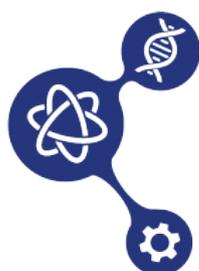


I Simposio de Estudiantes del Máster en Ciencia y Tecnología Químicas



Lunes, 26 de Junio de 2023

LIBRO DE RESÚMENES



**FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS**

I Simposio de Estudiantes de Máster en Ciencia y Tecnología Químicas

Lunes, 26 de Junio de 2023-9:30 horas

Sala de Tesis de la Biblioteca (Sótano Edificio D, Facultad de Ciencias Químicas)

Presentaciones de 10' (tiempo máximo)+5' de discusión (tiempo máximo)

9:30-9:35 Bienvenida del Coordinador de Máster

Sesión 1. Química Inorgánica (Moderador: Adrián Margüello Molina)

- 9:35-9:50 Mónica Chivite Lacaba.
Novel SrCo_{1-x}Zr_xO_{3-δ} (x = 0.05, 0.08) perovskites: promising cathodes for solid oxide fuel cells
- 9:50-10:05 Arturo Pareja Mayo
Aplicación de nanomateriales magnético-fluorescentes en hipertermia
- 10:05-10:20 Víctor Durán Egado
New sustainable battery cathodes based on metal-organic frameworks.
- 10:20-10:35 Dawid Feler
Nanoóxidos y nanohidróxidos de metales de transición funcionales
- 10:35-10:50 Jaime de la Lastra Martínez
Preparación y estudio de muestras de ortofosfatos fluorescentes
- 10:50-11:05 Anthony Alexander Vásquez Medina
Síntesis y caracterización de nuevos electrodos para conversión de energía en pilas de combustible de óxido sólido

Sesión 2. Ingeniería de Materiales (Moderador: Ana Puente Santamaría)

- 11:05-11:20 Jaime Chaves González
Validación de materiales a elevada temperatura en mezclas de nitratos para aplicaciones en componentes de las plantas termosolares CSP.
- 11:20-11:45 Descanso

Sesión 3. Química Física (Moderador: Dawid Feler)

- 11:45-12:00 Alba García Frutos
Simulación en ordenador del plegamiento de proteínas

- 12:00-12:15 Ana Puente Santamaría
Comportamiento de biopolímeros en disolución y en interfases: Aplicaciones en cosmética
- 12:15-12:30 Julia Monge Corredor
Sistemas coloidales para aplicaciones en cosmética facial

Sesión 4. Química Analítica (Moderador: Jaime Chaves González)

- 12:30-12:45 Brandon Steven Linian Huatay
Aproximaciones de biosensado basadas en micromotores Janus para la determinación del intervalo post mortem
- 12:45-13:00 Adrián Margüello Molina
Desarrollo de nuevos nanosistemas como agentes fotosensibilizantes para terapia fotodinámica: Síntesis y evaluación mediante herramientas (bio)analíticas
- 13:00-13:15 Álvaro Rico Hermoso
Monitorización de biomarcadores del microbioma humano relacionados con la enfermedad del Alzheimer
- 13:15-13:30 Aurora Río Calonge
Desarrollo de métodos cromatográficos para el análisis de micotoxinas en alimentos
- 13:30-13:45 Miguel Ángel Merino Sierra
Biosensores basados en proteínas luminiscentes para el análisis de contaminantes en alimentos

Novel SrCo_{1-x}Zr_xO_{3-δ} (x = 0.05, 0.08) perovskites: promising cathodes for solid oxide fuel cells

Mónica Chivite Lacaba

Departamento Química Inorgánica

The "Hydrogen Economy", based on replacing fossil fuels with this gas, which burns cleanly and releases more energy than any other, is a clear example of a circular economy. To achieve this, the current "hydrocarbon-combustion engine" binomial must be replaced by the "hydrogen-fuel cell" binomial. Intermediate temperature solid oxide fuel cells are electrochemical devices that convert the chemical energy of H₂ into electrical energy at temperatures between 700 and 850°C. These devices are characterized by high efficiency, stability and clean conversion [1,2]. At present, different cathode materials that can perform at these temperatures are being studied. One of the most promising cathode materials is the high-temperature cubic phase of SrCoO_{3-δ} perovskite due to its high electrical conductivity and the considerable number of oxygen vacancies it is able to accommodate. However, this is not the case for the hexagonal phase, which is easily stabilized below 900°C by cooling the cubic perovskite in air.

Stabilization of a tetragonal perovskite structure in the SrCoO_{3-δ} system at room temperature has been achieved through several chemical substitutions that have been performed either at the Sr position (Sr_xM_{1-x}CoO_{3-δ}) or at the Co position (SrCo_xM_{1-x}O₃) with atoms such as Er, Tb, Dy and Ti, Sb or Ru respectively [3-5]. Based on previous studies, in which a small percentage of highly charged cations was introduced in the Co sublattice in order to destabilize the columns of CoO₆ octahedra sharing faces in the 2H-hexagonal phase, the introduction of Zr as the highly charged cation with a percentage of 5 and 8% in the Co position has been explored. Additionally, their crystal structure has been studied by XRD and correlated with mechanical and electrical properties. The chemical compatibility study between the samples and the electrolyte (LSGM) revealed that the compounds do not interact at high temperatures. Dilatometric analysis measurements showed a compatible thermal expansion with the LSGM electrolyte over the whole temperature range measured demonstrating a good mechanical compatibility with it. Furthermore, the good conductivity values (~83 S·cm⁻¹ at 850 °C) indicated that they are suitable for cathodes in solid oxide fuel cells. Finally, the cells prepared with an electrolyte (LSGM) supported configuration provided good current densities, with a maximum output power around 600 mW/cm² with pure H₂ as fuel.

