extraído de una GUV, simulaciones moleculares y esquema conceptual. (A) *Sorting* de ATP sintasas en gradiente de curvatura (GUV – nanotubo lipídico). (B) *Coarse-grained simulations* de ATP sintasas en membranas lipídicas en condiciones pasivas (*control*) y activas (*rotating*).

## Referencias:

[1] V.G. Almendro Vedia, *PNAS*, 114, (2017), 11291-11296

# Inmunoensayo homogéneo basado en transferencia de energía de resonancia de Förster para el control de ácido ciclopiazónico en maíz

Fernando Pradanas González

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

ferprada@ucm.es

Las micotoxinas son uno de los contaminantes más extendidos y notificados en todo tipo de cultivos [1]. Se trata de metabolitos secundarios producidos por diferentes especies de hongos filamentosos, entre los que destacan los del género *Fusarium*, *Penicillium*, *Aspergillus* y *Alternaria* y su consumo puede producir graves problemas de salud tanto en animales como en humanos. El ácido ciclopiazónico (CPA) es una micotoxina producida por distintas especies de los géneros *Penicillium* y *Aspergillus*, y se encuentra de forma natural en diferentes frutos secos, como nuez y cacahuete, aunque en mayores proporciones en maíz y queso [2].

En este trabajo, se ha desarrollado un inmunoensayo homogéneo competitivo para la detección de CPA en maíz. El principio de medida se basa en la competición establecida entre la toxina libre y un péptido mimético cíclico de 7 aminoácidos, obtenido mediante la técnica de selección de fagos (del inglés “*phage display*”), que interacciona con el parátipo del fragmento de anticuerpo (Fab), selectivo al CPA, marcado con Alexa Fluor 555 (AF555). El péptido mimético biotinilado se une a nanopartículas de conversión ascendente (UCNPs) modificadas con estreptavidina. En ausencia del analito, el conjugado Fab-AF555 se une al péptido anclado a las UCNPs produciéndose una transferencia de energía de resonancia de Förster (FRET). La ventaja de emplear UCNPs para esta aplicación es que estas nanopartículas tienen la propiedad fotoquímica única de absorber energía en la región cercana del infrarrojo y emitir en regiones del espectro más energéticas (UV-VIS), reduciéndose de este modo posibles interferencias ópticas de la matriz de la muestra [3].

El bioensayo tiene lugar en una única etapa obteniéndose un valor de  $IC_{50}$  de 0,36 ng/mL y un intervalo dinámico ( $IC_{20}$  -  $IC_{80}$ ) entre 0,15 y 0,85 ng/mL, con un coeficiente de variación entre días ( $n = 8$ ) del 9 %. Se trata de un ensayo muy selectivo que no muestra reactividad cruzada con otras micotoxinas encontradas frecuentemente en maíz como aflatoxinas  $B_1$  y  $B_2$ , toxinas HT-2 y T-2, ácido tenuazónico, ocratoxina A, zearalenona y deoxinivalenol. El bioensayo se ha aplicado al análisis de CPA en muestras de maíz fortificadas obteniéndose un límite de detección de 2,5  $\mu\text{g}/\text{kg}$  y recuperaciones entre el 89 y el 116 %, con coeficientes de variación inferiores al 14,1 %.

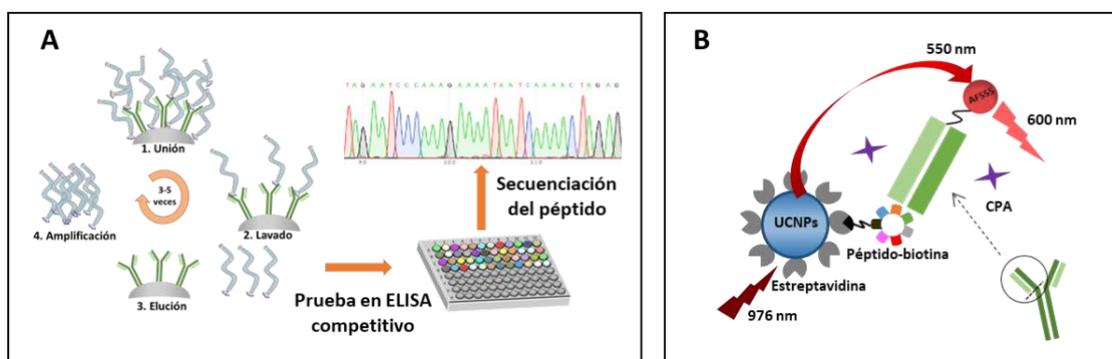


Figura 1. A) Esquema de la obtención de péptidos miméticos de CPA mediante *phage display* y, B) Principio de medida del inmunoensayo homogéneo competitivo para la determinación de CPA.

## Referencias:

- [1] M. Eskola, G. Kos, C. T. Elliot, J. Hajšlová, S. Mayar, R. Krska, *Crit Rev Food Sci Nutr*, 60 (2020), 2773–2789.
- [2] V. Ostry, J. Toman, Y. Grosse, F. Malir, *World Mycotoxin J.*, 11 (2018), 135-148.
- [3] R. Peltomaa, E. Benito-Peña, H. H. Gorris, M. C. Moreno-Bondi, *Analyst*, 146 (2021), 13-32.

# Sistemas químicos dinámicos combinatorios dirigidos por proteínas

Andrea Canal Martín, Ruth Pérez Fernández.

<sup>1</sup>Departamento de biología estructural y química, Centro de Investigaciones Biológicas Margaritas Salas, CIB Margarita Salas-CSIC, Madrid 28040, Spain

andrecan@ucm.es

La metodología tradicional para el descubrimiento de fármacos es un proceso largo basado en la búsqueda de compuestos eficaces para una diana o enfermedad concreta. Sin embargo, la Química Dinámica Combinatoria (DCC) es la metodología química basada en el equilibrio termodinámico, donde los monómeros reaccionan entre sí por enlaces reversibles, generando mezclas de oligómeros (Librería Dinámica Combinatoria, DCL).<sup>1</sup> Esta química es susceptible a estímulos externos como el pH o la adición de una proteína o biomolécula. Por ello, cuando se añade una proteína a la DCL, la distribución de los componentes en el equilibrio termodinámico se desplaza hacia la formación de los compuestos con afinidad por la proteína, siendo estos los ligandos seleccionados por ella. (Fig. 1).<sup>2</sup>

En esta comunicación, se va a presentar el diseño y optimización de DCLs para el Sensor Neuronal de Calcio 1 (NCS1), proteína involucrada en sinaptopatías como el síndrome de Frágil X y la enfermedad de Alzheimer. Además, se desarrollan los estudios de la afinidad proteína-ligando mediante técnicas como fluorimetría y resonancia magnética nuclear. Por último, se describirán los resultados biológicos obtenidos del ligando más prometedor en un modelo animal.<sup>3</sup>

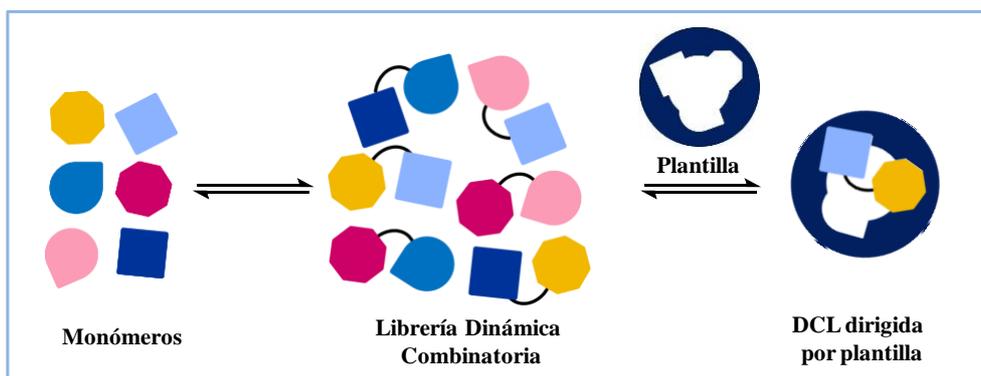


Fig. 1. Esquema general de una librería dinámica combinatoria dirigida por una proteína.

