X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA

SAQA 2026

7-8 DE JULIO

SALÓN DE ACTOS
FAC. CC. QUÍMICAS

SPONSORS:

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

socie mat
sociedad española de materiales

Colegio Oficial Químicos de Madrid

Asociación de Químicos e Ingenieros Químicos de Madrid

MONITORIZA
Ingeniería de corrosión

LASING

X Symposium of the Advanced Chemistry PhD Programme

	7th July	8th July
9:00-9:15	**Registration**	**Registration**
9:15-9:30	**Symposium Committee**	**Registration**
9:30-10:00	**Iñigo Pérez-Baroja Verde** Colegio Oficial de Químicos de Madrid	**Paloma de Oro Carretero** Sobrevivir al Depósito de Tesis. Guía Administrativa para Doctorandos
10:00-10:15	**Daniel García Giménez** Boosting Electrochemical CO2 Capture Capacity Using a Hybrid Polymer-Aqueous Electrolyte	**Andrea Sánchez Elvira** New Biomimetic Materials and Sensing Strategies for Mycotoxin Analysis and Cancer Biomarker Identification
10:15-10:30	**Omar Santiago Mayorga Díaz** Computational Simulation and Characterizacion on Stainless Steels Employing on Exploration Vehicles Rovers on Mars	**Sandra Rodríguez-Blázquez** Analytical Strategies for the Agri-Food Valorization for Obtaining Bioactive Compounds
10:30-10:45	**Lucía Fernández López** Impacto de la Coexposición de Nano/Microplásticos de Poliestireno y Arsénico en Bacterias Modelo de la Microbiota	**Juan Andrés Nieto Simón** Desarrollo de KNb2O5F con Estructura de Bronce de Wolframio Tetragonal (TTB) como Ánodo para Baterías Recargables de Ion-Potasio (KIBs)
10:45-11:00	**Dawid Krystian Feler** Un Material, Dos Soluciones: Generación y Almacenamiento de H2 Verde	**Ezequiel Rubiales Romero** Eclectic: Engineering of Recombinant Antibodies and Nanomaterials for Biosensors Applied to Sepsis Diagnosis
11:00-11:15	**Ren Xu** Precise Synthesis of Colloidal Palladium Nanospheres with Tunable Dimensions	**Marcos López Ochoa** UV-Assisted LIBS for the Direct Analysis of Microplastics in Environmental Samples
11:15-11:45	**COFEE BREAK**	**COFEE BREAK**
11:45-12:00	**Discussion with the PhD Program Committee about the functioning of the program**	**Jorge Urraca Ruiz** Biosesores Electroquímicos Aplicados a la Industria Alimentaria
12:00-12:15	**Erick Ernesto Alvarado López** Towards Improved Tensile Behaviour of L-PBF G91 Steel: Process Optimization for High-Temperature Power Plant Applications	**Juan Francisco Ruiz Guerrón** Bulk Thermal Polymerization of Malononitrile Dimer: Kinetic Study and Construction of Bydimensional Triazine Networks
12:15-12:30	**Marta González Jiménez** Nuevas Nanomáquinas Mesoporosas para Liberación Controlada de Fármacos	**Fernando Martín Garrido** Modificación Post-Sintética de Nanopartículas de Ferrita Mediante Irradiación Láser Pulsada
12:30-12:45	**Ana Pallarés Zazo** Reactividad de Nanopartículas de Calcita en Soluciones Acuosas de Bario	**Pedro López-Tello Gutiérrez** Effect of Ba Doping on the Stability and Electrochemical Performance of SrFeO3-δ Based Air Electrodes for Solid Oxide Cells
12:45-13:00	**Joaquín Calbet Bernad** Optimización de Electrodos Basados en Xerogeles de Carbono para Baterías de Ion-Aluminio	**Itziar Hidalgo González** Efecto de la Reutilización del Polvo sobre el Comportamiento a la Corrosión de la Aleación Al10SiMg Fabricada por LPBF
13:00-13:15	**Ignacio Martínez Casasús** Attosecond Fourier Transform Spectroscopy	**Antonio Alonso Medina** Colaje en cinta de NIO:YSZ para la Fabricación de Electrodos de Hidrógeno
13:15-13:30	**Gorka Barquero Carmona** Recuperación de Metales Críticos a Partir de Fuentes Secundarias y su Reutilización en Materiales Catódicos	**Iván Segura de Orta** Estrategias Macromoleculares para la Estabilización y el Autoensamblaje Controlado de Nanocristales Metálicos en Medios Orgánicos
13:30-13:45		**Final Remarks**

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA

SAQA 2026

Boosting Electrochemical CO_2 Capture Capacity Using a Hybrid Polymer-Aqueous Electrolyte

Daniel García-Giménez*, Marta Santos-Rodríguez, Antoniou Maria-Anna, Mohammad Sanan-Ali, Miguel A. López-Manchado and Javier Carretero-González

*Corresponding e-mail: danielgargi@ictp.csic.es

[1]*Institute of Polymer Science and Technology, CSIC / Complutense University 28006, Madrid. Complutense University*

Keywords: *CO_2 capture, SSA, Supercapacitive Swing Adsorption, Energy Storage.*

Water-based supercapacitive swing adsorption (SSA) technologies offer a secure and cost-effective method for capturing carbon dioxide. However, broadening their operating voltage limits is essential to optimize their overall performance. In this study, we present a novel asymmetric supercapacitor design that relies on a mixed aqueous solution of sodium chloride and polyethylene glycol to enable CO_2 capture at elevated voltages. When operating at 40 °C with a current density of 30 mA/g, the device achieves a carbon uptake of 69 mmol/kg under a 2.5 V potential. Notably, when switching to a -2.5 V cathodic operation, the capture capacity surges dramatically to 356 mmol/kg.

This unexpected boost is driven by an unusual, direction-independent mechanism linked to the slow release and diffusion of previously trapped bicarbonate ions within the porous electrodes. Additionally, replacing traditional water-based electrolytes with this polymeric blend yields a massive gain in energy storage, providing four times the gravimetric energy density of conventional 1 V systems.

Thanks to its outstanding resilience against corrosion and excellent stability over repeated high-voltage cycles, this new setup offers a promising foundation for reliable, highly efficient, and scalable electrochemical carbon capture technologies.

Acknowledgements.

The research is funded by the Agencia Estatal de Investigación as part of the project: PID2020-119658RB-I00 thanks to a predoctoral contract (PRE2021-099783).

References:

(1) Kokoszka B, Jarrah NK, Liu C, Moore DT, Landskron K. Supercapacitive swing adsorption of carbon dioxide. Angew Chem Int Ed Engl. 2014 Apr 1;53(14):3698-701.

(2) Grace Mapstone, Tim M. Kamsma, Zhen Xu, Penelope K. Jones, Alpha A. Lee, Israel Temprano, James Lee, Michael F. L. De Volder, Alexander C. Forse Understanding the Mechanism of Electrochemical CO2 Capture by Supercapacitive Swing Adsorption, ACS Nano 2025, 19, 4, 4242–4250, 2024.

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA

SAQA 2026

COMPUTATIONAL SIMULATION AND CHARACTERIZACION ON STAINLESS STEELS EMPLOYING ON EXPLORATION VEHICLES ROVERS ON MARS

Omar Santiago Mayorga Diaz[1], Noemí Encinas García and Francisco Javier Pérez Trujillo

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

omayorga@ucm.es

Keywords: *Electrochemical corrosion, thermodynamic simulation, kinetic behavior, corrosion testing, Mars environment.*

Since 1996, the development of rovers has represented a significant advance in the space race, enabling the exploration of planetary surfaces such as Mars and the identification of its environmental and physicochemical characteristics. However, over time, deployed rovers have experienced structural degradation, particularly in critical components such as wheels, largely due to the harsh Martian environment. Among the dominant degradation mechanisms, electrochemical corrosion and its interaction with mechanical wear (tribocorrosion) play a crucial role in limiting rover durability.

Mars presents extreme conditions, including low atmospheric pressure (600–700 Pa), temperature fluctuations ranging from −68 °C to 20 °C, exposure to UV-C radiation, and relative humidity around 40%. Furthermore, the composition of the regolith, combined with the hygroscopic properties of salts such as sodium perchlorate and sodium chloride, promotes the formation of transient brines through deliquescence. These liquid phases enable corrosion processes that differ significantly from terrestrial environments, involving coupled thermodynamic and kinetic mechanisms. Tribocorrosion further accelerates material degradation in alloys commonly used in rover construction.

Initial thermodynamic simulations using Thermo-Calc allowed the identification of the principal corrosion products, including protective oxide coatings such as Cr_2O_3 (chromia) and MoO_2. However, under acidic pH conditions, the formation of spinel phases was observed, which contribute to material degradation. In addition, the interaction with regolith led to the formation of mineral complexes such as wollastonite and silicon-rich phases. Preliminary experiments under simulated Mars conditions were also performed on 3 steels (A516, 316L and 11R51), to confirm the presence of such compounds.

This combined computational and experimental approach supports a better understanding of corrosion mechanisms under Martian conditions and contributes to the development of improved materials and protective strategies for future exploration missions.