References

- [1] Joshua O., S., Ejura G., J., Olokunbemi, & Oluwaseun A., Y. (2014). *Fuel Cell Types and Factors Affecting Them*.
- [2] Hussain, S., Yangping, L. *Review of solid oxide fuel cell materials: cathode, anode, and electrolyte. Energy Transit* **4**, 113–126 (2020)
- [3] V. Cascos, A. Aguadero, G. Harrington, J.A. Alonso, M.T. Fernández-Díaz. *Journal of The Electrochemical Society*. 2017, **164**, F3019 - F3027.
- [4] De la Calle, C; Aguadero, A.; Alonso, J.A.; Fernández-Díaz, M.T. *Solid State Sciences* 2008, **10**, 1924.
- [5] V. Cascos, M.T. Fernández, J.A. Alonso. *Renewable Energy*. 2019, **133**, 205 - 215.

Primer Simposio de Estudiantes del Máster en Ciencia y Tecnología Químicas
26 de Junio 2023

Aplicación de nanomateriales magnético-fluorescentes en hipertermia

Arturo Pareja Mayo

Departamento Química Inorgánica

Las ciencias químicas juegan un importante papel abordando desafíos globales. En este simposio nos centraremos en la salud humana, y más concretamente en el tratamiento de células cancerosas en el campo de la biomedicina: la terapia de hipertermia. Diversos nanomateriales pueden emplearse en esta técnica, pero se analizarán aquellos obtenidos en el TFM, nanomateriales magnético-fluorescentes que se combinan en una estructura tipo core@shell.

New sustainable battery cathodes based on metal-organic frameworks.

Víctor Durán Egido

Departamento de Química Inorgánica

Research in battery cathodes remain to be an important challenge in the development of high energy, safe and efficient batteries that feed portable devices and enable our modern lifestyle¹. Metal-organic frameworks (MOFs) stand as promising candidates due to their soft synthesis conditions, their inherently porous structure tunability and the possibility of mixing both metal and organic redox-active counterparts, resulting in low-cost high-capacity electrodes. For the metallic atom, a metal of high relative abundance in earth's crust is desirable, especially if it has a high-voltage redox pair² (e.g., $\text{Cu}^{2+}/\text{Cu}^+$, $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{2+}$, $\text{Mn}^{4+}/\text{Mn}^{3+}$). Meanwhile, the organic linker should be obtained from natural sources or through easy-non-polluting synthesis routes, as well as presenting high-voltage redox pairs³ (e.g., TCNQ, quinones or sulfonamides with electron-withdrawing groups) to boost the energy contribution of the resulting hybrid material to the electrochemical cell. Beside mixed-redox activity, coupling aromatic or conjugated ligands and transition metals enables a high electronic conductivity⁴, securing a good electrical contact between electrode material itself and current collectors, therefore reducing the use of conductive additives. However, combining good electronic and electrochemical properties in the same framework requires a deep study of interactions taking part within the coordination network; hence some examples of complete structure-composition-properties relationship studies will be highlighted.

References

1. Manthiram, A. A reflection on lithium-ion battery cathode chemistry. *Nature Communications* vol. 11 Preprint at <https://doi.org/10.1038/s41467-020-15355-0> (2020).
2. Fang, C. *et al.* A Metal-Organic Compound as Cathode Material with Superhigh Capacity Achieved by Reversible Cationic and Anionic Redox Chemistry for High-Energy Sodium-Ion Batteries. *Angewandte Chemie* **129**, 6897–6901 (2017).
3. Wang, J. *et al.* Conjugated sulfonamides as a class of organic lithium-ion positive electrodes. *Nat Mater* **20**, 665–673 (2021).
4. Wang, J. *et al.* High performance Li-, Na-, and K-ion storage in electrically conducting coordination polymers. *Energy Environ Sci* **15**, 3923–3932 (2022).

Aproximaciones de biosensado basadas en micromotores Janus para la determinación del intervalo *post mortem*

Brandon Steven Linian Huatay

Departamento de Química Analítica

La estimación del intervalo *post mortem*, o el tiempo que transcurre entre la muerte de una persona y el descubrimiento de sus restos, es de vital importancia para el proceso de investigación forense. Existen una plétora de análisis físicos, entomológicos, etc., sin embargo, sigue siendo un parámetro muy complejo sujeto a una gran incertidumbre. Los micromotores son micropartículas capaces de moverse autónomamente en pequeños volúmenes de muestra, constituyendo un nuevo paradigma como sensores autopropulsados.