## Referencias:

- [1] M. Mondal; A. K. H. Hirsch, *Chem. Soc. Rev.* 44, (2015), 2455.
- [2] A. Canal-Martín, R. Pérez-Fernández, *ACS Omega*, 5, (2020), 26307.
- [3] A. Canal-Martín, J. Sastre, M. J. Sánchez-Barrena, A. Canales, S. Baldominos, N. Pascual, L. Martínez-González, D. Molero, M. E. Fernández-Valle, E. Sáez, P. Blanco-Gabella, E. Gómez-Rubio, S. Martín-Santamaría, A. Saiz, A. Mansilla, F. J. Cañada, J. Jiménez-Barbero, A. Martínez, R. Pérez-Fernández. *Nat Commun*, 10 (1), (2019), 2798.

# Desarrollo y caracterización funcional mediante técnicas analíticas y -ómicas de nuevos nanosistemas híbridos como herramienta frente a cáncer y tuberculosis

Héctor Estévez Sánchez

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

hestevez@ucm.es

Desde hace décadas, la capacidad del selenio para revertir la oxidación ha sido estudiada y aplicada. Además, desde hace unos años, se ha comprobado que puede impedir la proliferación de las células cancerígenas. Por otro lado, la nanotecnología proporciona nuevas y mejoradas propiedades de los materiales como mayor área específica, mayor reactividad, o propiedades ópticas diferentes [1].

En el presente trabajo de tesis, partimos evaluando si las formas clásicas de selenio (Se (IV), Se (VI), selenocisteína, selenometionina, etc) tienen un efecto distinto al que se produce si empleamos el selenio en su forma nanoparticulada (SeNPs).

Ensayos bioanalíticos preliminares permitieron distinguir un comportamiento diferencial de las SeNPs, por lo que procedimos a profundizar en los mecanismos moleculares a través de los cuales se conseguía arrestar el ciclo celular. Este arresto se produce gracias a la inhibición parcial de Cdk1, una ciclina que regula la progresión del ciclo celular hacia la mitosis [2]. Además, los ensayos *in vivo* corroboraron las conclusiones *in vitro*, ya que, en un ensayo con ratones C57BL6 a los que se le indujeron tumores subcutáneos, todos los tumores se vieron reducidos tras la administración de SeNPs.

Gracias a estos resultados, el planteamiento siguiente fue vehiculizarlas para, por un lado se evite su efecto citotóxico sobre células sanas, y por otro, maximizar su potencial de acción en la zona tumoral. Sintetizamos y caracterizamos un nanosistema que cumpliera ciertas condiciones: biocompatibilidad, selectividad, presencia de agente de targeting efectivo y posibilidad de nuclear las SeNPs en el mismo. El nanosistema se diseñó con una estructura de mesoporosa de sílice, transferrina como proteína de targeting y a su vez estructura para la inmovilización de SeNPs. Los ensayos para evaluar el potencial del nanosistema resultaron reveladores ya que, además de comprobar su efectividad, aportaron mucha información sobre otros mecanismos moleculares en los que se fundamenta su acción.



## Referencias:

- [1] E. Spyratou, M. Makropoulou, E.A. Mourelatou, C. Demetzos. *Cancer letters*, 327, (2012), 111-122.
- [2] H. Estévez, J.C. Garcia-Lidon, J.L. Luque-García, C. Camara. *Colloids and surfaces. B, Biointerfaces* 122 (2014), 184-193.

# Segunda sesión

**(11:30-13:00)**

Moderadores:

Pedro Recio Ibáñez

María José Mayoral Muñoz

# Aplicación de fluidos supercríticos en formulaciones farmacéuticas para administración pulmonar y tópica

***Helga Ruiz<sup>1</sup>, Marzena Pepczynska<sup>1</sup>, Eduardo Pérez<sup>1</sup>, Lourdes Calvo<sup>2</sup>, Albertina Cabañas<sup>1</sup>***

*<sup>1</sup>Departamento de Química Física I, <sup>2</sup>Departamento de Ingeniería Química y Materiales, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Av. Complutense s/n, 28040, Madrid  
Complutense de Madrid, Av. Complutense s/n, 28040, Madrid*

helgakar@ucm.es

La administración de fármacos ofrece grandes desafíos para la investigación, siendo el objetivo principal mejorar la biodisponibilidad, evitando o disminuyendo los efectos adversos en los pacientes. La biodisponibilidad de los productos farmacéuticos en forma sólida depende en gran medida del tamaño, la distribución del tamaño de partícula y la morfología de las partículas.

Entre las vías de administración que se emplean actualmente, la administración pulmonar de fármacos tiene ventajas sobre la terapia administrada sistémicamente, ya que evita el metabolismo de primer paso en el hígado y la posibilidad de inactivación enzimática, y permite la administración de concentraciones más altas de fármacos a los pulmones para mejorar la eficacia y reducir los efectos secundarios [1].

Con relación a la vía de administración tópica, los apósitos para heridas cargados de fármacos antimicrobianos han demostrado ser opciones viables para mejorar el proceso de curación, reducir la colonización e infección bacteriana de las heridas, y por tanto el riesgo de infecciones mortales [2].

En los últimos años la utilización del CO<sub>2</sub> supercrítico en la preparación de fármacos ha atraído mucho interés de la industria farmacéutica [3]. Cuando el CO<sub>2</sub> se calienta por encima de su punto crítico 31,0° y 7,38 Mpa, se convierte en un fluido supercrítico. Los fluidos supercríticos tienen propiedades intermedias entre las de los gases y los líquidos, pueden disolver sustancias como líquidos, pero penetrar materiales como gases. La moderada temperatura crítica del CO<sub>2</sub> lo hace adecuado para procesar compuestos sensibles al calor. Además, es barato, no inflamable, inerte, estable, inocuo y está considerado disolvente GRAS. Es un gas en condiciones normales, y puede ser eliminado bajando la presión, con posibilidad de ser reciclado, de manera que no deja residuos de solvente en el producto [4].

En este trabajo se presenta la aplicación del CO<sub>2</sub> supercrítico en (a) la micronización del fármaco ciprofloxacino (antibacteriano de amplio espectro) para su administración pulmonar, utilizando la técnica SAS (Supercritical AntiSolvent) y (b) la preparación de una formulación para administración tópica, utilizando el CO<sub>2</sub> supercrítico para impregnar sustancias activas con propiedades antimicrobianas en apósitos para heridas, preparados con polímeros naturales. Las formulaciones preparadas en CO<sub>2</sub> supercrítico presentan muy buenas propiedades. En todos los casos materiales preparados en CO<sub>2</sub> son estériles.

## Referencias

- [1] Shetty, N., et al., *Physical stability of dry powder inhaler formulations*. Expert Opinion on Drug Delivery, 2020. **17**(1): p. 77-96.
- [2] Negut, I., V. Grumezescu, and A.M. Grumezescu, *Treatment Strategies for Infected Wounds*. Molecules, 2018. **23**(9).
- [3] Ryan, K. and L. Padrela, *From batch to continuous — New opportunities for supercritical CO<sub>2</sub> technology in pharmaceutical manufacturing*. European Journal of Pharmaceutical Sciences, 2019. **137**: p. 104971.
- [4] Poletto, P., et al., *Compressed fluids and phytochemical profiling tools to obtain and characterize antiviral and anti-inflammatory compounds from natural sources*. TrAC - Trends in Analytical Chemistry, 2020. **129**.