References:

[1] Chevrier, V.F., et al. (2025). Perchlorate brine formation from frost at the Viking 2 landing site. Communications in Earth & Environment, 6(1), 447.
[2] Mitra, K. (2025). Oxychlorine species on Mars: A review. Reviews of Geophysics, 63(4).
[3] Martín-Torres, J., et al. (2021). Brine-induced tribocorrosion accelerates wear on stainless steel: Implications for Mars exploration. Advances in Astronomy, 2021, 1-11.

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA
SAQA 2026

IMPACTO DE LA COEXPOSICIÓN DE NANO/MICROPLÁSTICOS DE POLIESTIRENO Y ARSÉNICO EN BACTERIAS MODELO DE LA MICROBIOTA

Lucía Fernández-López, Beatriz Gómez-Gómez y Yolanda Madrid Albarrán

[1]*Dpto. Química Analítica, Facultad de CC. Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Pl. de las Ciencias 2, 28040, Madrid*

lucife15@ucm.es

Palabras clave: *microplásticos, arsénico, lactobacillus, bioacumulación, ICP-MS*

Los nano y microplásticos (NPs y MPs) pueden adsorber una amplia variedad de contaminantes presentes en el medio ambiente, actuando como vectores y aumentando potencialmente su bioacumulación en los organismos vivos. Entre los contaminantes tóxicos asociados a los microplásticos, destacan los metales pesados y metaloides. Entre ellos, el arsénico (As) destaca por su elevada toxicidad y su presencia en el medio ambiente [1]. Debido a que, como se ha comentado previamente, los NPs/MPs pueden actuar como transportadores de contaminantes y acceder al organismo a través de la digestión, es fundamental comprender cómo pueden afectar a la microbiota intestinal, la cual desempeña un papel fundamental en la salud humana.

En este contexto, se realizaron ensayos *in vitro* empleando bacterias modelo de la microbiota intestinal (*Lactobacillus rhamnosus* y *Lactobacillus casei*) con el objetivo de evaluar la transformación y los efectos biológicos de diferentes especies de arsénico y de nano/microplásticos de poliestireno (60 y 500 nm), tanto de forma individual como combinada.

En primer lugar, se evaluó el efecto de As(III) y As(V) sobre la viabilidad bacteriana y la acumulación intracelular mediante medidas de densidad óptica (OD) y análisis por ICP-MS, respectivamente. Los ensayos de viabilidad demostraron que ambas cepas bacterianas presentan una alta tolerancia a la exposición del arsénico. Además, la acumulación intracelular del As determinada por ICP-MS fue baja en ambas bacterias (0.1-1.5%), independientemente de la especie química empleada.

Antes de investigar los efectos combinados del As y los NPs/MPs se llevaron a cabo experimentos de adsorción para evaluar el grado de asociación del As a la superficie del plástico. La adsorción se cuantificó mediante un protocolo de ultracentrifugación seguido de análisis por ICP-MS, observándose que hasta un 35% del arsénico se asociaba a la superficie de los microplásticos.

Finalmente, se estudió el efecto combinado de NPs/MPs de 60 y 500 nm (0.5-100 mgL^{-1}) sobre la viabilidad bacteriana. Los resultados indicaron que la exposición de ambas cepas a los nano/microplásticos no produjo una disminución significativa de la viabilidad. Posteriormente, se estudió la acumulación del As en ambas cepas bacterianas mediante un protocolo de ultracentrifugación seguido de un análisis por ICP-MS, observando un aumento de la acumulación intracelular frente a la exposición individual.

Referencias:

[1] Chen XJ, Ma JJ, Yu RL, Hu GR, Yan Y. Environmental Science and Pollution Research (2022) 29:76983–76991

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA

SAQA 2026

UN MATERIAL, DOS SOLUCIONES: GENERACIÓN Y ALMACENAMIENTO DE H_2 VERDE

Dawid K. Feler,[1] M. Luisa Ruiz González, Isabel Gómez Recio, Daniel Muñoz Gil, Ana Querejeta, Miguel Tinoco, José Luis Martínez y José M. González Calbet

[1]Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Pza. Ciencias s/n, 28040, Madrid

dfeler@ucm.es

Palabras clave: nanoóxidos de metales de transición 2D, hidróxidos dobles laminares (LDH), reacción de evolución del oxígeno (OER), efecto magnetocalórico (MCE)

La lucha contra el cambio climático exige reducir drásticamente las emisiones derivadas del uso de combustibles fósiles, principales fuentes de la carbonización de la atmósfera. Las alternativas basadas en energías renovables, además de su carácter estacional, solo disminuyen parcialmente el uso de estos combustibles. En este contexto, el hidrógeno verde surge como un vector energético clave. Sin embargo, su implementación a escala industrial se enfrenta a dos grandes retos: la cinética lenta de la reacción de evolución del oxígeno (OER) en la electrólisis del agua, y el alto coste medioambiental y económico de los procesos convencionales para licuar el hidrógeno de cara a su transporte y almacenamiento.[1,2]

Para abordar ambos problemas, hemos diseñado y obtenido un material bidimensional (2D) multifuncional basado en hidróxidos dobles laminares de metales de transición **(Fig. 1a)**. Mediante un proceso de síntesis en un solo paso escalable, se preparan nanoláminas de α-$Co(OH)_2$ intercaladas con especies polioxomolibdato, con una relación Co:Mo de hasta 1:0,4. Esta intercalación confiere al material una doble funcionalidad única. Los voluminosos aniones molibdato expanden el espacio interlaminar y modifican el estado de oxidación del cobalto, incrementando los centros activos y mejorando la cinética de la OER **(Fig. 1b)**. Por otro lado, refuerzan las interacciones magnéticas de superintercambio entre las láminas en comparación con el α-$Co(OH)_2$ original, ajustando su temperatura de operación hasta el rango del H_2 líquido (20-30 K), dotando al material de una excelente respuesta magnetocalórica (MCE) competitiva con otros compuestos que contienen tierras raras **(Fig. 1c)**.[3] En conclusión, la introducción estratégica de polioxomolibdatos en nanohidróxidos laminares de Co provoca orden a corta distancia que da lugar a una funcionalidad combinada (electrocatalítica y magnetocalórica) consolidándolos como una alternativa versátil y sostenible para impulsar las tecnologías del H_2 limpio.

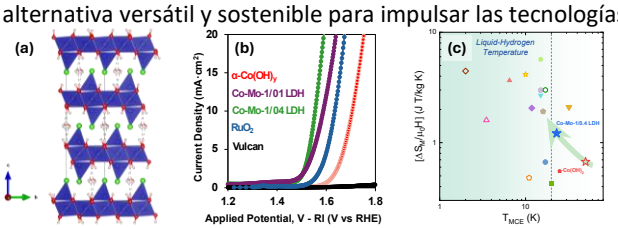


Figura 1. (a) Representación esquemática de la estructura del α-$Co(OH)_2$; **(b)** Voltamperogramas de barrido lineal de muestras con distinto contenido en Co/Mo así como referencias; **(c)** Respuesta MCE comparada de varios compuestos.

Referencias:

[1] McCrory, C.; Jung, S.; Peters, J.; *et al.* Benchmarking heterogeneous electrocatalysts for the oxygen evolution reaction. *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 45, 16977–16987.

[2] Levinsky, J.J.B.; Beckmann, B.; Gottschall, T.; *et al.* Giant magnetocaloric effect in a rare-earth-free layered coordination polymer at liquid hydrogen temperatures. *Nat. Commun.* **2024**, 15, 8559.

[3] Muñoz-Gil, D.; Castillo-Blas, C.; Feler, D.K.; *et al.* 2D Co-Mo-hydroxide-based multifunctional material for the development of H_2-based clean energy technologies. *Adv. Mater.* **2025**, e12458.

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA

SAQA 2026

PRECISE SYNTHESIS OF COLLOIDAL PALLADIUM NANOSPHERES WITH TUNABLE DIMENSIONS

Ren. Xu[1,], Luis Bañares-Morcillo[1], Andrés Guerrero-Martínez[1,*] and Guillermo Gonzalez-Rubio[1,*]*

[1]Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid, Spain

renxu@ucm.es

Keywords:

Precise control over the synthesis of colloidal palladium nanocrystals has garnered significant attention, as the catalytic, optical and electronic properties are critically determined by their size, shape and surface structure[1]. Over the past decade, tremendous progress has been achieved in wet-chemical methods enabling the production of palladium nanocrystals with well-defined morphologies such as cubes, octahedra, and dendritic structures[2]. However, powerful synthetic strategies yielding high quality colloidal palladium nanospheres with defined dimensions in a reproducible manner remain elusive. To address this research gap, our work aims to develop a robust synthesis route that combines seed-mediated growth with nanosecond laser irradiation to produce uniform, colloidal palladium nanospheres with tunable diameters ranging from 28 to 103 nm (Figure 1). Specifically, in the first step, dendritic palladium nanocrystals are produced via seeded growth. Subsequently, nanosecond pulsed laser irradiation is employed to reshape the palladium nanodendrites into smooth structures, with standard deviations of 2-4%. This methodology establishes a versatile approach for producing size-controlled colloidal palladium nanospheres in aqueous solution and provides a foundation for future investigations of their performance in various practical processes, including selective hydrogenation reactions and sustainable fuel synthesis.