En este Trabajo de Fin de Máster se describe una estrategia basada en micromotores Janus de grafeno y nanopartículas de ferrita para la determinación colorimétrica de cisteína como marcador de la data de la muestra en humor vítreo. Los grupos carboxílicos presentes en el grafeno actúan como puntos de anclaje de la cisteína, mientras que las nanopartículas de ferrita posibilitan el movimiento del micromotor mediante campos magnéticos en el humor vítreo. Una vez capturada la cisteína, los micromotores se ponen en contacto con una disolución de nanopartículas de oro, que interaccionan con la cisteína a través de su grupo tiol, produciendo un cambio en el color de la disolución que se puede medir mediante espectrofotometría UV/VIS. El método presenta una buena sensibilidad, con un intervalo de linealidad comprendido entre 70 y 200 μM , con un límite de detección de 27 μM . El método es además selectivo, como pone de manifiesto la ausencia de señal en presencia de otros potenciales aminoácidos presentes en el humor vítreo. La aplicabilidad del método se ha demostrado en el análisis de una muestra real de humor vítreo, cuantificando un intervalo *post mortem* de 22 ± 4 horas, coherente con el conocido.

El método desarrollado constituye una alternativa realista como soporte a la determinación del intervalo *post mortem*, requiriendo de solo 20 microlitros de muestra - gracias al movimiento autónomo y la mezcla de fluidos inducida por los micromotores - y con un tiempo de detección total muy bajo (menor de 3 horas).

Nanoóxidos y nanohidróxidos de metales de transición funcionales

Dawid Feler

Departamento de Química Inorgánica

Los óxidos semiconductores de metales de transición y postransición han atraído un gran interés en los últimos años en varios campos como la energía, la información o la comunicación, entre muchos otros. Entre ellos, destacan el In_2O_3 , Ga_2O_3 , ZnO o TiO_2 . Los circuitos integrados y dispositivos de alta frecuencia basados en materiales semiconductores, empleados para el procesamiento de información y comunicaciones, han sido muy efectivos en el uso de la carga del electrón. El almacenamiento masivo de la información, por otro lado, se lleva a cabo a través de la grabación magnética (discos duros, memorias magnéticas, etc.), que hace uso del espín de los electrones en materiales ferromagnéticos. De esta manera, resulta natural preguntarse si se pueden obtener dispositivos combinando ambas características con el fin de mejorar sus prestaciones. Estos dispositivos estarían compuestos por materiales en los que las propiedades magnéticas y semiconductoras estuvieran acopladas, permitiendo así almacenar la información de manera estable y duradera en el tiempo, así como acceder a ella de manera rápida y eficiente. Estos materiales existen y reciben el nombre de materiales semiconductores magnéticamente diluidos, DMS, y presentan un enorme potencial en aplicaciones para el desarrollo de dispositivos espintrónicos.

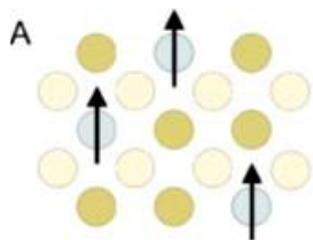


Figura 1. Esquema de la estructura de un DMS, con átomos del elemento magnético distribuidos al azar.

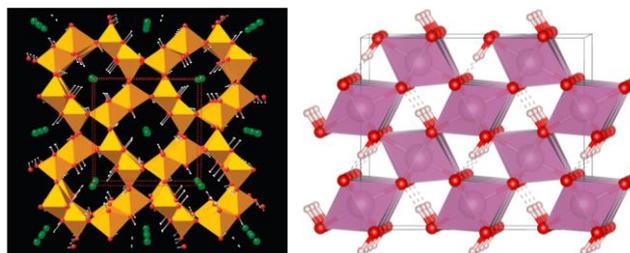


Figura 2. Estructuras cristalinas del $\beta\text{-FeOOH}$ (tipo hollandita) (izq.) y del InOOH (tipo rutilo distorsionado) (dcha.).

La preparación de dichos materiales en este trabajo se centra en la combinación de estructuras cristalográficamente relacionadas, con elementos estructurales comunes. Así, se plantea la estabilización de fases In_2O_3 dopadas con hierro pasando por una estructura intermedia como el InOOH (con un tipo estructural rutilo distorsionado), cuya armazón se puede relacionar cristalográficamente con el $\beta\text{-FeOOH}$ (con una estructura tipo hollandita) con la presencia, en ambos casos, de canales formados por cadenas de octaedros (canales 1×1 en el InOOH y 2×2 en el $\beta\text{-FeOOH}$), favoreciendo así la inserción de los átomos de hierro en una matriz semiconductor de indio.

Esta estrategia se ha llevado a cabo por medio del método de síntesis solvotermal y en sales fundidas, con una primera intención de optimizar el procedimiento para obtener estas estructuras con un potencial comportamiento como DMS.