# Síntesis sostenible para la obtención de compuestos con enlace metal-metal

Aarón Terán, Ana E. Sánchez Peláez y Santiago Herrero

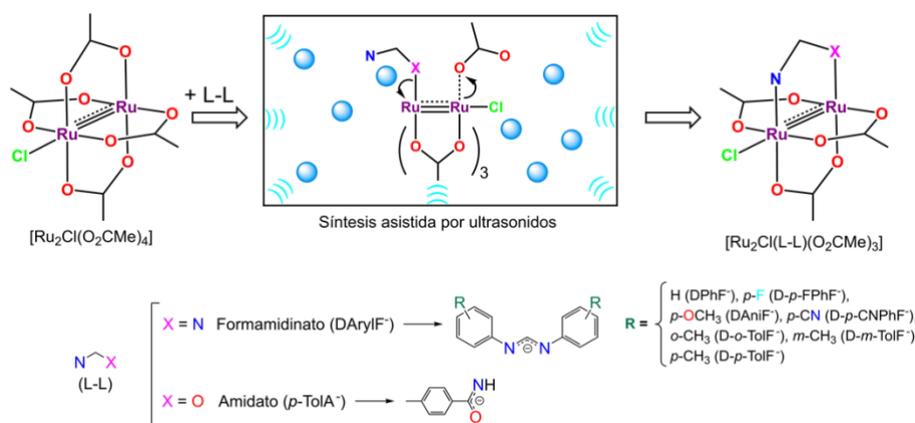
Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid,  
Av. Complutense s/n, 28040, Madrid

aaronter@ucm.es

El concepto de sostenibilidad hace referencia a poder satisfacer las necesidades presentes sin comprometer las del futuro. Este es un tema clave en todas las áreas de la química, donde lo que se pretende es conseguir una transferencia tecnológica del laboratorio a la industria diseñando procesos lo más respetuosos posibles con el medio ambiente. Ahorrar energía mediante el empleo de métodos de activación de las especies químicas alternativos al suministro de calor, es uno de los aspectos que ha suscitado más interés. Entre esos métodos destaca el uso de microondas, ultrasonidos, electro-, foto- y mecano-química, y las altas presiones.<sup>1</sup>

En la última década el uso de estos métodos se ha empezado a estudiar incluso en compuestos con enlace metal-metal. En concreto, se ha empleado de manera muy eficiente la síntesis solvothermal asistida por microondas para la obtención de nuevas especies tetrasustituidas de dirrutenio ( $Ru_2^{5+}$ ), con fórmula general  $[Ru_2Cl(L-L)_4]$  (donde L-L es un ligando del tipo *O,O'*-dador, *N,N'*-dador o *N,O*-dador).<sup>2</sup> Sin embargo, este método no permite la obtención de especies con grados de sustitución parcial,  $[Ru_2Cl(L-L)_x(O_2CMe)_{4-x}]$  ( $x = 1, 2, 3$ ). Estos compuestos son muy interesantes como productos de partida para aplicaciones biotecnológicas o por su potencial como catalizadores en medio acuoso. Sin embargo, se conocían apenas varios ejemplos debido a que siguiendo los métodos tradicionales se forman mezclas de productos intermedios que requieren tortuosos procesos de purificación para aislarlos puros.

La síntesis asistida por ultrasonidos que se muestra en esta comunicación nos ha permitido obtener las especies monosustituidas, con fórmula  $[Ru_2Cl(L-L)(O_2CMe)_3]$  (donde L-L corresponde con un ligando formamidinato, DArylF<sup>-</sup>, o amidato, *p*-TolA<sup>-</sup>), de manera sencilla y eficiente.<sup>3</sup> Además, el empleo de etanol como disolvente de síntesis, la reducción de tiempo, energía y recursos, y el aumento considerable del rendimiento de reacción hace de esta técnica la mejor opción para obtener este tipo de especies de manera sostenible. Para la caracterización y el estudio de las propiedades de estas especies se ha utilizado, la espectrometría de masas, la difracción de rayos X, la ciclovoltaerometría y varias técnicas espectroscópicas.



## Referencias:

- [1] Török, B. and Schäfer, C. *Nontraditional Activation Methods in Green and Sustainable Applications*, Advances in Green and Sustainable Chemistry, 2021.
- [2] González-Prieto, R., Herrero, S., Jiménez-Aparicio, R., Morán, E., Prado-Gonjal, J., Priego, J. L. and Schmidt, R. "13. Microwave-assisted solvothermal synthesis of inorganic compounds (molecular and non molecular)". Microwave Chemistry, edited by Giancarlo Cravotto and Diego Carnaroglio, Berlin, Boston: De Gruyter, 2017.
- [3] Terán, A., Cortijo, M., Gutiérrez, Á., Sánchez-Peláez, Ana E., Herrero, S., Jiménez-Aparicio, R. *Ultrasoun. Sonochem.* 80, (2021), 105828.

# Nuevos dispositivos de detección para cáncer y enfermedades cardiovasculares

Anabel Villalonga Chico

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

anabelvi@ucm.es

Las enfermedades cardiovasculares y el cáncer se encuentran dentro de las diez principales causas de mortalidad a nivel mundial. La rápida y eficaz detección y monitorización de dichas enfermedades proporcionaría el establecimiento de adecuadas estrategias terapéuticas, favoreciendo una mayor esperanza de vida y una mejora en la calidad de la misma. Por ello, es imprescindible el desarrollo de nuevos sistemas analíticos que faciliten dicho objetivo. En este contexto, los biosensores electroquímicos constituyen una valiosa alternativa a los métodos clásicos de análisis clínico, pues estos dispositivos son altamente sensibles y específicos, portables, miniaturizados, de bajo coste, y emplean pequeños volumen de muestra.

Durante esta tesis doctoral se han diseñado y desarrollado nuevos dispositivos electroanalíticos para la detección específica de diferentes biomarcadores de enfermedades cardiovasculares y de cáncer. Para ello, se han construido novedosas plataformas de biosensorización, basadas en electrodos serigrafados modificados con nanomateriales electroconductores y funcionalizados con aptámeros como elemento de reconocimiento. Varios de estos biosensores se basan en el empleo de nuevos elementos de biorreconocimiento y señalización ensamblados con nanomateriales Janus.

Con estos dispositivos se han detectado de forma rápida, específica y eficaz, los siguientes biomarcadores: antígeno carcinoembrionario (CEA), antígeno prostático específico (PSA), proteína C-reactiva (CRP), troponina I (cTnI) y trombina (TBA) (Figura 1). [1, 2]

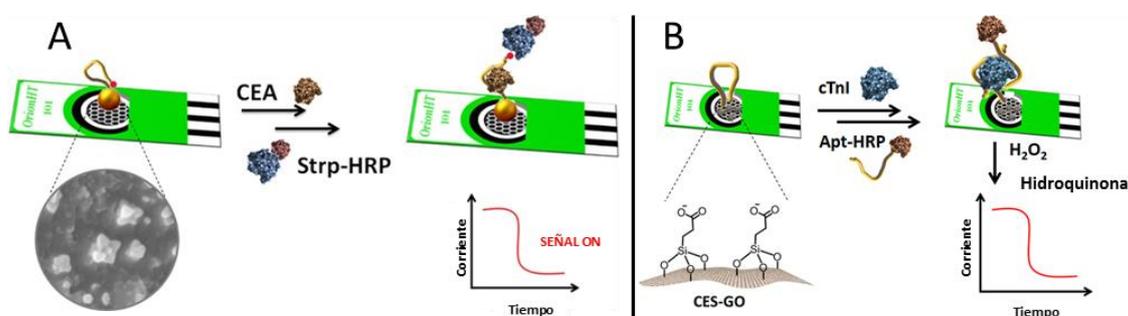


Figura 1: Representación esquemática de biosensores electroquímicos para la detección de CEA (A) y cTnI (B).