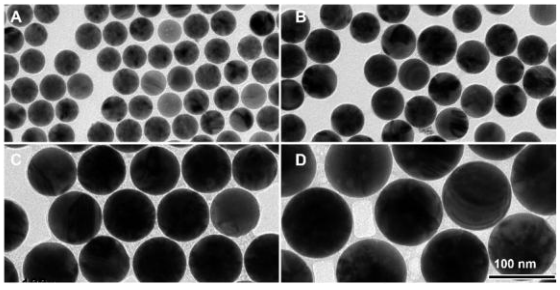


Figure 1: Transmission electron microscopy images of colloidal palladium nanospheres with the sizes of: (A) 28 ± 2 nm, (B) 48 ± 3 nm, (C) 80 ± 3 nm, (D) 103 ± 4 nm (scale bar fits for A to D) obtained via the proposed synthesis strategy.

References:

1. W. X. Niu, et al. Shape-Controlled Synthesis of Single Crystalline Palladium Nanocrystals. *ACS Nano*. **2010**, *4*, 1987-1996.
2. J. W. Zhang, et al. "Size and Shape Controlled Synthesis of Pd Nanocrstals" *Phys. Sci. Rev.* **2018**, 20170101.

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA

SAQA 2026

TOWARDS IMPROVED TENSILE BEHAVIOUR OF L-PBF G91 STEEL: PROCESS OPTIMIZATION FOR HIGH-TEMPERATURE POWER PLANT APPLICATIONS

Erick E. Alvarado[1,2], Roger Castellote-Alvarez[1,2], Isaac Toda-Caraballo[1], Carlos Capdevila[1] y David San-Martin[1]

[1] *MATERALIA Group, Dept. Physical Metallurgy, National Center for Metallurgical Research (CENIM), Spanish National Research Council (CSIC), Av. Gregorio del Amo 8, 28040, Madrid.*

[2] *Dept. Chemical Engineering and Materials, Faculty of Chemical Sciences, Complutense University of Madrid, Pl. de las Ciencias 2, Moncloa-Aravaca, 28040, Madrid.*

erick.alvarado@cenim.csic.es

Keywords: G91 steel, L-PBF, power plants, high-temperature, mechanical properties.

G91 (9Cr-1Mo) is a ferritic-martensitic (F/M) steel currently used in coal-fired power plants and considered as a promising candidate for Generation IV nuclear reactors because its low swelling under irradiation, as well as its good creep resistance and moderate corrosion resistance at high-temperature (550-600 ºC). For this reason, technologies based on additive-manufacturing have moved into the spotlight in G91 steel to improve reactor design flexibility and material behaviour. This study addresses the design and development of G91 steel through L-PBF.

After a meticulous optimization process, the printability window for samples L-PBFed was determined to be as follows: laser power (W): 150-200, hatch distance (mm): 0.05 and scanning speed (mm/s): 750-1000. All as-built samples exhibited relative density values above 99.75%.

Four samples with low porosity and different volumetric energy density (VED) between 100 and 175 J/mm^3 were taken into account for deeper characterization. EPMA mapping of the printed consolidated microstructures exposed no significant segregation in the printed samples, while their examination by LOM, SEM, EBSD and XRD confirmed the presence of δ-ferrite (large grains), martensite (fine grains) and retained austenite. In all cases, the larger the VED, the lower the volume fraction of δ-ferrite, while the retained austenite fraction remained roughly constant and around 0.08. However, the intrinsic heat treatments inherent to the processing route during printing were not able to remove completely the δ-ferrite, which is an undesirable phase under creep conditions. The heterogeneous nature of these microstructures had an important impact on the dispersion observed in the microhardness mapping values. Nevertheless, the combination of soft and hard phases in the microstructure exhibits a remarkable balance of strength (YS, UTS) and total elongation, exceeding that of conventional G91 steel.

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA
SAQA 2026

NUEVAS NANOMÁQUINAS MESOPOROSAS PARA LIBERACIÓN CONTROLADA DE FÁRMACOS

Marta González-Jiménez,[1] Diana Vilela[1] y Reynaldo Villalonga[1]

[1]Departmento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias, 28040, Madrid

martgo80@ucm.es

Palabras clave: *MSNs, micromotores.*

A pesar de los avances en investigación, el cáncer sigue siendo una de las principales causas de mortalidad prematura. Las terapias actuales aun presentan limitaciones para lograr la erradicación completa del tumor y evitar los efectos adversos, así como la aparición de resistencias terapéuticas.[1] Por ello, el desarrollo de sistemas inteligentes de administración de fármacos (DDS) sensibles a estímulos se ha convertido en un objetivo en la biomedicina moderna.[2]

En este contexto, esta tesis doctoral explora el potencial de las nanopartículas de sílice mesoporosa (MSNs) como plataformas de administración controlada de fármacos gracias a su elevada capacidad de carga, baja toxicidad y su fácil funcionalización con conjuntos de compuertas sensibles a estímulos biológicos.[2] La investigación se amplía hacia nanoparticulas Janus, cuya anisotropía permite integrar funcionalidades independientes en una misma estructura,[2] y hacia nano/micromotores catalíticos y magnéticos, capaces de proporiconar transporte activo y superar las limitaciones de la difusión pasiva.[3]

En este conjunto, estas aproximaciones permiten diseñar nanosistemas capaces de responder a señales características del tumor, para lograr una liberacion controlada y localizada de agentes antitumorales, avanzando hacia estrategias terapeuticas mas eficaces y selectivas. (Fig. 1)

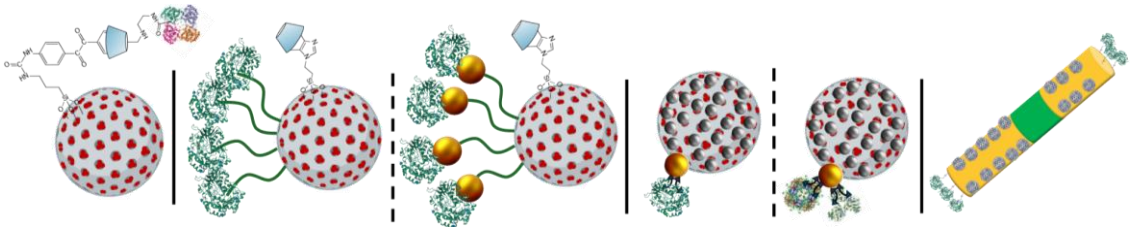


Fig.1: Esquema general de las distintas nanomáquinas desarrolladas durante la tesis doctoral.

Referencias:

[1] Zafar, A.; Khatoon, S.; Jawad Khan, M.; Abu, J.; Naeem, A. Advancements and limitations in traditional anti-cancer therapies: a comprehensive review of surgery, chemotherapy, radiation therapy, and hormonal therapy. *Discov. Oncol.* . **2025**, 1, 607.

[2] Llopis-Lorente, A.; De Luis, B.; García-Fernández, A.; Díez, P.; Sánchez, A.; Marcos, M.D.; Villalonga, R.; Martínez-Máñez, R.; Sancenón, F. Au-Mesoporous silica nanoparticles gated with disulfide-liked oligo(ethylene glycol) chains for tunable cargo delivery mediated b yan integrated enzymatic control unit. *J. Mater. Chem. B*. **2017**, 5, 6734-6739

[3] Luo, M.; Feng, Y.; Wang, T.; Guan, J.. Micro-/Nanorobots at Work in Active Drug Delivery. *Adv. Funct. Mater.*. **2018**, 28, 1706100.



REACTIVIDAD DE NANOPARTÍCULAS DE CALCITA EN SOLUCIONES ACUOSAS DE BARIO

Ana Pallarés y Carlos M. Pina

Departamento de Mineralogía y Petrología, Facultad de Ciencias Geológicas, Universidad Complutense de Madrid, Ciudad Universitaria, 28040 Madrid

apalla03@ucm.es

Palabras clave: *calcita, witherita, $BaCl_2$, XRD, FTIR, Raman, SEM-EDX*

En este trabajo se estudia la evolución de la reacción de partículas nanométricas de calcita ($CaCO_3$) con una disolución acuosa 0,5 M de $BaCl_2$ durante un periodo de 53 días. La caracterización se realizó mediante cuatro técnicas complementarias: difracción de rayos X de polvo (XRD), espectroscopía FTIR/ATR, espectroscopía Raman y microscopía electrónica de barrido SEM con microanálisis EDX.

Los difractogramas confirmaron que las muestras tratadas con $BaCl_2$ muestran reflexiones de Bragg de witherita ($BaCO_3$), junto con las características de la calcita original. No se detectó en ningún caso vaterita, aragonito ni baritocalcita para ningún tiempo de reacción. La cuantificación Reflectivity Intensity Ratio (RIR) indicó que la fracción en peso de witherita aumentó de un 39% en masa (a los 5 días de reacción) hasta un 60% en masa (a los 53 días de reacción, que es cuando se interrumpió el experimento). Simultáneamente, se observó la disminución de la masa de calcita, desde 61% a 40%, para los mismos tiempos de reacción. Los tamaños de dominio coherente determinados a partir de medidas Full Width at Half Maximum (FWHM) del pico de calcita 104 se mantienen en el rango 51–54 nm en todas las muestras tratadas, sin tendencia temporal. Sin embargo, el dominio coherente medido a partir de FWHM del pico de witherita 111 disminuye de 42 a 35 nm.