Referencias

- [1] Xu *et al.* Inorg. Chem., **2009**. 48, 3890 – 3895. DOI: [10.1021/ic802449w](https://doi.org/10.1021/ic802449w)
- [2] Yan *et al.* Appl. Phys. Lett., **2014**. 104, 062404. DOI: [10.1063/1.4865102](https://doi.org/10.1063/1.4865102)
- [3] Wolf *et al.* Science, **2001**. 294, 1488 – 1495. DOI: [10.1126/science.1065389](https://doi.org/10.1126/science.1065389)

Desarrollo de nuevos nanosistemas como agentes fotosensibilizantes para terapia fotodinámica: Síntesis y evaluación mediante herramientas (bio)analíticas

Adrián Margüello Molina

Departamento de Química Analítica

Actualmente, el cáncer supone una de las principales causas de muerte a nivel mundial [1]. Debido a la complejidad de esta enfermedad, los tratamientos no son completamente efectivos, a pesar de que son tratamientos muy complejos y agresivos. Por ello, es necesario el desarrollo de nuevas terapias dirigidas capaces de minimizar los efectos secundarios hacia los tejidos sanos. En los últimos años, la nanotecnología ha surgido como una herramienta con múltiples aplicaciones en este campo. El uso de nanomateriales ha permitido el desarrollo de nuevos tratamientos con una mayor selectividad y eficacia en el tratamiento de enfermedades [2]. Dentro de las múltiples aplicaciones que tienen hoy en día los nanomateriales empleado en biomedicina, se encuentra su uso como agente fotosensibilizante en terapia fotodinámica [3]. Este tipo de terapia presenta unas características únicas debido a su alta selectividad que, si se combinan con las propiedades de los nanomateriales, pueden crear una nueva herramienta muy prometedora como alternativa a las terapias existentes para el tratamiento de enfermedades como el cáncer.

En trabajos anteriores se ha demostrado el potencial de las nanopartículas de rodio (RhNPs) como agente fotosensibilizante en terapia fotodinámica. Sin embargo, este tipo de nanomateriales no presentan selectividad frente a un determinado tipo celular. Por ello, en este trabajo se propone el diseño y síntesis de un nuevo nanosistema híbrido compuesto por las RhNPs, pero incluidas en una matriz porosa de sílice que actúa como transportador, y que puede ser fácilmente funcionalizada con un ligando de vectorización para lograr una mejora en la selectividad del nanomaterial frente a las células tumorales. Cada uno de los pasos de síntesis han sido caracterizados empleando diferentes técnicas analíticas. Asimismo, se ha evaluado la capacidad del nanosistema propuesto para generar oxígeno singlete al ser irradiado con radiación NIR y se ha evaluado la citotoxicidad del tratamiento fotodinámico empleando este nanosistema en un modelo tumoral preclínico de células de cáncer de cérvix (HeLa). Además, el empleo de una estrategia de metabolómica no dirigida ha permitido proponer un mecanismo de acción del tratamiento a nivel biomolecular, lo que ha permitido entender la respuesta celular ante este tratamiento, abriendo además la posibilidad de mejorar el rendimiento del mismo en un futuro.

Referencias

- [1] «Cancer», World Health Organization (WHO), 3 de febrero de 2022. https://www.who.int/health-topics/cancer#tab=tab_1 (accedido 24 de marzo de 2023).
- [2] O. C. Farokhzad y R. Langer, «Impact of Nanotechnology on Drug Delivery», ACS Nano, vol. 3, n.o 1, pp. 16-20, ene. 2009, doi: 10.1021/nn900002m.
- [3] V. P. Torchilin, «Passive and Active Drug Targeting: Drug Delivery to Tumors as an Example», Handbook of Experimental Pharmacology, vol. 197. pp. 3-53, 2010. doi: 10.1007/978-3-642-00477-3_1.

Simulación en ordenador del plegamiento de proteínas

Alba García Frutos

Departamento de Química Física

Las proteínas desempeñan todo tipo de funciones fundamentales para el correcto desarrollo de nuestro organismo. Por ello, es crucial que estas macromoléculas adopten de manera específica su estructura nativa, pues esta representa su conformación funcional a temperatura fisiológica. El proceso mediante el cual se alcanza esta estructura nativa se denomina plegamiento y, dependiendo del tamaño de la proteína y de los dominios que presente, puede ser más o menos complejo. Este proceso es muy importante, pues si las proteínas no adoptan la estructura nativa que las caracteriza, surgen las denominadas enfermedades de plegamiento.

Dada la importancia del proceso de plegamiento en proteínas, en esta memoria se ha llevado a cabo su estudio en función de la temperatura mediante el empleo del método de simulación de Monte Carlo-Metropolis, combinado con la técnica *parallel tempering*. Para ello, hemos recurrido a un modelo de grano grueso o *coarse grained* (visualizándose la cadena polipeptídica como un collar de cuentas), y un potencial de tipo Gō basado en la topología del estado nativo, lo cual nos permite verificar su formación durante el proceso. A partir de este modelo, se ha estudiado la termodinámica del plegamiento de dos proteínas con múltiples dominios discontinuos en secuencia, 1BFE (correspondiéndose esta con la tercera región de la proteína post-sináptica PSD-95) y 4AKE (perteneciente a la familia de las adenilato quinasas), para distintos valores de temperatura. Este estudio nos permite evidenciar el orden en que se pliegan los dominios, y si su plegamiento se produce de forma independiente con respecto del resto de dominios. Este hecho se evidenciará a partir de los intermedios termodinámicos que se establezcan durante el proceso y de su caracterización estructural. Para este estudio se analizarán propiedades tanto termodinámicas (curvas de capacidad calorífica y perfiles de energía de Helmholtz) como estructurales (RMSD, mapas de frecuencia de contactos nativos y RMSF) con el fin de caracterizar los estados implicados en el proceso de plegamiento de las proteínas mencionadas.