## Referencias:

- [1] A. Villalonga, B. Vegas, G. Paniagua, M. Eguílaz, C. Parrado, G. Rivas, P. Díez, R. Villalonga, *J. Electroanal. Chem*, 877, (2020), 114511.
- [2] A. Villalonga, I. Estabiel, A.M. Pérez-Calabuig, B. Mayol, C. Parrado, R. Villalonga, *Biosens. Bioelectron*, 183, (2021), 113203.

# Hidrogeles sensibles a temperatura y pH. Ajuste de la respuesta a los estímulos

*Pedro Liz Basteiro*

*Instituto de Ciencia y Tecnología de Polímeros, ICTP-CSIC, Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid (España)*

pedroliz@ictp.csic.es

En este trabajo se muestran los últimos avances de mi trabajo de tesis centrados en hidrogeles inteligentes sensibles al pH y a la temperatura.

Por un lado, en este trabajo se ha diseñado, desarrollado y evaluado una resina fotopolimerizable que permite obtener piezas con alta definición en una impresora 3D de estereolitografía (SLA), empleando la mínima cantidad de entrecruzante posible. Estas piezas impresas son sensibles al PH y, tras meterlas en agua básica, se hidrolizan y se disuelven, por lo que nos permite crear moldes sacrificables.

Estas piezas pueden ser moduladas para tener unas propiedades mecánicas diferentes dependiendo de las propiedades que requiera el molde sacrificable, es decir, un material más rígido, más elástico, flexible, etc.... Se han llevado a cabo pruebas de concepto usando los materiales como moldes de polímeros termoplásticos fundidos, en fotocurado para obtener hidrogeles y en curado de siliconas.

Además, sustituyendo el % en peso del entrecruzante degradable de la resina por un entrecruzante estable, es posible imprimir mediante la misma técnica hidrogeles, en los cuales se mantiene la definición obtenida y podemos variar su hinchamiento.

Por otro lado, nuestro grupo ha desarrollado una tecnología que permite la producción de hidrogeles termo sensibles basados en vinilcaprolactama. Esta termo sensibilidad está relacionada con cambios en el comportamiento del hidrogel en función de la temperatura. La termo sensibilidad de estos hidrogeles está relacionada con una temperatura de transición llamada "Volume Phase Transition Temperature" (VPTT), la cual separa estados con diferente hidrofilia/hidrofobia. La termo sensibilidad de los hidrogeles es útil para cultivo celular hasta confluencia a 37°C (por encima de la VPTT), y puede promover el despegado celular no agresivo simplemente por bajada de temperatura del medio. Es interesante que el despegado tenga lugar en forma de una monocapa, preservando las uniones célula-célula y la matriz extracelular.

Además, se han preparado redes poliméricas por fotopolimerización con una vinil lactama más hidrofílica, la vinilpirrolidona (VP), con el objetivo de aumentar la VPTT mediante una vía controlada. Se ha evaluado las propiedades de estos hidrogeles, así como su transparencia, termo sensibilidad y biocompatibilidad. Asimismo, se está explorando la posibilidad de usar estas formulaciones para impresión 3D por SLA.

## Referencias:

[1] E. Martínez-Campos, A. Santos-Coquillat, M.E. Pérez-Ojeda, A. Civantos, C. Elvira, H. Reinecke, C. García, V. Ramos, J. Rodríguez-Hernández, A. Gallardo, *European Polymer Journal*. 103 (2018), 400-409.

# Efectos de la síntesis y la cristalización sobre la distribución de cationes en una familia de MOFs basados en tierras raras

Raluca L. Vasile,<sup>1</sup> N. Nemes,<sup>2</sup> I. Puente-Orench,<sup>3</sup> J. L. Martínez,<sup>1</sup> V. de la Peña-O'Shea,<sup>4</sup> E. Gutiérrez,<sup>1</sup> M. A. Monge<sup>1</sup> y F. Gándara<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, C/ Sor Juana Inés de la Cruz, 3, 28017, Cantoblanco, Madrid

<sup>2</sup>Facultad de Ciencias Físicas, Universidad Complutense de Madrid, Pl. Ciencias 1, 28040, Madrid

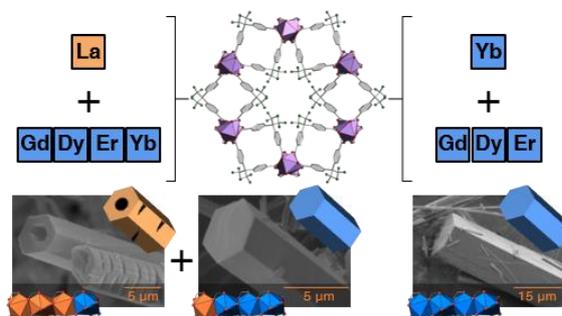
<sup>3</sup>Instituto Laue-Langevin, 71 avenue des Martyrs, 38042, Grenoble

<sup>4</sup>Instituto IMDEA Energía, Av. Ramón de La Sagra 3, 28935, Móstoles, Madrid

raluca.vasile@csic.es

A lo largo de los años, en la búsqueda de materiales multifuncionales innovadores, las redes metal-orgánicas (*metal-organic frameworks*, MOFs)<sup>[1]</sup> se han convertido en el objeto de estudio de numerosos grupos de investigación. Se trata de una clase de materiales híbridos porosos formados por centros o agregados metálicos unidos mediante ligandos orgánicos, y las características químicas y geométricas de estas unidades de construcción determinan la estructura cristalina del material, y por tanto les confiere una variedad estructural y versatilidad química difícil de encontrar en otra clase de materiales. Debido a estas características, los MOF encuentran aplicaciones en diversos campos, como la adsorción y separación de gases o la catálisis<sup>[2]</sup>. Al incorporar diferentes grupos funcionales o iones metálicos en la misma estructura sin alterar su conectividad, se genera un MOF multivariable (MTV-MOF), y generalmente sus propiedades se ven modificadas e incluso mejoradas. En estudios previos<sup>[3]</sup> se ha observado que la combinación inicial de metales da lugar a diferentes tipos de secuencias atómicas dentro de un MOF, ya que los cationes pueden reaccionar de forma similar con los ligandos orgánicos, generando MTV-MOFs multimetálicos, o pueden competir simultáneamente, dando lugar a diferentes fases cristalinas.

Partiendo de estas observaciones, escogimos la familia de MOFs RPF-4,<sup>[4]</sup> basada en cadenas de átomos de tierras raras enlazados mediante los grupos carboxilato del ligando orgánico. Tras analizar diferentes combinaciones y proporciones iniciales de lantánidos, encontramos que en ninguno de los casos se altera la topología del MOF, y para algunas combinaciones de tierras raras las proporciones iniciales coinciden con la composición del *bulk* de la reacción. Sin embargo, para ciertas combinaciones de metales, aunque el *bulk* parece ser homogéneo, se observa una coexistencia de cristales isoreticulares con diferente composición y ligeras diferencias en la morfología. Estos resultados parecen apuntar a un efecto predominante de ciertos cationes en el mecanismo de cristalización, tanto por efectos termodinámicos como cinéticos.



## Referencias:

[1] G.E Gomez et al., *Dalton Trans*, 47, (2018), 1808.