Los espectros FTIR confirman la coexistencia de calcita (ν_2 a ~874 cm^{-1}, ν_4 a 712 cm^{-1}) y witherita (ν_2 a ~856 cm^{-1}, ν_4 a ~694 cm^{-1}). No se observan bandas de vaterita (1088 cm^{-1}), aragonito (700+713 cm^{-1} doblete), baritocalcita, ni carbonato amorfo (1640 cm^{-1}). Se observa un aumento en la cantidad de whiterita cuantificado a partir de la banda ν_2.

La espectroscopía Raman resuelve el doblete ν_1 del estiramiento simétrico CO_3^{2-}: calcita a ~1087 cm^{-1} y witherita a ~1060 cm^{-1} ($\Delta\nu_1 \approx 26$ cm^{-1})[1]. Los modos de red Eg a 155 y 282 cm^{-1} confirman la presencia de calcita; el modo externo Ba–O a ~221 cm^{-1} indica witherita. La ausencia del doblete ν_1 a 1074 + 1090 cm^{-1} permite descartar la presencia vaterita. Se observa heterogeneidad espacial elevada: diferentes puntos de una misma muestra presentan dominancia de calcita o de witherita, lo que refleja la distribución local de ambas fases a escala micrométrica.

Las imágenes SEM revelan la progresiva disolución de las partículas de calcita originales y la aparición desde t = 5 días de cristales aciculares-lanceolados de witherita y su posterior crecimiento hasta t = 53 días, consistente con un mecanismo de disolución-cristalización acoplada.

Referencias:

[1] Kontoyannis, C. G.; Vagenas, N. V. Analyst **2000**, 125, 251–255.
[2] Alves, J. F.; Edwards, H. G. M.; Korsakov, A.; de Oliveira, L. F. C. *Minerals* **2023**, 13, 1358.
[3] Hu, Y.; Ye, Y.; Liu, D.; Wang, Z.; Zhu, X.; Wang, S.; Miao, Y.; Wu, Z. J. Phys. Chem. C **2024**, 128, 6138–6148.

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA

SAQA 2026

Optimización de electrodos basados en xerogeles de carbono para baterías de ion-aluminio

J. Calbet[1,2], M.L. López[1], J. Chacón[2], P. Almodóvar[2], I. Álvarez-Serrano[1]

[1] *Dpto de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense, 28040 Madrid, España*

[2] *Zelestium Technologies S.L. , 42110 Ólvega, España.*

jocalbet@ucm.com

Palabras clave: *Baterías, Aluminio-ion, xerogeles de carbono, materiales para energía.*

En este trabajo se presenta la optimización de electrodos basados en xerogeles de carbono empleados como cátodos en baterías de ion-aluminio, centrando el estudio en la influencia del tipo de *carbon black* (CB) y del espesor del recubrimiento. Se evaluaron distintos aditivos carbonosos, *carbon blacks* (SuperP, Birla, Cabot y Ensaco), manteniendo constante la composición del electrodo (70:20:10, xerogel:CB:aglutinante), para analizar su impacto en la conductividad y el rendimiento electroquímico mediante técnicas de PEIS, voltametría cíclica y ensayos de carga/descarga. Posteriormente, se seleccionó el *carbon black* con mejor comportamiento y se estudiaron diferentes espesores de recubrimiento (100, 250 y 500 µm) con el objetivo de optimizar la capacidad específica, el transporte iónico y la estabilidad estructural. Los resultados mostraron diferencias significativas en la resistencia de transferencia de carga y en la estabilidad tras el ciclado, identificando una configuración que combina una baja resistencia, alta capacidad y buena integridad morfológica observada por microscopía electrónica de barrido (SEM). En conjunto, el estudio permitió establecer los parámetros clave de diseño para mejorar la eficiencia de los cátodos de xerogel de carbono, contribuyendo al desarrollo de baterías de ion-aluminio más estables y con un rendimiento electroquímico optimizado.

Referencias:

[1] Almodóvar, P.; Calbet, J.; Álvarez-Serrano, I.; Rodríguez-Castellón, E.; Chacón, J; López, M.L.; Díaz-Guerra, C. Vanadium-doped hexagonal MoO3: Structural and electrochemical characterization for aluminium-ion battery applications. *J. Alloys Compd.*, **2025**, 1034, 181381.
[2] Almodóvar, P.; Álvarez-Serrano, I.; Llorente, I.; López, M.J.; Chacón, J.; Díaz-Guerra, C. Nickel-Doped h-MoO3 Cathodes: A High-Performance Material for Aluminum-Ion Batteries. *Battery Energy*, **2025**, 4, e20240076.

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA
SAQA 2026

ATTOSECOND FOURIER TRANSFORM SPECTROSCOPY

Ignacio M. Casasús[1], Oleg Kornilov[2], Arnaud Rouzée[2],
Luis Bañares Morcillo[1,3], and Tobias Witting[2]

[1]*Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040 Madrid, Spain*

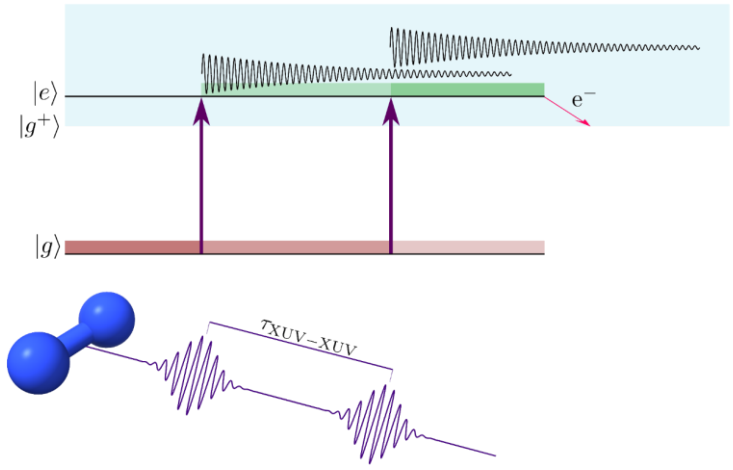
[2]*Max-Born-Institute, Max-Born-Straße 2A, 12489 Berlin, Germany*

[3]*Instituto Madrileño de Estudios Avanzados IMDEA-Nanoscience, Faraday, 9, 28049 Madrid, Spain*

imcasasus@ucm.com

Keywords: *Attosecond, Fourier Transform Spectroscopy, High-harmonic generation, Nitrogen*

We introduce attosecond XUV-XUV Fourier transform spectroscopy to investigate the autoionizing Rydberg states of molecular nitrogen. Phase-locked XUV pulse pairs are generated through high-harmonic generation and delayed with sub-10-attosecond timing precision [1]. The first pulse prepares a coherent superposition between the molecular ground state and a set of high-lying Rydberg states. The second pulse probes the evolving coherence, imprinting delay-dependent modulations onto the population of autoionizing levels. These modulations are subsequently read out via the photoelectron spectra resulting from autoionization into different ionic continua. Fourier analysis of the delay-dependent photoelectron yields provides information about transition energies, coherence dynamics and vibrationally resolved ionization cross-sections.



References:

[1] Lisa-Marie Koll, Laura Maikowski, Lorenz Drescher, Marc J. J. Vrakking, and Tobias Witting, "Phase-locking of time-delayed attosecond XUV pulse pairs," *Opt. Express* (**2022**) 30, 7082-7095

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA
SAQA 2026

RECUPERACIÓN DE METALES CRÍTICOS A PARTIR DE FUENTES SECUNDARIAS Y SU REUTILIZACIÓN EN MATERIALES CATÓDICOS

Gorka Barquero-Carmona[1,2], Lorena Alcaraz[2], Olga Rodríguez-Largo[2], Consuelo Gómez de Castro[1]

[1]*Departamento de Ingeniería Química y de Materiales, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias 2, 28040, Madrid.*

[2] *Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas (CENIM), Avenida Gregorio del Amo 8, 28040, Madrid.*

gbarquer@ucm.es / gorkbark@cenim.csic.es

Palabras clave: *metalurgia, metales críticos, recuperación, economía circular, tierras raras, cátodos LNMC*

El aumento en la demanda de metales críticos, impulsado por la transición energética, está generando problemas relacionados con su disponibilidad limitada, el impacto ambiental de su extracción y la dependencia geográfica. En este contexto, el reciclaje de fuentes secundarias surge como una alternativa más sostenible.