Comportamiento de biopolímeros en disolución y en interfases: Aplicaciones en cosmética

Behaviour of biopolymers in solution and interfaces: Applications in cosmetics

Ana Puente Santamaría

Departamento de Química Física

Resumen

Uno de los desafíos a los que se enfrenta la industria cosmética en la actualidad es la adaptación a la creciente demanda global de productos eco-sostenibles y a las directrices de organismos internacionales para reducir el uso de compuestos derivados del petróleo. Para cumplir con estos objetivos, además de cambios en la cadena de producción, el embalaje y el transporte, se está invirtiendo en el desarrollo de formulaciones cosméticas más biodegradables.

Una categoría de producto susceptible de ser más ecológica es la relacionada con el cuidado capilar, como champús y acondicionadores. Estos productos son sistemas multicomponentes que combinan varias clases de tensioactivos y polímeros. Dado que es importante para la industria no comprometer la eficacia de sus productos y por tanto, la satisfacción del consumidor, los esfuerzos se enfocan en encontrar alternativas a los ingredientes habituales derivados del petróleo por otros de origen natural que ofrezcan resultados similares.

Un biopolímero prometedor para sustituir algunos de esos compuestos petroquímicos, concretamente los policationes sintéticos, es el quitosano. Es un derivado de la quitina y aunque está presente principalmente en el exoesqueleto de crustáceos e insectos, también puede obtenerse de las paredes celulares de algunos hongos y plantas, convirtiéndose en un biopolímero apto para la cosmética. A pesar de que el desarrollo de nuevas formulaciones entraña un proceso de investigación y optimización cuidadoso antes de llegar al producto final, es importante continuar explorando todos los beneficios que puede aportar el quitosano, como por ejemplo, la reparación del pelo dañado. Su estructura química provoca que se presente de forma protonada en disolución, favoreciéndose su deposición sobre las superficies queratinosas cargadas negativamente, propias de las fibras capilares dañadas, permitiendo formar películas elásticas y protectoras sobre la superficie.

Además de su posible capacidad acondicionadora, resulta también interesante estudiar la interacción de este biopolímero con los tensioactivos habituales en las fórmulas capilares de lavado (como el SDS, elAPG o el CAPT) con el fin de encontrar las condiciones óptimas que permitan minimizar la cantidad de detergentes presentes en estos productos, disminuyendo así, no solo costes, si no su impacto medioambiental.

References

- Guzmán, E.; Ortega, F.; Rubio, R. G. Chitosan: A Promising Multifunctional Cosmetic Ingredient for Skin and Hair Care. *Cosmetics* **2022**, *9*, 99.

VALIDACIÓN DE MATERIALES A ELEVADA TEMPERATURA EN MEZCLAS DE NITRATOS PARA APLICACIONES EN COMPONENTES DE LAS PLANTAS TERMOSOLARES CSP.

Jaime Chaves González

Departamento Ingeniería Química y de Materiales

Introducción

La creación de energía mediante fuentes renovables se ha convertido hoy en uno de los temas más estudiados en el mundo de la investigación científica debido a la necesidad de mitigar el cambio climático y el aumento de demanda energética de la sociedad.

En este simposio se presentará la energía termosolar. Una forma de generación de energía que se basa en la recolección y concentración de la radiación solar. Esta radiación se hace incidir sobre un fluido caloportador, aumentando su temperatura y que al intercambiar con agua, genera vapor en el bloque potencia generando electricidad.

La principal problemática encontrada en este tipo de generación de energía es la corrosión que sufren los materiales en contacto con el fluido caloportador a elevada temperatura, produciéndose diferentes tipos de corrosión que pueden provocar fallos en servicio en las plantas de concentración solar (CSP).

Líneas de investigación

En este trabajo se validarán dos aleaciones inoxidables (316L y 321H) en presencia de dos sales fundidas, utilizadas en las centrales de concentración solar. Los resultados esperados serán rentabilidad de ambas aleaciones y sales de cara a su aplicación industrial en las plantas termosolares mediante la caracterización de los productos de corrosión formados.

References

Bonk A., Rückle D., Kaesche S., Braun M., Bauer T. 2019. Impact of Solar Salt aging on corrosion of martensitic and austenitic steel for concentrating solar power plants. *Solar Energy Materials and Solar Cells* 203:110162.

Gomes A., Navas M., Uranga N., Paiva T., Figueira I., Diamantino T.C. 2019. High-temperature corrosion performance of austenitic stainless steels type AISI 316L and AISI 321H, in molten Solar Salt. *Solar Energy* 177:408-419.