[2] A. García-Sánchez, M. Gómez-Mendoza, M. Barawi, I. Villar-García, M. Liras, F. Gándara, V. de la Peña O'Shea, *J. Am. Chem. Soc.*, 142, (2020), 318.

[3] C. Castillo-Blas, V. de la Peña O'Shea, I. Puente-Orench, J. Romero de Paz, R. Sáez-Puche, E. Gutiérrez-Puebla, F. Gándara, A. Monge, *Sci. Adv.*, 3,7, (2017), e1700773.

[4] F. Gándara, V. de la Peña-O'shea, F. Illas, N. Snejko, E. Gutiérrez-Puebla, M. A. Monge, *Inorg. Chem*, 48, (2009), 4707.

# Estudio multi-ómico para la evaluación del potencial de las nanopartículas de rodio como agente fotosensibilizante en terapia fotodinámica del cáncer

Andrés Machuca Marcos<sup>1</sup>, Estefanía García Calvo<sup>1</sup>, Daniela Santos Anunciação<sup>2</sup>, Jose Luis Luque García<sup>1</sup>

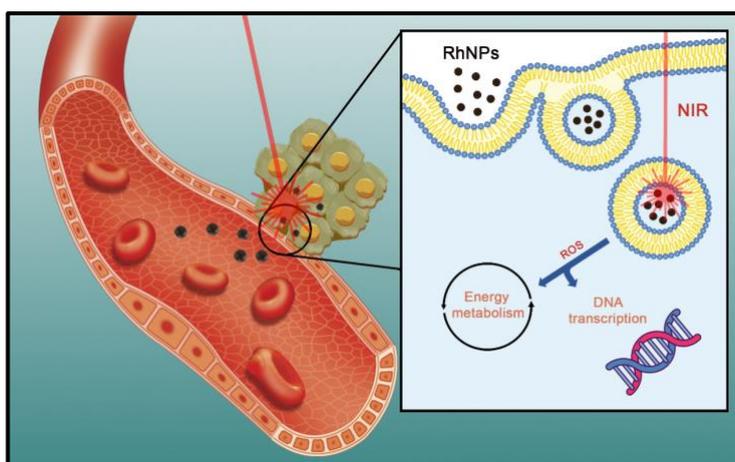
<sup>1</sup>Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Av. Complutense s/n, 28040, Madrid

<sup>2</sup>Instituto de Química y Biotecnología, Campus A. C. Simões, Universidad Federal de Alagoas, Maceió-AL 57072-900, Brasil

amachu01@ucm.es

En la actualidad, los nanomateriales están captando un gran interés en la mayoría de áreas de investigación debido a las propiedades únicas que les confiere su naturaleza nanométrica. Un ejemplo de ello es la terapia fotodinámica, la cual combina dos componentes, luz y un agente fotosensibilizante, que por separado son inocuos pero que al combinarlos son capaces de generar una respuesta citotóxica mediante la producción de especies reactivas de oxígeno. De esta forma se consigue una eliminación más selectiva con respecto a las células tumorales en comparación con otros tratamientos convencionales. Aunque habitualmente se entendía como agente fotosensibilizante compuestos orgánicos del tipo porfirinas u otros tintes, recientemente se ha descubierto que algunos tipos de nanopartículas metálicas son capaces de generar un efecto similar cuando son irradiadas con la longitud de onda adecuada [1]. Este es el caso de las nanopartículas de rodio (RhNPs), cuyo interés científico ha estado centrado en sus aplicaciones catalíticas a lo largo de los años. Sin embargo, actualmente se sabe que estas nanopartículas generan efecto fotodinámico al ser irradiadas con luz infrarroja.

En este trabajo se ha llevado a cabo la síntesis y caracterización de nanopartículas de rodio y la evaluación de su potencial uso en terapia fotodinámica empleando la línea celular HeLa como modelo *in vitro*. Los resultados muestran la baja toxicidad de las nanopartículas en un amplio rango de concentraciones, así como una disminución en la viabilidad celular cuando son combinadas con radiación infrarroja [2]. Además, se han llevado a cabo diferentes ensayos bio-analíticos para la elucidación de los mecanismos biomoleculares a través de los cuales se produce la apoptosis y muerte celular. Mediante la combinación de los perfiles transcriptómicos y proteómicos de las células tratadas se ha conseguido establecer un mecanismo de actuación a través de alteraciones del estado redox intracelular y de diferentes rutas de obtención de energía como la  $\beta$ -oxidación de los ácidos grasos y la homeostasis del ATP [3].



## Referencias:

- [1] J. Chen, T. Fan, Z. Xie, Q. Zeng, P. Xue, T. Zheng, Y. Chen, X. Luo, H. Zhang, *Biomaterials*, 237, (2020).
- [2] A. Machuca, E. García-Calvo, D.S. Anunciação, J.L. Luque-García, *Chemistry – A European Journal*, 26, (2020), 34.
- [3] A. Machuca, E. García-Calvo, D.S. Anunciação, J.L. Luque-García, *Pharmaceutics*, 13, (2021), 10.

# Tercera sesión

**(15:00-16:30)**

Moderadores:

Noemí Encinas García

Roberto Álvarez-Fernández García

# Caracterización de los cambios nanoestructurales producidos por la irradiación y la deformación en la susceptibilidad al agrietamiento intergranular en 316L

Silvia Guerra Rodríguez <sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>División de Materiales de Interés Energético, CIEMAT, Av.Complutense, 40, 28040, Madrid

<sup>2</sup> Departamento de Ingeniería Química y de Materiales, Facultad de Ciencias Químicas, UCM, Pl. de las Ciencias, 2, 28040, Madrid

silvia.guerra@ciemat.es, siguerra@ucm.es

El trabajo que se presenta consiste en la caracterización microestructural del acero inoxidable 316L sometido a irradiación con partículas energéticas y a deformación. El objetivo es contribuir a la comprensión de los procesos de deformación que ocurren en el material irradiado y que conducen a la deformación localizada en aceros inoxidables austeníticos y a la posible susceptibilidad al agrietamiento intergranular. El SS 316L, debido a sus buenas propiedades mecánicas y su resistencia frente a la corrosión, se ha empleado frecuentemente para la fabricación de componentes internos de reactores nucleares. En este trabajo se ha estudiado en varias condiciones: (a) en estado de recepción, (b) implantado con iones helio y (c) irradiado con iones hierro. Además se ha sometido a distintos ensayos mecánicos en estas tres condiciones con el objetivo de evaluar el efecto de la irradiación en la deformación localizada de este material.

Las irradiaciones se han realizado en dos grandes instalaciones diferentes, siempre tras la preparación y aprobación de una propuesta. La implantación con He se realizó en el CEMHTI (Orléans, Francia), con iones He de energía 28 MeV, hasta una dosis de  $3.4 \times 10^{13}$  iones/cm<sup>2</sup> y a una temperatura de implantación de 300°C; mientras que la irradiación con iones Fe se realizó en el IBC del HZDR (Dresde, Alemania), con iones Fe de 5MeV, hasta una dosis de  $6.65 \times 10^{15}$  iones/cm<sup>2</sup> y con una temperatura de irradiación de 200°C. Estas condiciones fueron determinadas gracias al programa de simulación SRIM y la experiencia en proyectos anteriores similares, que permitieron tener una idea de lo que se esperaba conseguir con cada una de estas irradiaciones a nivel de tipo y densidad de defectos inducidos por la irradiación.