Este trabajo se centra en la recuperación de metales críticos a partir de fuentes secundarias, como baterías de ion-litio (LIBs) e imanes permanentes NdFeB procedentes de vehículos eléctricos y turbinas eólicas, tecnologías clave en la transición energética. A partir de estos residuos complejos, y mediante la combinación de procesos piro- e hidrometalúrgicos, se consigue la separación y recuperación de metales críticos como Li, Ni, Co, Mn y tierras raras. En el caso de los imanes, se llevan a cabo tratamientos térmicos a baja temperatura y lixiviaciones suaves junto con técnicas de extracción líquido-líquido que permiten obtener tierras raras (Nd y Ho) con elevada pureza [1]. Para las LIBs, después de un proceso de trituración se obtiene un material denominado masa negra. Tras un proceso de carborreducción, se logra recuperar el litio en forma de carbonato [2]. Posteriormente, se lleva a cabo un proceso de lixiviación ácida con el fin de recuperar los metales de transición en disolución, los cuales se separan posteriormente mediante distintas rutas hidrometalúrgicas. Finalmente, los metales recuperados en el tratamiento de las LIBs se emplean como precursores en la síntesis de materiales catódicos tipo LNMC, contribuyendo a la economía circular.

Referencias:

[1] Alcaraz, L., Barquero-Carmona, G., Rodríguez-Largo, O., Díaz-Guerra, C., López, F. A. From magnet waste to rare earth oxides: A sustainable route for recovering neodymium and holmium from electric vehicle motors. *SM&T*. **2025**, 45.
[2] Alcaraz, L., Rodríguez-Largo, O., Barquero-Carmona, G., López, F. A. Recovery of lithium from spent NMC batteries through water leaching, carbothermic reduction, and evaporative crystallization process. *J. Power Sources*, **2024**, 619, 235215.

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA

SAQA 2026

NEW BIOMIMETIC MATERIALS AND SENSING STRATEGIES FOR MYCOTOXIN ANALYSIS AND CANCER BIOMARKER IDENTIFICATION

Sánchez-Elvira, Andrea; del Barrio, Melisa; y Benito-Peña, María Elena

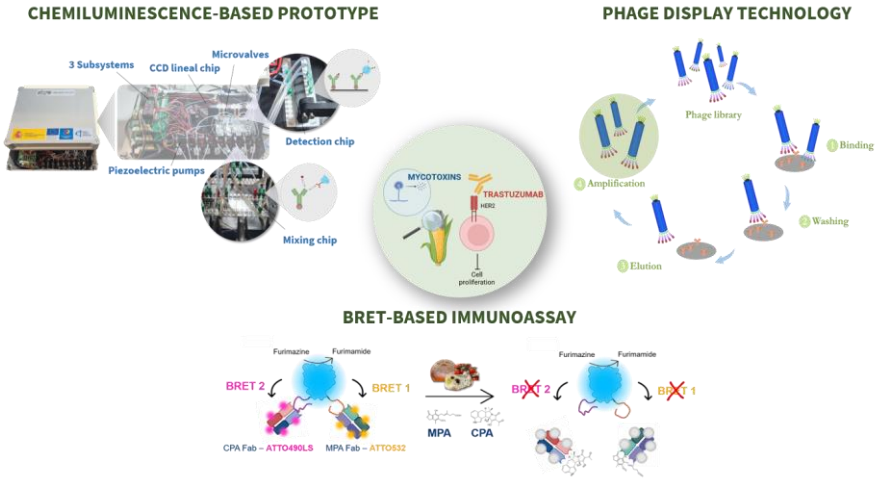
[1]*Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias 2, 28040, Madrid*

andsan45@ucm.es

Palabras clave: *mycotoxins, trastuzumab, phage display, chemiluminescence, BRET*

This thesis is mainly focused on the detection of three main analytes: low molecular weight, toxic secondary fungi metabolites called mycotoxins [1]; an antibody mainly used for breast cancer treatment known as trastuzumab; and a colorectal cancer biomarker PTPRN. Up to now, biomimetic materials and biosensors have been studied for the detection of different mycotoxins, such as cyclopiazonic acid (CPA), mycophenolic acid (MPA), zearalenone (ZON) and fumonisin B_1 (FB_1), as well as trastuzumab therapeutic antibody.

For mycotoxin detection, different approaches have been explored: BRET based immunoassays for the simultaneous detection of CPA and MPA, phage display technology to produce recombinant antibodies (rAbs) [2] capable of detecting ZON by sandwich-type assays, and a chemiluminescence-microfluidic based prototype for the detection of FB_1. In addition, for trastuzumab detection, rAnti-trastuzumab antibodies have been developed by phage display technology to produce more stable humanized Abs for the direct quantification of this analyte.



Referencias:

[1 Peltomaa, R; Abbas, A; Yli-Mattila, T; Lamminmäki, U. Single-step noncompetitive immunocomplex immunoassay for rapid aflatoxin detection. *Food Chemistry.* **2022,** 392, 133287 – 133293.
[2] Peltomaa, R; Benito-Peña, E; Barderas, R; Moreno-Bondi, MC. Phage Display in the Quest for New Selective Recognition Elements for Biosensors. *ACS Omega.* **2019,** 4, 11569-11580.

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA
SAQA 2026

ANALYTICAL STRATEGIES FOR THE AGRI-FOOD VALORIZATION FOR OBTAINING BIOACTIVE COMPOUNDS

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

Department of Analytical Chemistry, Faculty of Chemical Sciences, Complutense University of Madrid, 28040 Madrid, Spain

Sandro08@ucm.es

Keywords: *Agri-food waste; bioactive compounds; analytical strategies; valorization; circular economy*

The transition towards a circular bioeconomy has highlighted the need to transform agri-food waste into valuable resources. Large quantities of by-products generated during food processing remain underutilized despite being rich sources of bioactive compounds with significant industrial potential. According to the Food and Agriculture Organization of the United Nations (FAO), approximately 1.3 billion tonnes of agri-food waste were generated worldwide [1]. Among these by-products, sloe and avocado residues, apricot seeds, grapevine canes, and chestnut burs have attracted increasing attention as sustainable feedstocks for the recovery of high-value compounds.

This Doctoral Thesis focuses on the development of innovative analytical methodologies for the extraction, characterization, and valorization of bioactive compounds, including tocopherols, fatty acids, β-carotenes, polyphenols, and anthocyanins, from selected agri-food by-products such as sloe pomace, citrus residues, grapevine canes, and chestnut burs. Following the physicochemical characterization of the raw materials, sustainable extraction methods based on green solvents and scalable extraction techniques were optimized to obtain lipid fractions and phenolic-rich extracts.

The recovered compounds were characterized using chromatographic (HPLC-DAD-MS, HPLC-DAD, and GC-MS) and spectrophotometric (UV-Vis) analytical techniques. Their antioxidant, antimicrobial, antihypertensive, and neuroprotective activities were evaluated and correlated with their chemical composition through chemometric analysis. Furthermore, ionic gelation-based encapsulation was investigated as a sustainable strategy to improve the stability and potential application of phenolic compounds. Finally, the environmental performance of the developed extraction methodologies was assessed using the green metrics.

References:

[1] Sarker, A.; Ahmmed, R.; Ahsan, S. M.; Rana, J.; Ghosh, M. K.; Nandi, R. A comprehensive review of food waste valorization for the sustainable management of global food waste. Sustain. Food Technol. 2024, 2(1), 48-69.

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA
SAQA 2026

DESARROLLO DE KNb_2O_5F CON ESTRUCTURA DE BRONCE DE WOLFRAMIO TETRAGONAL (TTB) COMO ÁNODO PARA BATERÍAS RECARGABLES DE ION-POTASIO (KIBs)

J.A. Nieto-Simón[1], N. Martín-Hernández[2,3], J. Chen[2,3], M. Zarrabeitia[2,3,4], J. Prado-Gonjal[1] y E. Castillo-Martínez[1]

[1]*Dpto. Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Pl. de las Ciencias 2, Moncloa – Aravaca, 28040, Madrid, España*

[2]*Helmholtz Institute Ulm, Helmholtzstrasse 11, 89081, Ulm, Alemania*

[3]*Karlsruhe Institute of Technology, P.O Box 3640, 76021, Karlsruhe, Alemania*

[4]*Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla, Consejo Superior de Investigaciones Científicas – Universidad de Sevilla, C/ Américo Vespucio 49, 41092, Sevilla, España*

juanandn@ucm.es

Palabras clave: *bronce de wolframio tetragonal (TTB), baterías de ion-potasio (KIBs), ánodo*

Las KIBs han generado un notable interés gracias a su bajo coste, la abundancia de K, su bajo potencial de reducción, la rápida difusión de K^+ en electrolitos líquidos, además de su analogía con las LIBs y NIBs[1]. No obstante, el mayor tamaño de K^+ frente a Li^+[2] requiere materiales de electrodo que posean una matriz tridimensional rígida y túneles amplios que permitan su inserción con mínima deformación estructural. Esto motiva el uso de óxidos no estequiométricos tipo bronce de wolframio[3], basados en redes de octaedros WO_6 que originan distintas familias cristalográficas: HTB, TTB-I, TTB-II y CTB[4]. En este contexto, en la estructura TTB, los túneles de tres, cuatro y cinco lados mantienen la neutralidad de carga mediante la ocupación preferente de estos dos últimos alojando iones a lo largo del eje *c*[5].

