

Reunión Anual de la Acción Europea COST

Conferencias

Artículos de divulgación

Tesis Doctoral

Premios

Estancias en otros centros

Presentación	P. 2
Acción Europea COST	P. 3
Conferencia Dra. Carolina Chaya	P. 5
Conferencia Dr. Guy Bertrand	P. 6
Clase Magistral Dr. Tsampas	P. 7
"Contaminación atmosférica"	P. 8
"Chocolate y polimorfismo"	P. 9
Tesis Doctoral	P. 12
Premios	P. 13
Estancias en otros centros	P. 18

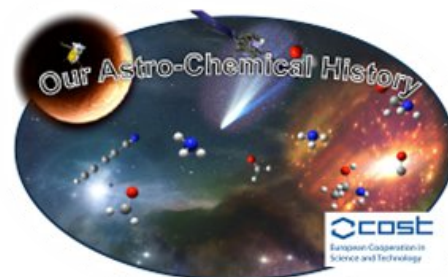
Comité editorial: M. Consuelo Díaz Maroto, Juan Carlos de Haro, Antonio de la Hoz, José Luis Martín, José Fernando Pérez, María Antiñolo, Raúl Martín.

PRESENTACIÓN

En este número de enero hemos recogido en primer lugar la Reunión Anual de la Acción Europea COST. También recogemos dos conferencias impartidas por la la Dra. Carolina Chaya y el Dr. Guy Bertrand, así como la clase magistral impartida por el Dr. Tsampas a los alumnos del Máster Oficial en Ingeniería Química, y la experiencia de dos alumnos de la Facultad en sus estancias en otros centros. Dentro de la sección de divulgación científica, os mostramos un artículo publicado en "La Tribuna" de nuestra compañera Florentina Villanueva sobre la contaminación atmosférica en diferentes puntos de la provincia, y un interesante artículo sobre el polimorfismo del chocolate. Además incluimos la Tesis Doctoral defendida por la ya Dra. Ana Belén Calcerrada, y los premios a la Mejor Tesis Doctoral de la RSEQ, y a los mejores TFGs de la UCLM.

“NUESTRA HISTORIA ASTROQUÍMICA”: REUNIÓN ANUAL DE ESTA ACCIÓN EUROPEA COST CELEBRADA EN LA FACULTAD DE CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS (11-13 DICIEMBRE 2017)

En diciembre, se celebró en nuestra Facultad la reunión anual de los grupos de trabajo 1 y 2 (WG1 y WG2) y del comité de gestión pertenecientes a la acción europea COST (European Cooperation in Science and Technology) CM1401 “Our Astro-Chemical History”, organizada por Elena Jiménez del departamento de Química Física junto con otros investigadores (CSIC, Universidad de Leeds - UK- y Universidad de Rennes 1 –Francia).



Esta iniciativa europea comenzó su andadura en 2014 y finalizará este año 2018. Con la participación de 27 países europeos, más Túnez y Japón como países asociados, los objetivos generales de la acción CM1401 son:

- establecer y consolidar la comunidad científica que investiga sobre la química física implicada en la formación de nuevos sistemas solares (nuevas estrellas) y sus planetas
- compartir metas en las complementarias vías de investigación (observación astronómica, modelado químico, experimentación química y química teórica)
- permitir a los estudiantes y jóvenes investigadores acceder al conocimiento de la química física y astroquímica y motivarlos para continuar en estas líneas de investigación
- demostrar que la química es esencial para avanzar en el conocimiento de los procesos reactivos que forman las estrellas, los planetas, etc.

Bajo esta acción químico físicos y astrofísicos europeos presentaron sus trabajos de investigación, cuya discusión ha permitido ampliar el conocimiento sobre la evolución molecular del Universo, desde de las etapas tempranas de la formación de estrellas. La información química obtenida, tanto experimental como teórica, es esencial para la interpretación mediante modelos de los datos astrofísicos registrados con grandes instrumentos europeos.