Los ensayos mecánicos a los que se ha sometido el material en las diferentes condiciones mencionadas, son de dos tipos: (a) ensayos de ritmo de deformación lenta (SSRT), que han sido realizados en un ambiente inerte, a una temperatura de 300°C en una instalación que permite el manejo de material activo y (b) ensayos de “in-situ straining” (ISS), realizados en el interior de un microscopio electrónico de transmisión (TEM). Estos ensayos son complementarios entre sí, ya que los SSRT proporcionan los datos de tensión y deformación soportados por el material, que nos dan una idea de la dureza y ductilidad del material; y los ISS permiten la observación directa de los procesos de deformación que se producen en el material al aplicar una carga. Todos los ensayos se han realizado de manera interrumpida, parando a distintos niveles de deformación y hacer posible el examen microestructural ex-situ y observar la evolución microestructural a diferentes niveles de deformación mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), y retomándolos después en el mismo punto para continuar los experimentos de deformación, tanto los SSRT como los ISS.

El examen microestructural de las muestras ensayadas, antes y después de realizar cada ensayo, se ha realizado con SEM y TEM. Este estudio sistemático ha permitido observar y determinar la evolución de la microestructura deformada y el efecto que tienen las diferentes irradiaciones en el acero 316L y, por tanto, identificar, describir y clasificar la microestructura resultante en los ensayos de deformación, como la estructura y distribución de las dislocaciones o la presencia o no de canales libres de defectos.

Los ensayos SSRT interrumpidos dieron lugar a la aparición de escalones superficiales cuyos parámetros se han medido en las diferentes etapas de la deformación, observándose que la anchura de los escalones surgidos por efecto de la deformación aumenta debido a los defectos que induce la implantación de iones helio en el material base. Por otro lado, mediante los ISS se han observado en tiempo real las interacciones dislocación-defecto, dislocación-borde de grano y dislocación-dislocación tanto en el material base como en el material irradiado con iones Fe. Los resultados obtenidos se presentarán y discutirán.

# Cálculos DFT para estudiar la relación estructura-composición-propiedades en materiales con aplicaciones en energía

Marianela Gómez Toledo

Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Av. Complutense S/N, 28040, Madrid

mgom09@ucm.es

Los cálculos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) permiten estudiar la relación existente entre la estructura cristalina, la composición y las propiedades de los sólidos. A través de esta teoría puede resolverse la estructura electrónica de un material (incluso antes de que sea sintetizado) y examinar, por lo tanto, las propiedades electrónicas, magnéticas, ópticas o catalíticas del mismo. Entre los muchos sólidos que han sido analizados desde esta aproximación [1], se encuentran los materiales con estructura tipo perovskita ( $ABX_3$ ) y con estructuras derivadas como pueden ser las fases de Ruddlesden-Popper, las perovskitas dobles o la brownmillerita. Muchos de los materiales son óxidos mixtos de metales de transición y presentan particularidades que los hacen atractivos para su utilización en dispositivos que pueden generar o transformar energía. Algunas de estas aplicaciones son la producción de hidrógeno a partir de la disociación fotocatalítica de la molécula de agua [2] o su uso como electrodo de aire en celdas de combustible de óxido sólido (SOFC) [3]. Ambas aplicaciones involucran al  $H_2$ , que está considerado como el vector energético del futuro, cuya utilización tiene como fin una mejora medioambiental en el sector de la energía.

En el marco de esta Tesis Doctoral, se han realizado cálculos con distintas familias de óxidos con las características nombradas con el objetivo final de optimizar y/o descubrir materiales con potencial aplicación en dichas tecnologías. Los cálculos permiten entender algo fundamental como es la relación estructura-composición-propiedades de los materiales. Entre los sólidos estudiados se encuentra el  $Sr_2Ta_2O_7$  y sus fases derivadas, cuya estructura electrónica es de vital importancia en su actividad fotocatalítica. Por otra parte, la familia  $YSr_2Cu_2FeO_{7+\delta}$  presenta particularidades electrónicas que suponen un reto para los cálculos DFT, por lo que su estudio a través de esta metodología puede sentar las bases para la utilización de la misma en la investigación de otros materiales igualmente complejos.



## Referencias:

- [1] A. Jain, *APL Materials*, 1, (2013), 011002.
- [2] WJ. Yin, *Energy Environ. Sci.*, 12, (2019), 442-462.
- [3] P. Ding et al, *J. Phys. Mater.*, 4, (2021), 022002.

# Desarrollo y caracterización mediante estrategias analíticas y -ómicas de nuevos nanosistemas híbridos basados en sílice mesoporosa y plata como herramienta frente a cáncer

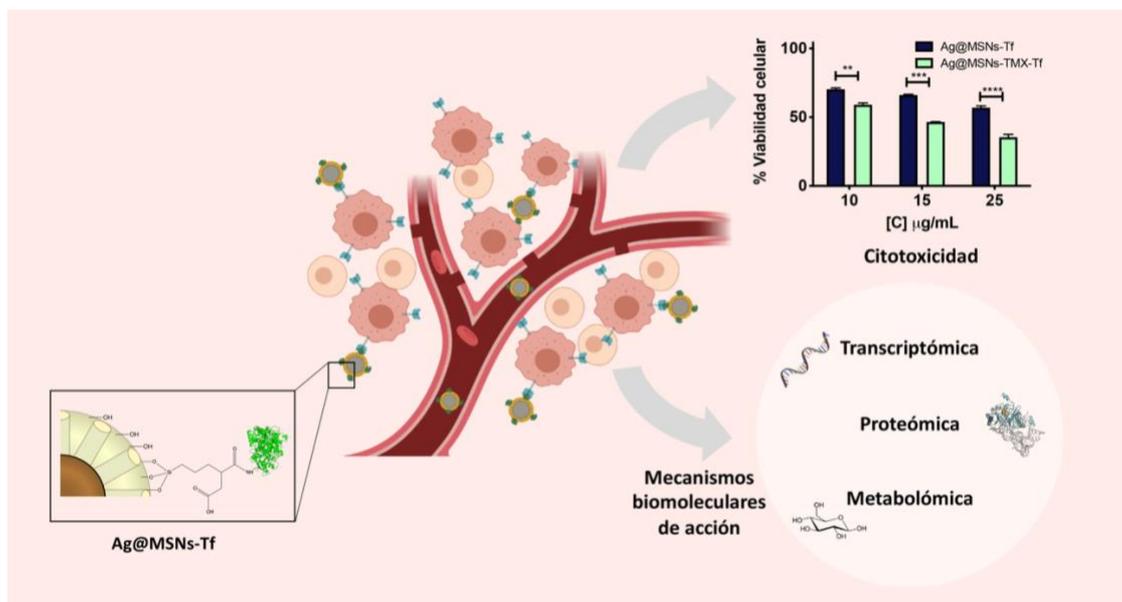
Guillermo Aragonese Cazorla

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

guiarago@ucm.es

Uno de los principales problemas de las terapias contra el cáncer basadas en la quimioterapia es la falta de selectividad de los compuestos administrados. Como consecuencia, estos fármacos antitumorales se distribuyen de forma no específica por todo el cuerpo, causando efectos secundarios no deseados. En este sentido, el uso de nanopartículas de sílice mesoporosa (MSNs) permite solucionar estos problemas gracias, entre otras cosas, a la posibilidad de funcionalizar su superficie con ligandos que se unen selectivamente a células tumorales. Además, su elevada área superficial y volumen de poro las hacen aptas para ser empleadas como sistemas de transporte de fármacos [1]. Por otro lado, en los últimos años, el empleo de nanopartículas de plata (AgNPs) como agentes antitumorales se ha incrementado, ya que se han demostrado sus elevadas propiedades citotóxicas [2]. Sin embargo, el uso de estos agentes es limitado debido a su tendencia a agregarse y a su potencial acción citotóxica en células sanas.