En este trabajo, se ha sintetizado el material tipo TTB KNb_2O_5F[5], mediante rutas cerámicas en atmósferas inertes (Ar o N_2), con el objetivo de optimizar su estabilidad estructural y su desempeño como ánodo en KIBs. La difracción de neutrones (DNP) confirma una estructura *P4/mbm* no distorsionada en todas las muestras, con composiciones consistentes de K y Nb, mientras que TEM revela *streaking* asociado a orden de corto alcance K/vacante o Nb/vacante. El rendimiento electroquímico se evaluó mediante ciclado galvanostático usando 2,5 M KFSI (TEP) como electrolito. En medias celdas, el material permitió la inserción reversible de ~1,5 K^+/f.u. a C/10, y en celdas completas frente a Prussian White como cátodo, demostró un comportamiento prometedor como ánodo para KIBs.

Referencias:

[1] Eftekhari, A. *et al*. *ACS Appl Mater Interfaces* **2017**, 9 (5), 4404-4419.
[2] Shannon, R. D. *Acta Crystallogr, Sect A* **1976**, 32 (5), 751-767.
[3] Wold, A. *et al*. *Solid State Chemistry: Synthesis, Structure, and Properties of Selected Oxides and Sulfides*. Chapman & Hall, Inc, New York, 1993.
[4] Haldolaarachchige, N. *et al*. *Physical Review B* **2014**, 89 (10), 104520.
[5] Han, Y. *et al*. *Chemistry of Materials* **2016**, 28 (9), 3139-3147.



ECLECTIC: ENGINEERING OF RECOMBINANT ANTIBODIES AND NANOMATERIALS FOR BIOSENSORS APPLIED TO SEPSIS DIAGNOSIS

Ezequiel Rubiales Romero, Pablo Purohit Pacheco y Ana Belén Descalzo López, Elena Benito Peña*

[1] *Química Analítica, Facultad de Química, Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias 2, 28040 Madrid.*

Ezequier@UCM.es

Palabras clave: *Sepsis; electrochemiluminescence; recombinant antibodies; nanobodies; phage display; biosensors; SpyTag/SpyCatcher; procalcitonin*

Sepsis is a life-threatening condition that requires rapid and accurate diagnosis [1]. This doctoral thesis, developed within the European MSCA doctoral network ECLectic (Project 101119951), aims to develop optical and electrochemiluminescence (ECL)-based bioanalytical platforms for early sepsis detection. The work focuses on three main objectives: First, the selection and production of recombinant antibodies (rAbs) against key sepsis biomarkers—procalcitonin (PCT), C-reactive protein (CRP), and neopterin—using phage display [2], together with the recombinant production of these biomarkers for assay development. Second, the evaluation of the SpyTag/SpyCatcher system for efficient rAb conjugation to protein reporters, ECL, or photoluminescent-active materials. Lastly, the development of photoluminescent, bioluminescent, or ECL immunoassays using the previously labeled rAbs for the detection of targeted sepsis biomarkers. Our preliminary results include the production of a stable recombinant PCT (stPCT) fused to the fast-folding fluorescent protein mScarlet3 to improve the marker's expression, folding, solubility, and yield, while enabling real-time monitoring during protein purification. Additionally, a SpyCatcher–nanobody anti-PCT chimera was successfully conjugated to SpyTag-functionalized carbon dots, demonstrating the feasibility of this molecular superglue strategy for nanomaterial–antibody bioconjugation.

**Academic Supervisor and MSCA Network Supervisor*

Referencias:

[1] Singer, M.; Deutschman, C. S.; Seymour, C. W.; et al. The Third International Consensus Definitions for Sepsis and Septic Shock (Sepsis-3). *JAMA*. **2016**, 315, 801-810.
[2] Yan, J.; Wang, P.; Zhu, M.; et al. Characterization and applications of Nanobodies against human procalcitonin selected from a novel naïve Nanobody phage display library. *J. Nanobiotechnol.* **2015**, 13, 34.
[3] Zakeri, B.; Fierer, J. O.; Çelik, E.; Chittock, E. C.; Schwarz-Linek, U.; Moy, V. T.; Howarth, M. Peptide tag forming a rapid covalent bond to a protein, through engineering a bacterial adhesin. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **2012**, 109, E690-E697.
[4] Yang, L.; Li, J. Recent Advances in Electrochemiluminescence Emitters for Biosensing and Imaging of Protein Biomarkers. *Chemosensors*. **2023**, 11(8), 432.
[5] Gadella, T. W. J., Jr.; van Weeren, L.; Stouthamer, J.; et al. mScarlet3: a brilliant and fast-maturing red fluorescent protein. *Nat. Methods*. **2023**, 20, 541-545



UV-Assisted LIBS for the Direct Analysis of Microplastics in Environmental Samples

Marcos López Ochoa [a], Javier Urraca-Ruiz [a], David Galán-Madruga [b], Jorge O. Cáceres [a]

[a] *Grupo de Investigación Química Laser, Departamento de Química Analítica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Plaza de Ciencias 1, 28040 Madrid, Spain*

[b] *Centro Nacional de Sanidad Ambiental. Instituto de Salud Carlos III, Ctra. Majadahonda-Pozuelo km 2.2, 28220 Majadahonda, Madrid, Spain*

marclo06@ucm.es

Keywords: *Microplastics, UV-LIBS, µ-LIBS, Heavy Metals, Emergent Pollutants*

This study proposes an innovative methodology based on the incorporation of ultraviolet light into µ-LIBS equipment. This technology has been developed to measure microplastics (MPs) in environmental contamination samples. The modified setup involves using 365-nm UV light and a microscope camera to locate MPs in a sample based on their characteristic blue fluorescence [1]. Once the UV light was installed, an assessment was conducted of the role MPs play as transport vectors for heavy metals in the context of air pollution. To do this, the MPs present in air filters were transferred to double-sided adhesive tape, which acts as both an immobilization agent for the MPs and a physical support. Once an MP was located in the sample using a microscope camera, individual µ-LIBS measurements were performed in single-shot mode.

This study also provides an assessment of how the transport properties of MPs vary depending on the environment. To this end, samples were collected at three different locations: an urban environment (heavily influenced by traffic), a suburban environment (with lower pollution levels), and a rural environment. The study reveals variations in the presence of heavy metals on the surface of MP particles in the PM10 atmospheric particulate matter fraction, intending to assess this additional risk posed by exposure to inhalable MP particles.

References:

[1] Cárdenas-Escudero, J.; S. Deylami, M. López Ochoa, J. Urraca Ruiz, D. Galán-Madruga, Cáceres, J.O.; etc. Elucidating microplastic's seasonal occurrence in urban indoor and outdoor aerosol. Science of The Total Environment, **2025**. 991: p. 179896

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA

SAQA 2026

BIOSESORES ELECTROQUÍMICOS APLICADOS A LA INDUSTRIA ALIMENTARIA

Jorge Urraca Ruiz

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

jorgeurr@ucm.es

Palabras clave: *biosensor, tirosinasa, nanomateriales, glucosa, polifenoles, electrocatálisis.*

En la actualidad, la seguridad alimentaria supone una prioridad fundamental para la sociedad. Resulta imprescindible dotar a los responsables de su garantía de herramientas adecuadas, rápidas, versátiles y eficientes para la cuantificación de contaminantes, agentes biológicos y metabolitos de interés.
En la presente tesis se han diseñado y desarrollado biosensores electroquímicos de arquitectura híbrida que incorporan enzimas del tipo oxidasas como elementos biológicos de reconocimiento. Estas enzimas catalizan reacciones de oxidación-reducción sobre la superficie del electrodo en presencia de sus correspondientes sustratos, generando una señal eléctrica susceptible de ser medida. En particular, se emplearon las enzimas tirosinasa y glucosa oxidasa [1]. La primera cataliza la oxidación de polifenoles simples presentes en bebidas y otros alimentos, mientras que la segunda [2] oxida la glucosa, permitiendo su determinación en muestras de leche y vinos blancos y tintos.
Dichos electrodos fueron caracterizados y optimizados con el fin de maximizar su rendimiento analítico. Asimismo, se evaluó su comportamiento en términos de sensibilidad y selectividad. Los resultados fueron validados frente a los proporcionados por métodos analíticos de referencia.