¹ <http://cost.obs.ujf-grenoble.fr>, http://www.cost.eu/COST_Actions/cmst/CM1401

Las discusiones del WG1, bajo el título “Gas phase cold chemistry of COMs: a challenge for experiments, theory and astrophysical modeling”, se centraron en la química en fase gaseosa de iones y radicales con moléculas orgánicas complejas (COMs, complex organic molecules) que podrían constituir gérmenes prebióticos que podrían esclarecer el origen de la vida en nuestro planeta. Estas reacciones tienen lugar en diversos entornos ultra-fríos del medio interestelar, donde la temperatura alcanza los 10 K. En particular, se dedicó una sesión específica al papel que juega CH_3OH en la formación del radical CH_3O detectado recientemente en estos entornos ultra-fríos (Cernicharo et al., 2012). La química de estos entornos ultra fríos del espacio es un campo de investigación en auge en las últimas décadas debido al creciente número de especies detectadas mediante radiotelescopios, como el de Pico Veleta en Sierra Nevada. Entender, por tanto, la química que ocurre en las nubes interestelares es importante para comprender todo el proceso de evolución de éstas. En ese sentido, el grupo FOTOAIR del departamento de Química Física ha venido contribuyendo, desde la construcción del sistema CRESU pulsado más potente del mundo en 2012, al conocimiento de la cinética de estos procesos a temperaturas muy próximas a los 10 K (Jiménez et al., 2016; Antiñolo et al., 2016, Ocaña et al., 2017).

Además, se organizó una visita a nuestro laboratorio para un gran número de participantes del WG1 que mostraron mucho interés en conocer donde se determinaban las constantes de velocidad que emplea la comunidad astrofísica internacional para modelar la evolución temporal de las concentraciones de los COMs detectados en las nubes oscuras del medio interestelar y así interpretar las abundancias observadas. En resumen, esta reunión anual COST ha sido un éxito gracias al esfuerzo y colaboración tanto de los becarios y contratados del grupo FOTOAIR como del personal de administración y servicios de la facultad. Gracias a todos.

Referencias

- J. Cernicharo et al. Discovery of the Methoxy Radical, CH_3O , toward B1: Dust Grain and Gas- phase Chemistry in Cold Dark Clouds. *The Astrophysical Journal Letters*. 759(2): L43 (2012).
- E. Jiménez et al. First evidence of the enhancement of the OH reactivity toward methyl formate (HC(O)OCH_3) at temperatures of the interstellar medium: Gas-phase kinetic study between 22.4 K and 64.2 K. *Physical Chemistry Chemical Physics*. 18 (2016) 2183-2191.
- M. Antiñolo et al. Reactivity of OH with CH_3OH between 22 and 64 K: Modelling the gas phase production of CH_3O in Barnard 1b. *Astrophysical Journal*. 823:25 (2016) 8 pp.
- A. J. Ocaña et al. Kinetics and dynamics of the $\text{OH}+\text{H}_2\text{CO}$ reaction at temperatures of the interstellar medium (ISM): Experiments, theory and modelling of the HCO formation in the ISM. *The Astrophysical Journal*. 850:28 (2017) 1-12.

² CRESU, acrónimo Cinética de Reacciones estudiadas mediante Expansión Supersónica

"Estudio de la disposición a pagar mediante subastas experimentales"

El pasado 12 de enero tuvo lugar la Conferencia-taller, impartida por la Dra. Carolina Chaya, sobre la aplicación de las subastas experimentales en el desarrollo de nuevos productos. Las subastas experimentales nos pueden informar del precio que estaría dispuesto a pagar un consumidor por un determinado alimento. Estas técnicas se vienen aplicando en Economía Experimental desde la década de los 60, pero han empezado a adquirir cierta relevancia en el ámbito de la ciencia sensorial de consumidores en la última década.

Durante la conferencia se explicaron los diferentes mecanismos existentes, sus ventajas y limitaciones. Por último, se hizo una demostración práctica sobre cómo se desarrollaría una subasta con nuevos productos de turrón en la que los asistentes participaron como consumidores.

La gran complejidad técnica de la fabricación y desarrollo de un producto cotidiano, y aparentemente sencillo, despertó la curiosidad de los asistentes que realizaron numerosas intervenciones al finalizar la exposición.

Breve Curriculum Vitae de la Dra. Carolina Chaya

Doctor Ingeniero Agrónomo por la Universidad Politécnica de Madrid (UPM), Doctor en Ciencias Económicas por la Universidad de Borgoña, Master of Sciences por el Centre International de Hautes Études Agronomiques Méditerranéennes, especialización postdoctoral en Análisis sensorial y Sensometría en la Universidad de California – Davis.

Es profesora de la actual Escuela Técnica Superior de Ingeniería Agronómica, Alimentaria y de Biosistemas de la UPM desde 1996, impartiendo docencia de primer, segundo y tercer ciclo de materias de Estadística, Investigación Operativa, Análisis de Datos, Análisis sensorial y Sensometría en grados, actividades formativas y masters dentro y fuera de la UPM.