En la presente Tesis Doctoral, se han desarrollado nanosistemas híbridos de tipo core-shell basados en un núcleo de plata rodeado de sílice mesoporosa en cuya superficie se ha anclado transferrina (Tf) como vector hacia células tumorales (Ag@MSNs-Tf) [3]. Este nanosistema se ha mejorado, a su vez, introduciendo tamoxifeno en los poros de la sílice para aprovechar la combinación de ambos agentes citotóxicos (Ag@MSNs-TMX-Tf). El potencial citotóxico de dichos nanosistemas se ha evaluado a través de diversos ensayos bioanalíticos, demostrando su gran potencial antitumoral. Asimismo, recurriendo a diversas técnicas -ómicas tales como la proteómica, la transcriptómica o la metabolómica ha sido posible elucidar gran parte de los mecanismos de acción de dichos nanosistemas.



## Referencias:

- [1] M. Manzano, M. Vallet-Regí, *Advanced Functional Materials*, 30, 2020, 1902634.
- [2] C. Ong, J.Z.Z. Lim, L.-Y. Yung, B.-H. Bay, *Current Medicinal Chemistry*, 20, 2013, 772-781.
- [3] G. Aragonese-Cazorla, J. Serrano-Lopez, I. Martinez-Alfonzo, M. Vallet-Regí, B. Gonzalez, J.L. Luque-Garcia, *Inorganic Chemistry Frontiers*, 8, 2021, 2967-2712.

# Irradiación de nanopartículas de oro con pulsos láser ultrarrápido

Olivia Borrell Grueiro

Departamento de Química Física, Universidad Complutense de Madrid  
Avenida Complutense s/n, Madrid 28040, Spain

oborrell@ucm.es

Las nanovarillas de oro (NR), nanopartículas pseudounidimensionales en forma de varilla (NP), se han convertido en uno de los materiales florecientes en los últimos años debido a su forma anisotrópica y propiedades plasmónicas ajustables [1]. Bajo la irradiación de luz, las nanopartículas de metales nobles, particularmente aquellas que se caracterizan por una resonancia de plasmón superficial localizada, comúnmente conocidas como nanopartículas plasmónicas, generan un fuerte campo electromagnético, portadores calientes excitados y calentamiento fototérmico. La irradiación de conjuntos de esferas y nanovarillas con pulsos de láser ultracortos, produciendo estructuras que son muy difíciles de obtener por otros métodos [2]. La respuesta óptica de estos conjuntos muestra varios picos que surgen de la interacción de los modos plasmónicos de las partículas individuales, ofreciendo así una gran flexibilidad para controlar la energía depositada en las partículas individuales. La selección juiciosa de la longitud de onda y la fluencia de los pulsos láser permite un control fino sobre los cambios producidos: las partículas pueden fundirse y/o los enlaces orgánicos pueden escindirse. De esta forma, es posible generar estructuras “a la carta” con un grado de control inigualable por otros protocolos sintéticos. El método se ejemplifica con nanopartículas de oro, pero se puede implementar fácilmente sobre partículas compuestas por diferentes metales, ampliando considerablemente el abanico de posibilidades.

Figura

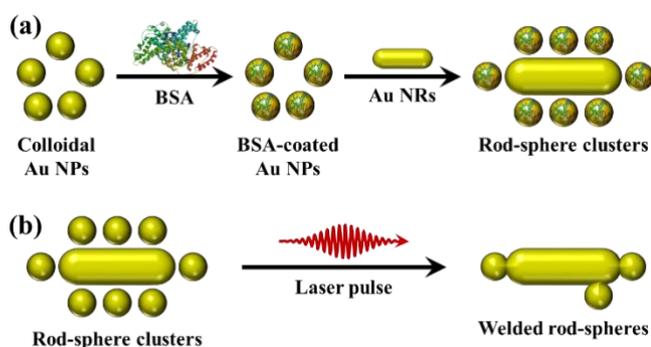


Figura 1: Representación esquemática de (a) síntesis de nanoclusters de esferas de varillas de Au y (b) soldadura de esos nanoclusters por irradiación con pulsos de láser fs.

## Referencias:

- [1] Pablo Díaz-Núñez,<sup>†</sup> Guillermo González-Rubio,<sup>‡,§</sup> Alejandro Prada,<sup>†,⊥</sup> Jesús González Izquierdo,<sup>||</sup> Antonio Rivera,<sup>†</sup> Luis Bañares,<sup>‡,||</sup> Andrés Guerrero-Martínez,<sup>‡</sup> and Ovidio Peña-Rodríguez\*,<sup>†</sup> J. Phys. Chem. C 2018, 122, 19816–19822
- [2] Pablo Díaz-Núñez,<sup>‡</sup> Sabrina Thomä,<sup>b,c</sup> Guillermo González-Rubio,<sup>d</sup> Olivia Borrell-Grueiro,<sup>d</sup> Roland P. M. Höller,<sup>b,c</sup> Munish Chanana,<sup>b,c</sup> David Garoz,<sup>e</sup> Luis Bañares,<sup>d,f</sup> Elena Junquera,<sup>d</sup> Andrés Guerrero-Martínez,<sup>\*d</sup> Antonio Rivera,<sup>\*a,g</sup> and Ovidio Peña-Rodríguez<sup>\*a,g</sup>, Nanophotonics 2021; 10(12): 3153–3159

# Efecto de las deformaciones mecánicas en la actividad catalítica de metales y compuestos intermetálicos para la economía del hidrógeno

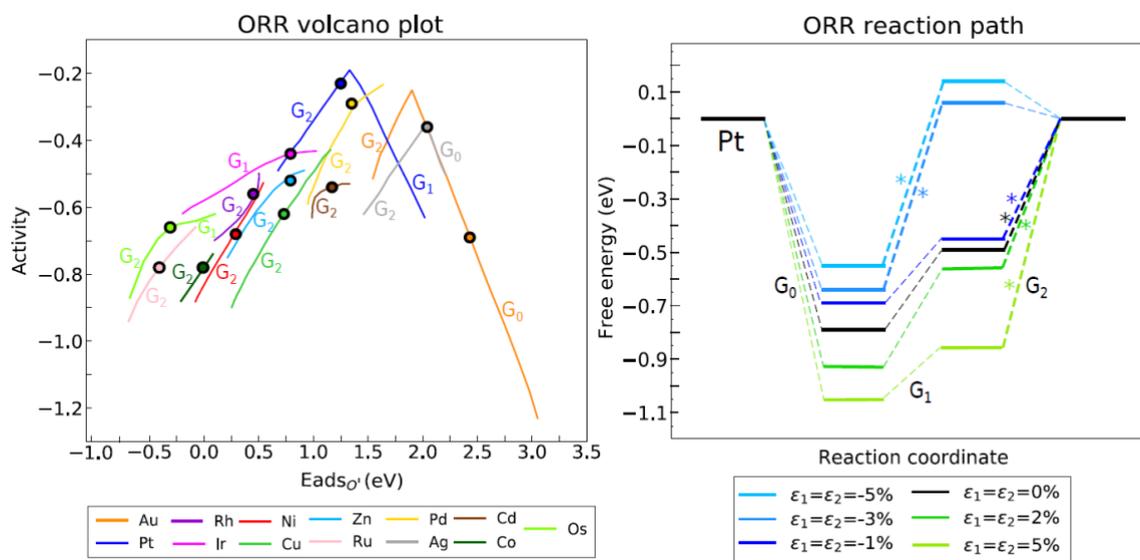
Carmen Martínez-Alonso<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Instituto IMDEA Materiales, C/Eric Kandel 2, 28906 – Getafe, Madrid, España.