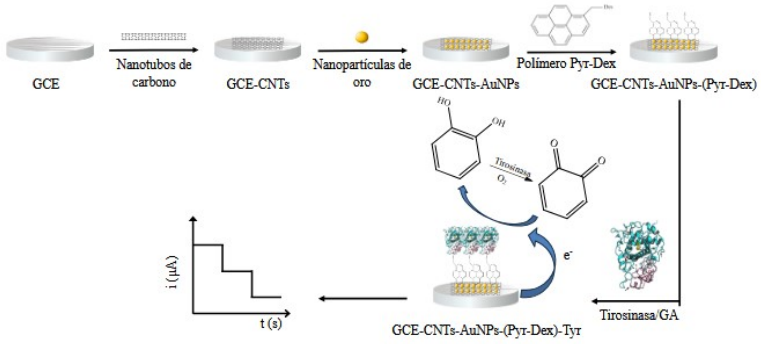


Figura 1: Esquema de la preparación y el funcionamiento de un biosensor diseñado

Referencias:

[1] Urraca, J.; Zurita, I.A.; Sánchez, A.;Vilela, D.; Martínez-Ruiz, P.; Ojeda, I.; Villalonga, R.Ferrocene-branched polymers via the Ugi multicomponent reaction for an integrated and reagentless amperometric glucose biosensor.*(En preparación)*

[2] Samimi, F.; Urraca, J.; Villalonga, A.; García-Díez, E.; Sánchez, A.; Ojeda, I.;Salavati-Niasari, M.; Villalonga, R. Electrodos nanocompuestos electrocatalíticos de $Mn_2Mo_3O_8$/MnO-carbono para la detección de peróxido de hidrógeno y glucosa. *Molecules*-4345320 (2026) (Aceptado)

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA

SAQA 2026

BULK THERMAL POLYMERIZATION OF MALONONITRILE DIMER: KINETIC STUDY AND CONSTRUCTION OF BYDIMENSIONAL TRIAZINE NETWORKS

Juan Francisco Ruiz-Guerrón[1], Marta Ruiz-Bermejo[2], José Luis de la Fuente[1]
[1]*Instituto Nacional de Técnica Aeroespacial "Esteban Terradas" (INTA) Ctra. Torrejón-Ajalvir, km 4, Torrejón de Ardoz, 28850 Madrid, Spain.*[2]*Centro de Astrobiología (CAB, CSIC-INTA) Ctra. Torrejón-Ajalvir, km 4, Torrejón de Ardoz, 28850 Madrid, Spain.*
jruigue@inta.es

Keywords: *Malononitrile dimer, Bulk polymerization, Reaction kinetic, Autocatalytic mechanism, Polymer based on triazine.*

The search for new polymerization pathways based on triple-bond building blocks represents a pivotal challenge in materials science, prioritizing operational simplicity, high efficiency, low cost, and environmental sustainability. In this context, our group has previously demonstrated that the thermally induced polymerization of amino-nitrile monomers, such as diaminomaleonitrile and aminomalononitrile, constitutes a valuable alternative for yielding materials with promising optoelectronic properties and interesting applications. As a natural evolution toward more complex multinitrile systems, this joint work presents the malononitrile dimer, 2-amino-1,1,3-tricyanopropene (ATCP), as a functional and versatile monomer for the straightforward, one-pot, solvent- and catalyst-free synthesis of nitrogen-rich conjugated organic materials featuring triazine linkages. In the first stage of the investigation, a comprehensive kinetic and analytical study of the bulk polymerization process was addressed via differential scanning calorimetry (DSC) under both dynamic and isothermal conditions. The reaction was demonstrated to follow an extremely fast, non-radical autocatalytic mechanism in the molten state, which efficiently initiates at relatively low temperatures upon monomer melting. By means of complementary techniques, such as thermogravimetry-DSC and *in situ* mass spectrometry, simultaneous deamination and dehydrocyanation processes were identified as the primary elimination pathways during networks formation. Utilizing these optimized kinetic parameters, the thermal polymerization of ATCP was successfully explored at a preparative scale. Through a high-throughput route at 230 °C, with an exceptionally short reaction time of only 15 minutes and air tolerance, the resulting polymeric materials were isolated. Exhaustive microstructural characterization (via FTIR, NMR, XPS, XRD, and SEM) confirmed the predominant formation of a two-dimensional macrostructure based on triazines units. Finally, the optoelectronic properties of these systems revealed superior absorption in the visible spectrum (> 420 nm) compared to similar traditional conjugated polymers, as covalent triazine frameworks and graphitic carbon nitrides. These findings successfully postulate ATCP-derived polymers as a new generation of efficient photocatalysts, accessible through a green, rapid, and easily scalable synthetic strategy.

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA

SAQA 2026

MODIFICACIÓN POST-SINTÉTICA DE NANOPARTÍCULAS DE FERRITA MEDIANTE IRRADIACIÓN LÁSER PULSADA

F. Martín[1,], G. González-Rubio[1], H. Gavilán[1]*

[1]*Departamento de Química Física, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, 28040, Madrid, Spain*

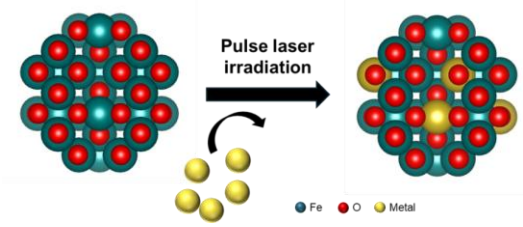
femart10@ucm.es

Palabras clave: *Irradiación láser pulsada, Nanopartículas magnéticas*

Las nanopartículas magnéticas presentan un gran interés debido a sus aplicaciones en biomedicina, sensores, catálisis y tecnologías energéticas.[1] Sus propiedades dependen de parámetros como el tamaño, la morfología, la composición y la estructura interfacial, por lo que las estrategias de modificación post-sintética representan una vía atractiva para ajustar su comportamiento.

En este trabajo se estudia la irradiación láser pulsada como una estrategia para modificar nanopartículas magnéticas basadas en ferritas. La interacción entre los pulsos láser y las nanopartículas coloidales puede inducir transformaciones estructurales y composicionales a escala nanométrica, ofreciendo nuevas posibilidades para ajustar sus propiedades magnéticas.[2]

Los efectos del tratamiento láser se evalúan mediante técnicas de caracterización estructural, coloidal y magnética, prestando especial atención a la respuesta magnética y a la disipación de energía bajo campos magnéticos alternos. Los resultados ponen de manifiesto el potencial de la irradiación láser pulsada como una herramienta versátil para la ingeniería de nanomateriales magnéticos y el desarrollo de sistemas funcionales avanzados.



Esquema 1: Modificación de nanopartículas de ferrita mediante irradiación láser pulsada.

Agradecimientos
Este trabajo ha sido financiado por el proyecto **ERC Starting Grant TIME4NANO (101164205)**.

Referencias:

[1] H. Gavilán, et al. "Scale-up approach for the preparation of magnetic ferrite nanocubes and other shapes with benchmark performance for magnetic hyperthermia applications**",** *Nat. Protoc*. **2023**, *18*, 783–809.
[2] G. González-Rubio et al. "Reshaping, Fragmentation, and Assembly of Gold Nanoparticles Assisted by Pulse Lasers", *Acc. Chem. Res*. **2016**, *49*, 678–686.

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA
SAQA 2026

Effect of Ba Doping on the Stability and Electrochemical Performance of $SrFeO_{3-\delta}$ Based Air Electrodes for Solid Oxide Cells

Pedro López-Tello[1], Daniel Muñoz-Gil[1] and Domingo Pérez-Coll[2]

[1]*Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Avda. Complutense s/n, 28040, Madrid*

[2]*Instituto de Cerámica y Vidrio (ICV), CSIC, C/Kelsen, 5, 28049, Madrid*

plopezte@ucm.es

Keywords: *Solid Oxide Cells, air electrode, $SrFeO_{3-\delta}$, Pechini method, Ba-doping, electrode polarization resistance, total conductivity, thermal expansion coefficient*

Solid oxide cells (SOCs) are promising technologies for green hydrogen production and power generation, but their widespread deployment is hindered by high operating temperatures (800-1000 °C) and a strong reliance on Co and rare-earth elements within certain components of the cell, as is the case for the air electrode [1]. Lowering the operating temperature to the intermediate range (500-750 °C) and exploring alternative Co and rare-earth free air electrodes such as $SrFeO_{3-\delta}$ constitute a promising strategy to address this challenge, although their overall electrochemical performance and stability still need to be improved [2]. In this work, the effects of Ba-doping on the Sr site impacting the structure, stability and electrochemical properties of $Sr_{1-x}Ba_xFeO_{3-\delta}$ ($0 \le x \le 0.5$) were investigated. The materials were synthesized via a modified Pechini method and characterized in terms of their crystal structure, microstructure, thermal and chemical stability, as well as their electrical and electrochemical properties. The results confirm the successful synthesis of highly pure compounds with submicrometric grain size and excellent thermal stability. Ba doping enhances the total conductivity values, which increases from 17 $S \cdot cm^{-1}$ for undoped $SrFeO_{3-\delta}$ to 27, 44, and 85 $S \cdot cm^{-1}$ for x= 0.15, 0.25 and 0.50, respectively, at 700 °C. Conversely, the electrode polarization resistance at 700 °C increases from 0.29 $\Omega \cdot cm^2$ for $SrFeO_{3-\delta}$ to 0.42, 0.51, and 0.67 $\Omega \cdot cm^2$ as the Ba concentration increases to 0.15, 0.25 and 0.50, respectively, although these values remain within the typical range reported for air electrodes [1]. The thermal expansion coefficient in the high temperature range increases from $32 \cdot 10^{-6}\ K^{-1}$ for the undoped compound to $41–50 \cdot 10^{-6}\ K^{-1}$ for the Ba-doped materials, while still falling within the typical range of Fe- and Co- based perovskites for air-electrode applications [1].