Preparación y estudio de muestras de ortofosfatos fluorescentes

Jaime de la Lastra Martínez

Departamento de Química Inorgánica

En base a su potencial aplicación en biomedicina, el estudio y desarrollo de nuevos fósforos con emisión en el visible por excitación en el infrarrojo medio está suscitando un gran interés en la comunidad científica. También está acaparando la atención el desarrollo de nuevos fósforos con emisión intensa en el IR. Por estos motivos, en este TFM se ha abordado la preparación y el estudio de nuevas muestras de ortofosfatos fluorescentes de composición variable $M_{1-1.5(x+y)}Yb_xTm_yZr_4(PO_4)_6$ con $M = Ca^{2+}$, Sr^{2+} y Ba^{2+} para $x:y = 0.04:0.004$, $0.06:0.006$ y $0.08:0.008$. Estas muestras se sintetizaron por combustión de los respectivos precursores en disolución en presencia de urea y a pH básico. Una vez obtenidas, para su caracterización estructural se emplearon técnicas de DRX y FTIR. Los perfiles de difracción de rayos X de las muestras puras $Ca_{0.934}Yb_{0.04}Tm_{0.004}Zr_4(PO_4)_6_{750^\circ C_{12h}}$, $Ca_{0.901}Yb_{0.06}Tm_{0.006}Zr_4(PO_4)_6_{750^\circ C_{12h}}$, $Ca_{0.868}Yb_{0.08}Tm_{0.008}Zr_4(PO_4)_6_{750^\circ C_{12h}}$ y $Sr_{0.934}Yb_{0.04}Tm_{0.004}Zr_4(PO_4)_6_{750^\circ C_{24h}}$, presentan una serie de máximos que se indexan en base a una simetría romboédrica de grupo espacial R-3 con $Z = 3$ que es compatible con el tipo estructural NASICON (NZP). La muestra $Sr_{0.934}Yb_{0.04}Tm_{0.004}Zr_4(PO_4)_6_{750^\circ C_{24h}}$ se obtuvo pura, pero después de tratar los polvos precursores a la misma temperatura durante más tiempo, mientras que en el perfil de difracción de la muestra $Ba_{0.934}Yb_{0.04}Tm_{0.004}Zr_4(PO_4)_6_{750^\circ C_{72h}}$ se hacen visibles, además, máximos poco intensos que pueden ser atribuidos a la presencia de un pequeño % de otra fase estructural. Estos resultados son acordes con lo que se ha observado en los espectros FTIR. Las imágenes TEM de estas muestras hacen visibles partículas de morfología redondeada y poco aglomeradas. Los espectros de fotoluminiscencia de las muestras, obtenidos tras su excitación en el infrarrojo (808 nm), hacen visibles que, en el caso de las muestras de calcio, su intensidad de emisión se incrementa de manera lineal conforme aumenta la concentración de Yb^{3+} y Tm^{3+} ; además, la muestra pura $Sr_{0.934}Yb_{0.04}Tm_{0.004}Zr_4(PO_4)_6_{750^\circ C_{24h}}$ presenta una mayor intensidad de emisión que la muestra $Ca_{0.934}Yb_{0.04}Tm_{0.004}Zr_4(PO_4)_6_{750^\circ C_{24h}}$ con la misma concentración de dopaje y tratamiento térmico. Finalmente, se ha estudiado cómo sucede el proceso de DC en el sistema Yb^{3+}/Tm^{3+} .

Sistemas coloidales para aplicaciones en cosmética facial

Julia Monge Corredor

Departamento de Química Física

El estudio de las formulaciones cosméticas, especialmente para el cuidado y protección de la piel, ha experimentado un importante crecimiento estos últimos años, a medida que la sociedad ha ido tomando conciencia de que la calidad de vida también la proporcionan los productos cosméticos, ya que aportan a nuestra piel hidratación, luminosidad, relleno de marcas de expresión. Uno de los principales ingredientes de las formulaciones cosméticas que pueden ayudar a restablecer el equilibrio fisiológico de una piel sana es la ceramida. En este contexto, este Trabajo Fin de Máster se ha centrado en el diseño y caracterización de sistemas coloidales destinados a ser incluidos como parte de productos cosméticos cutáneos, con el objetivo de facilitar la restauración de la piel como resultado de la incorporación de una molécula similar a la ceramida (ceramida-R). Sin embargo, esto requiere una extensa actividad de investigación y desarrollo dirigida a optimizar la incorporación de activos hidrofóbicos en sistemas coloidales para seleccionar las condiciones más adecuadas para lograr este reto. Para ello, es necesario analizar la encapsulación de una molécula hidrofóbica modelo, la lecitina de soja, que presenta mayor disponibilidad y menor coste que la ceramida-R. El sistema elegido para encapsular activos hidrófobos de interés en cosmética fueron las soluciones micelares de un alquil(poliglucósido), APG. Se estudiaron las propiedades de las soluciones micelares en diferentes condiciones caracterizadas por la presencia de diferentes aditivos, y se caracterizaron utilizando un conjunto de técnicas que incluían medidas de dispersión dinámica de la luz y de onda difusa, medidas de conductividad iónica y espectroscopia UV-visible.

References

- Salvioni, L.; Morelli, L.; Ochoa, E.; Labra, M.; Fiandra, L.; Palugan, L.; Prospero, D.; Colombo, M. The Emerging Role of Nanotechnology in Skincare. *Adv Colloid Interface Sci* **2021**, *293*, 102437.
- Menon, G. K.; Cleary, G. W.; Lane, M. E. The Structure and Function of the Stratum Corneum. *Int J Pharm* **2012**, *435* (1), 3–9.
- Özokan, G.; Sağır, T.; Emekli Alturfan, E. Synthesis of Natural Salicylic Acid as a Cosmetic Ingredient Using Green Chemistry Methods. *Experimed* **2022**, *12* (1), 12–17.
- Tasic-Kostov, M.; Vesic, S.; Savic, S. Objective Skin Performance Evaluation: How Mild Are APGs to the Skin? In Alkyl Polyglucosides; *Elsevier*, **2014**; pp 135–161.