<sup>2</sup>Departamento de Química Inorgánica, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, España.

carmem23@ucm.es

La producción a escala de hidrógeno es uno de los pilares sobre los que se sustenta el futuro de la energía limpia en Europa. Este proceso depende de dos reacciones críticas: la reacción de evolución del hidrógeno (HER) y la reacción de reducción de oxígeno (ORR). En este trabajo, estudiamos el efecto de las deformaciones mecánicas en la actividad catalítica de metales de transición y compuestos intermetálicos para la HER y la ORR a través de cálculos de estructura electrónica utilizando la teoría del funcional de la densidad (DFT). Mediante nuestras simulaciones, obtuvimos la energía de adsorción para cada uno de los intermedios de reacción  $\text{-H}$ ,  $\text{O}$  y  $\text{OH-}$  en distintas superficies (fcc(111), hcp(0001) y bcc(101)) sometidas a diferentes estados tensionales (uniaxial, biaxial, cizalla y una combinación de todos) hasta los límites de estabilidad de las mismas, determinados mediante el cálculo de densidad de estados fonónicos. Nuestros resultados muestran que la aplicación de deformaciones elásticas puede alterar de manera importante la actividad catalítica de los materiales estudiados. Para algunos metales, la aplicación de deformaciones es capaz de cambiar el paso limitante de la ORR [1]. De manera complementaria, nuestros cálculos apuntan a que las variaciones de la energía de adsorción de las tres especies implicadas  $\text{-H}$ ,  $\text{O}$  y  $\text{OH-}$  con la deformación, depende únicamente del área del hueco de adsorción y no del tensor de deformación aplicado. Por último, a partir de nuestras simulaciones, establecimos una relación entre la energía de adsorción de un átomo en la superficie y la energía de Fermi de esa superficie a través de una ley lineal válida para todos los metales estudiados [2]. En conclusión, nuestro análisis proporciona un marco de trabajo que permite predecir de manera sistemática el efecto de las deformaciones mecánicas en el diseño de nuevos catalizadores.



## Referencias:

[1] C. Martínez-Alonso, J. M. Guevara-Vela, J. Llorca, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 24, **2022**, 4832-4842.

[2] C. Martínez-Alonso, J. M. Guevara-Vela, J. Llorca, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 23, **2021**, 21295-21306.

# ANÁLISIS DE MICOTOXINAS FÚNGICAS EN DISTINTAS VARIEDADES DE ARROZ

Iván Romero Sánchez

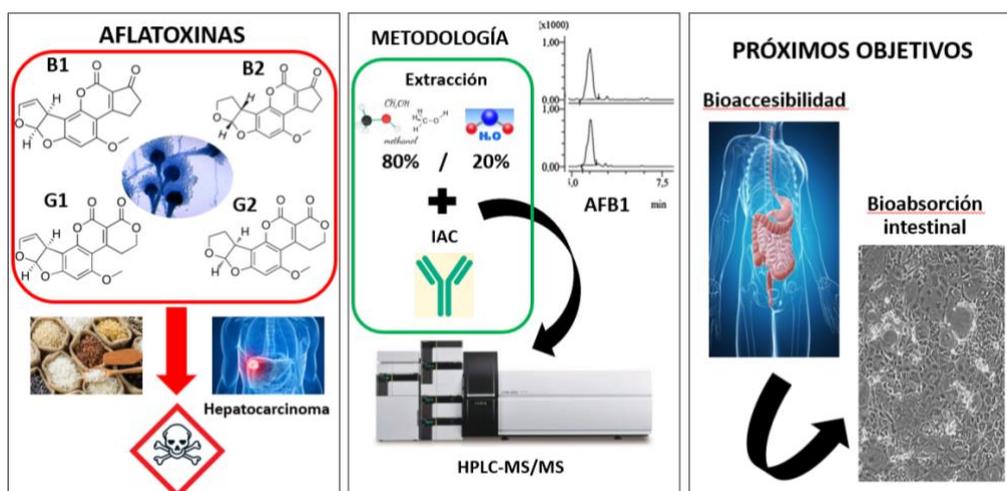
Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avenida Complutense s/n, Madrid, 28040, España

lvaromer@ucm.es

Esta tesis gira en torno al estudio de las micotoxinas, metabolitos secundarios de toxicidad variable que son producidos por una amplia variedad de hongos, mayoritariamente del género *Aspergillus*, *Penicillium* y *Fusarium*. Estos hongos se hallan presentes en el ambiente de forma ubicua y, bajo determinadas condiciones, pueden sintetizar una amplia gama de micotoxinas. Las toxicidades generadas por estas familias de micotoxinas son muy variadas, siendo de especial interés las aflatoxinas B1, B2, G1 y G2 por su fuerte implicación en la hepatitis aguda y en el desarrollo de hepatocarcinomas, entre otras toxicidades. Entre ellas, la aflatoxina B1 es la más tóxica, considerándose uno de los principales factores de riesgo del cáncer hepático a nivel mundial) [1].

Entre los diferentes estudios llevados a cabo en torno a estas toxinas, uno de ellos ha consistido en la evaluación de la presencia de aflatoxinas B1, B2, G1 y G2 en distintas matrices alimentarias, focalizando inicialmente en diferentes variedades de arroz. Para ello, se ha optimizado un método para la adecuada extracción y purificación de los analitos presentes en el arroz mediante el uso de columnas de inmunoafinidad, que permiten la retención selectiva de las aflatoxinas mediante su unión con anticuerpos específicos presentes en la matriz de la columna. También se han optimizado las variables más importantes del método de extracción y purificación. Finalmente se lograron recuperaciones del 86% para la AFB1, del 90% para la AFB2, del 87% para la AFG1 y del 92% para la AFG2. El análisis de los compuestos se ha llevado a cabo mediante cromatografía líquida acoplada a detector de espectrometría de masas en tándem (LC-MS/MS). El método optimizado se ha aplicado a una amplia variedad de arroces seleccionados en base a su diversa procedencia, variedad, técnicas de cultivo y tratamientos industriales efectuados en el cereal previo a su consumo. De este modo se ha podido comprobar si los arroces seleccionados exceden los límites establecidos por la normativa CE 1881/2006, que establece el contenido máximo de AFB1 en cereales en 2  $\mu\text{g}/\text{kg}$  y el de la suma de las cuatro aflatoxinas en 4  $\mu\text{g}/\text{kg}$ .

Los siguientes objetivos de esta tesis girarán en torno a la puesta a punto de un proceso de digestión in vitro para la evaluación de la bioaccesibilidad de aflatoxinas ingeridas en alimentos contaminados, así como de la bioabsorción de dichas toxinas a nivel intestinal mediante el uso de cultivos celulares de células Caco-2.



## Referencias:

[1] P. Turner, B. Flannery, C. Isitt, M. Ali and J. Pestka, *Nutrition Research Reviews*, 25 (2012), 162–179.

VI Simposio  
Anual en  
Química  
Avanzada



Facultad de  
Ciencias  
Químicas

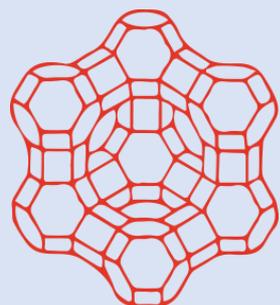


**Iberlabo, s. a.**  
c/ Tellez, 30 local 17  
Teléfono: (43) 915 511 491 - (34) 915 013 578  
Fax: (34) 915 529 403  
28007 - MADRID  
www.iberlabosa.com  
e-mail: info@iberlabosa.com  
NIF: A/28416832

Libro de resúmenes



# VI Simposio Anual en Química Avanzada



Programa de Doctorado Química Avanzada

Madrid

20 de Julio de 2022

Patrocina Iberlabo S.A.