References:

[1] Mather, G.C.; Zapata-Ramírez, V.; Pérez-Coll, D.; Solid oxide fuel cells: state of the art, nanomaterials, and advanced architectures. In *Hydrogen Technology*. Elsevier, **2024**, pp. 271-338.

[2] Brett, D.J.L.; Atkinson, A.; Brandon, N. P.; Skinner, S.J.; Intermediate temperature solid oxide fuel cells, *Chem Soc. Rev.*, **2008,** 37, 1568-1578

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA
SAQA 2026

Efecto de la reutilización del polvo sobre el comportamiento a la corrosión de la aleación Al10SiMg fabricada por LPBF

I. Hidalgo-González[1], R. Arrabal[1], J.M. Vega[1], M. Mohedano[1], J. Díaz[2], E. Matykina[1]

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

2) Madit Metal S.L., Ugaldeguren III, Parc. 26 – 1, 48170 Zamudio, Bizkaia, España)

ihidal01@ucm.es

Palabras clave: *Al10SiMg, manufactura aditiva, LPBF, Flash-PEO, corrosión*

La manufactura aditiva (MA) es una tecnología innovadora y en rápida expansión que ha experimentado un crecimiento sustancial en los últimos años. En comparación con los procesos de fabricación convencionales, permite la producción de componentes con geometrías altamente complejas, a menudo inalcanzables mediante métodos tradicionales. La fusión por láser en lecho de polvo (LPBF) es una de las técnicas de MA más comunes y consolidadas para aleaciones de Al. El proceso LPBF requiere solo una pequeña cantidad de material en polvo, mientras que el polvo no utilizado puede recuperarse y reutilizarse, contribuyendo al ahorro energético y a una mayor sostenibilidad ambiental. Sin embargo, la reutilización repetida del polvo aumenta la absorción de oxígeno y la contaminación, y reduce su densidad y fluidez, dando lugar a una mayor porosidad. Estos efectos pueden afectar negativamente la resistencia a la corrosión, limitando el rendimiento en servicio. La modificación superficial mediante recubrimientos protectores ha surgido como una alternativa prometedora para superar esta limitación. Las estrategias basadas en tecnologías PEO (Plasma Electrolytic Oxidation) permiten mejorar significativamente el comportamiento frente a la corrosión del Al. En este trabajo se evalúa el efecto de la reutilización del polvo sobre el comportamiento frente a la corrosión de la aleación Al10SiMg protegida mediante Flash-PEO. Los sistemas desarrollados a partir de polvos con diferentes ciclos de reutilización fueron caracterizados mediante diversas técnicas como SEM, XRD, EPMA y perfilometría óptica. El comportamiento frente a la corrosión se investigó a partir de espectroscopía de impedancia electroquímica y ensayos de polarización potenciodinámica cíclica, utilizando una solución de NaCl al 3,5 % en peso como medio corrosivo. Se observó que la reutilización del polvo afecta a la topografía superficial final de las muestras, modificando su rugosidad y mojabilidad. No obstante, el desarrollo de los recubrimientos Flash-PEO no se vio comprometido, dando lugar a una mejora de uno a dos órdenes de magnitud (~ 10^5-10^6 $\Omega \cdot cm^2$) en el módulo de impedancia en comparación con los sustratos sin protección (~ 10^4 $\Omega \cdot cm^2$).



COLAJE EN CINTA DE NIO:YSZ PARA LA FABRICACIÓN DE ELECTRODOS DE HIDRÓGENO

A. Alonso[1,2], C. Melo[3], D. Pérez[1] y R. Moreno[1]

[1]*Instituto de Cerámica y Vidrio – CSIC. C/ Kelsen 5. 28049 Madrid, España*

[2]*Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Plaza de las Ciencias, s/n (Ciudad Universitaria), 28040, Madrid, España*

[3]*Universidad Nacional de Colombia, Cra 30 #45-03, 111321, Bogotá, Colombia.*

a.alonso.m@csic.es

Palabras clave: *Colaje en cinta, SOEC, Porosidad, electrodo de hidrógeno.*

La optimización del electrodo de combustible en celdas electrolizadoras de óxidos sólidos es clave para mejorar su rendimiento electroquímico, obtener una apropiada estabilidad mecánica, aumentar la durabilidad y reducir la temperatura de operación. En este trabajo se estudia el desarrollo y la optimización de formulaciones del composite NiO–YSZ para el procesado de láminas homogéneas del electrodo de combustible mediante la técnica de *colaje en cinta*. Debido a la necesidad que tienen estos soportes de ser suficientemente porosos para permitir el transporte eficaz de las especies gaseosas, se ha utilizado un almidón de maíz para generar la porosidad deseada tras su calcinación.

De esta manera, se han preparado diferentes formulaciones para las suspensiones del composite NiO–YSZ utilizando agua como medio de dispersión. Se ha evaluado cómo afecta a la reología de las suspensiones la variación entre 5 y 12.5 %p. de formador de poro añadido sobre los óxidos sólidos, la variación total del contenido en sólidos entre 40 y 50 %vol., y la variación del contenido de aditivos, con el objetivo de optimizar las condiciones de conformado para obtener cintas homogéneas, con espesores controlados, y propiedades mecánicas que permitan su manejabilidad. Para cada formulación, se ha estudiado la densidad en verde de la cinta, la contracción del espesor durante la sinterización y la densidad de las piezas calcinadas. Tras la sinterización de las piezas, se ha analizado la microestructura, relacionándola con los parámetros de procesamiento y se ha realizado un estudio de las propiedades mecánicas y electroquímicas para evaluar sus prestaciones reales durante su funcionamiento.

Referencias:

[1] Moreno, R. Colloidal processing of ceramics and composites. *Advances in applied ceramics*, **2012** *111*(5-6), 246-253.
[2] Hotza, D., Nishihora, R. K., Machado, R. A., Geffroy, P. M., Chartier, T., & Bernard, S. Tape casting of preceramic polymers toward advanced ceramics: A review. **2019** *International Journal of Ceramic Engineering & Science*, *1*(1), 21-41.

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID

X SIMPOSIO ANUAL QUÍMICA AVANZADA

SAQA 2026

ESTRATEGIAS MACROMOLECULARES PARA LA ESTABILIZACIÓN Y EL AUTOENSAMBLAJE CONTROLADO DE NANOCRISTALES METÁLICOS EN MEDIOS ORGÁNICOS

I.Segura De Orta[1], L. Guijarro Cisneros[2], M.J. Mancheño[2], J.Osío Barcina[2], A. Guerrero-Martínez[1], G. González-Rubio[1]

[1] *Departamento de Química Física, Universidad Complutense de Madrid, Avenida Complutense s/n, 28040 Madrid, España*

[2] *Departamento de Química Orgánica, Universidad Complutense de Madrid, Avenida Complutense s/n, 28040 Madrid, España*

ivsegura@ucm.es

Palabras clave: ***nanopartículas de oro, modificación post-polimerización, surfactantes poliméricos, autoensamblaje dirigido, interacciones ácido-base.***

Las **nanopartículas de oro** (AuNPs) sufren agregación macroscópica espontánea en medios orgánicos debido a las fuerzas atractivas de van der Waals [1,2]. Para solucionar esta inestabilidad, desarrollamos una plataforma tipo "LEGO" basada en un esqueleto reactivo de poli(acrilato de pentafluorofenilo) (P(PFPA)) obtenido mediante polimerización RAFT [3]. Este precursor permite una **modificación post-polimerización** cuantitativa y secuencial mediante sustitución nucleofílica de sus ésteres activos laterales.

Como estrategia de estabilización estérica, el esqueleto se funcionalizó con derivados de cisteína (puntos de anclaje Au-S) y colas de poliestireno monofuncional. Tras la desprotección ácida de los tioles, estos **surfactantes poliméricos** lograron la transferencia de fase y estabilización homogénea de las AuNPs en tetrahidrofurano (THF). El éxito del recubrimiento se confirmó mediante espectroscopía UV-Vis.

Finalmente, para guiar el **autoensamblaje dirigido** de los nanocristales, se explotó la modularidad del intermedio reactivo mediante dos rutas divergentes que generan interfaces iónicas complementarias: un componente básico (P(AMP)) y un componente ácido (P(AA)). El acoplamiento por **interacciones ácido-base** interfaciales es capaz de vencer la resistencia estérica periférica del poliestireno [4], forzando de manera exclusiva la dimerización regioselectiva de las nanopartículas en disolventes orgánicos y evitando el colapso coloidal del sistema.

Referencias:

[1] Guerrero-Martínez, A. et al. From Individual Nanoparticles to Supramolecular Assemblies: Physical and Chemical Properties. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, 50, 5499–5503.
[2] Song, Z. et al. Surface-Modified Gold Nanoparticles for Controlled Assembly in Organic Solvents. *ACS Appl. Opt. Mater.* **2024**.
[3] Chen, M. et al. Light-Controlled Radical Polymerization: Mechanisms, Methods, and Applications. *Chem. Rev.* **2016**, 116, 10167–10211.
[4] Lin, X. et al. Polymeric Ligand-Mediated Regioselective Bonding of Plasmonic Nanoplates and Nanospheres. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, 142, 17282–17286.