Monitorización de biomarcadores del microbioma humano relacionados con la enfermedad del Alzheimer

Álvaro Rico Hermoso

Departamento de Química Analítica

En este trabajo se ha desarrollado un inmunosensor electroquímico libre de etiquetas para la detección cuantitativa de la proteína acídica fibrilar (GFAP). Se han empleado nanocompuestos de Ag/MoS₂/rGO similares a flores como plataforma de amplificación de señales del inmunosensor diseñado. Debido al efecto sinérgico entre sus materiales, los nanocompuestos Ag/MoS₂/rGO proporcionan una alta sensibilidad. El mecanismo de detección se basa en el seguimiento del cambio de respuesta de la corriente electrocatalítica hacia la reducción del peróxido de hidrógeno cuando se produce inmunorreacción en la superficie del electrodo modificado con el material sintético. Utilizando dicha metodología, se calcularon los límites de detección y cuantificación, obteniendo unos valores de 0,16 y 0,56 ng·mL⁻¹, respectivamente. En condiciones óptimas, el inmunosensor fabricado muestra una aceptable reproducibilidad, repetibilidad y excelente estabilidad. Este inmunosensor diseñado es un método eficaz en el diagnóstico clínico de la enfermedad del Alzheimer.

Referencias

[Wang, 2018]: Wang, Y., Wang, Y., Wu, D., Ma, H., Zhang, Y., Fan, D., ... & Wei, Q. (2018). Label-free electrochemical immunosensor based on flower-like Ag/MoS₂/rGO nanocomposites for ultrasensitive detection of carcinoembryonic antigen. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 255, 125-132.

Desarrollo de métodos cromatográficos para el análisis de micotoxinas en alimentos

Aurora Río Calonge

Departamento Química Analítica

La química verde es una parte de la Química que se basa en el diseño y desarrollo de procesos y productos químicos que son sostenibles y respetuosos con el medio ambiente. El objetivo principal de la química verde es reducir o eliminar el uso y la generación de sustancias tóxicas y peligrosas, minimizando así el impacto negativo en la salud humana y el medio ambiente.

Las micotoxinas son compuestos tóxicos producidos por ciertos hongos que pueden contaminar diversos alimentos, lo que representa un riesgo para la salud humana. El análisis preciso y confiable de estas micotoxinas es crucial para garantizar la seguridad alimentaria.

Aunque las técnicas de análisis de alimentos han mejorado significativamente en los últimos años, los disolventes orgánicos siguen teniendo un papel importante en procesos de extracción y purificación. Muchos de ellos suponen un riesgo para la salud humana y para el medio ambiente debido, especialmente, a su volatilidad (acetonitrilo, metanol, isopropanol, hexano, etc.). Por lo tanto, uno de los objetivos primordiales de la química verde es la sustitución de estos disolventes por otros no peligrosos y biodegradables.

Específicamente, extraer micotoxinas de alimentos sin el uso de disolventes convencionales representa un desafío considerable. Esto se debe a que estas sustancias tóxicas se encuentran en matrices alimentarias complejas y están presentes en concentraciones muy bajas. Además, las micotoxinas tienen estructuras y propiedades físicoquímicas muy diversas. Por lo tanto, desarrollar una metodología respetuosa con el medio ambiente que permita la extracción simultánea de estas toxinas implica enfrentar un gran desafío.

En este contexto, los disolventes eutécticos están emergiendo como disolventes verdes y sostenibles para la extracción eficiente de productos naturales en una amplia variedad de muestras. Los DES tienen características similares a los líquidos iónicos (ILs), tales como baja presión de vapor o estabilidad térmica, pero además tienen varias ventajas como es su biodegradabilidad, baja toxicidad, sencilla preparación y de bajo coste.

Específicamente, en este trabajo se ha propuesto un nuevo método para la coextracción de las micotoxinas alternariol (AOH), ocratoxina A (OTA), zearalenona (ZEA), citrinina (CIT), ácido ciclopiazónico (CPA) y alternariol monometil éter (AME) en infusiones, específicamente en tila, empleando DES.

El análisis de las toxinas se ha realizado mediante cromatografía líquida de alta eficacia acoplada a un detector de fluorescencia y un detector de hilera de diodos (HPLC-DAD/FLD).

Hemos aplicado metodologías de diseño experimental y de superficie de respuesta para llevar a cabo la optimización simultánea de los parámetros implicados en la extracción de las micotoxinas propuestas de tila.

Síntesis y caracterización de nuevos electrodos para conversión de energía en pilas de combustible de óxido sólido

Anthony Alexander Vásquez Medina

Departamento de Química Inorgánica

Las pilas de combustible de óxido sólido (SOFC) han sido consideradas actualmente como uno de los dispositivos de generación de energía más prometedores para la conversión directa de la energía química de los combustibles en electricidad, por lo cual, en este trabajo fueron sintetizadas nuevas fases de la serie Ruddlesden-Popper (RP) con términos $n=1, 2$ y ∞ , basados en óxidos de metales de transición para el sistema Sr-Fe-O y dopados con níquel (Ni) y samario (Sm) utilizando los métodos de síntesis cerámico y sol-gel, con el fin de evaluar su potencial aplicación como electrodos SOFC, las cuales se caracterización haciendo uso de la técnica de difracción de rayos x en polvo (PDRX) y microscopia electrónica de alta resolución (HRTEM) logrando obtener y proponer un modelo estructural de las fases $\text{Sr}_3(\text{Fe}_{0,9}\text{Ni}_{0,1})_2\text{O}_{7-\delta}$ y $\text{Sm}_{0,1}\text{Sr}_{2,9}(\text{Fe}_{0,9}\text{Ni}_{0,1})_2\text{O}_{7-\delta}$ correspondientes al términos $n=2$ y a las fases $\text{SrFe}_{0,9}\text{Ni}_{0,1}\text{O}_{3-\delta}$ y $\text{Sm}_{0,1}\text{Sr}_{0,9}\text{Fe}_{0,9}\text{Ni}_{0,1}\text{O}_{3-\delta}$ correspondientes al termino $n=\infty$. La caracterización electroquímica de estas fases mediante el uso de las técnicas espectroscopia de impedancia electroquímica (EIS) y voltamperometría cíclica (CV) se mantienen en proceso de evaluación debido a que requieren un tiempo considerable de estudio, sin embargo, la relación entre estructuras similares reportadas en la literatura a las sintetizadas en este trabajo, dan pie a predecir que estas nuevas fases sintetizadas podrían tener una buena estabilidad térmica y buena conductividad.

Referencias

- *Synthesis and characterization of Mo-doped SrFeO_{3-x} as cathode materials for solid oxide fuel cells.* Xiao, Guoliang, y otros. 2012, Journal of Power Sources, págs. 63-69.
- *Ruddlesden-Popper phase materials for solid oxide fuel cell cathodes: A short review.* Yattoo, Mudasar A y Skinner, Stephen. s.l. : Elsevier, 2022, Materials
- *Recent progress of perovskite-based electrolyte materials for solid oxide fuel cells and performance optimizing strategies for energy storage applications*
- Bilal Hanif, M, y otros. 2022, Materials Research Bulletin, Vol. 146.
- *Solid-State Electrochemistry and Solid Oxide Fuel Cells: Status and Future Prospects.* Jiang, San Ping. 21, 2022, Electrochemical Energy Reviews, Vol. 5, págs. 1-46.

Biosensores basados en proteínas luminiscentes para el análisis de contaminantes en alimentos

Miguel Ángel Merino Sierra

Departamento Química Analítica

Las micotoxinas son metabolitos generados por hongos que ponen en compromiso la seguridad alimentaria. Debido a la presencia de estas toxinas en distintos tipos de alimentos, pueden producir daños en la salud humana y animal, además de grandes pérdidas económicas. Por ello, es necesario el desarrollo de métodos analíticos sensibles capaces de determinar estas biotoxinas en distintos tipos de alimentos.

El objetivo principal del presente proyecto ha sido el desarrollo de un inmunosensor luminiscente de tipo competitivo para la detección de la micotoxina ácido ciclopiazónico (CPA). Para su desarrollo, se emplearon partículas magnéticas funcionalizadas con neutravidina y un péptido mimético biotinilado de CPA (mimopéptido) capaz de competir con el analito por los sitios de unión del anticuerpo selectivo a la micotoxina. De este modo, la señal obtenida es inversamente proporcional a la concentración de ácido ciclopiazónico presente en la muestra analizada.

Las mejores condiciones de ensayo se determinaron mediante la evaluación de tres tipos de transducción óptica empleando el anticuerpo anti-CPA marcado con diferentes etiquetas luminiscentes: Alexa Fluor® 555, un anticuerpo secundario marcado con peroxidasa de rábano (HRP) y un complejo de Terbio (III).

Los mejores resultados se obtuvieron empleando el anticuerpo anti-CPA marcado con el complejo de Terbio (III). El bioensayo desarrollado permite la determinación de CPA en el intervalo comprendido entre 0,019 a 0,143 ng/mL con un límite de detección de $0,010 \pm 0,004$ ng/mL. Además, se trata de un ensayo muy selectivo, pues no muestra reactividad cruzada con Aflatoxina B1, Aflatoxina B2, alternariol, toxina HT-2, zearalenona, deoxinivalenol y ocratoxina A, micotoxinas coproducidas con el ácido ciclopiazónico.

Por otro lado, también se ha evaluado la aplicabilidad del método desarrollado al análisis de CPA en muestras de maíz. Para ello, se ha empleado una extracción sólido-líquido con metanol/agua (80/20) seguido de un cambio de disolvente por evaporación. El inmunoensayo permite preconcentrar 3 veces la muestra sin presentar efecto matriz, obteniendo unas recuperaciones superiores al 80% (con un coeficiente de variación inferior al 10%), un límite de detección de 20 ± 8 ng/kg y un límite de cuantificación de 40 ± 8 ng/kg.