Colabora activamente con el "Sensory Science Centre" de la Universidad de Nottingham, tanto en actividades docentes como de investigación. Forma parte del Comité Técnico de Normalización en Análisis Sensorial (CTN-87) de AENOR desde 2006. Es miembro fundador de la Asociación Española de Profesionales del Análisis Sensorial (AEPAS). Actualmente es Vicepresidente de AEPAS y de la European Sensory Science Society (E3S).



Dirige un panel de 30 jueces entrenados en diferentes categorías de producto desde 2008. Ha publicado numerosos trabajos del ámbito de la Ciencia Sensorial de Consumidores. Su línea de investigación más reciente versa sobre el estudio de la respuesta emocional del consumidor.

Dra. Carolina Chaya

“Stable Carbenes and Related Species: Powerful Tools in Organic, Inorganic and Organometallic Chemistry”

Guy Bertrand

UCSD-CNRS Joint Research Chemistry Laboratory (UMI 3555), Department of Chemistry and Biochemistry, University of California San Diego, La Jolla, CA 92093-0343 (USA)
(guybertrand@ucsd.edu)

Over the years, the success of homogeneous catalysis can be attributed largely to the development of a diverse range of ligand frameworks that have been used to tune the behavior of the various systems. Spectacular results in this area have been achieved using cyclic diaminocarbenes, the so-called N-heterocyclic carbenes (NHCs), mainly because of their strong σ -donor properties. Although it is possible to cursorily tune the structure of NHCs, any diversity is still far from matching their phosphorus-based counterparts, which is one of the great strengths of the latter. Beginning with our discovery in 1988 of a bottle-able (phosphino)(silyl)carbene, a variety of stable acyclic carbenes are known, but they give rise to fragile metal complexes. During the recent years, we have discovered new types of stable cyclic carbenes,¹ as well as related carbon-based and boron-based ligands,² which feature even stronger σ -donor properties than NHCs. The synthesis, electronic properties, and catalytic activity of complexes bearing our ligands will be presented, and comparisons with their NHC cousins will be discussed. We will show that singlet carbenes with enhanced electrophilic properties, such as cyclic (alkyl)(amino)carbenes (CAACs),³ allow for the metal-free activation of small molecules,⁴ and for the stabilization of organic radicals and metals in a formal zero oxidation state.⁵ We also found that CAACs allow for the isolation of catalytically active complexes, which were supposed to be only transient intermediates. Among them, bis(copper) complexes involved in the very popular CuAAC reaction (Click Chemistry) will be discussed. We will show that this discovery allows us to develop novel catalytic transformations.

1. For a review: M. Melaimi, M. Soleilhavoup, G. Bertrand, **Angew. Chem. Int. Ed.** **2010**, *49*, 8810.
2. For a recent review: M. Soleilhavoup, G. Bertrand, **Angew. Chem. Int. Ed.** **2017**, DOI: 10.1002/anie.201705153.
3. For a recent review: M. Melaimi, R. Jazzar, M. Soleilhavoup, G. Bertrand, **Angew. Chem. Int. Ed.** **2017**, DOI: 10.1002/anie.201702148.
4. For a review: D. Martin, M. Soleilhavoup, G. Bertrand, **Chem. Sci.** **2011**, *2*, 389.
5. For a review: C. D. Martin, M. Soleilhavoup, G. Bertrand, **Chem. Sci.** **2013**, *4*, 3020.

"Tecnologías Emergentes en Energía y Medio Ambiente"

El profesor Dr. Tsampas ha impartido docencia en la asignatura Tecnologías Emergentes en Energía y Medio Ambiente del Máster Oficial en Ingeniería Química de la Universidad de Castilla La Mancha.

El Máster en Ingeniería Química, que se oferta desde el curso 12-13 en la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de Ciudad Real, es un Master universitario oficial adaptado a la nueva regulación de la educación universitaria española y el Espacio Europeo de Educación Superior. El Máster tiene una concepción profesionalizante, pero también tiene la posibilidad de convertirse en el acceso a los programas de Doctorado de Universidades Españolas y Europeas, para la realización de estudios posteriores conducentes a la obtención del título de Doctor. Por todo ello la dilatada experiencia investigadora y docente del Dr. Mihalis Tsampas en el campo de la electrocatálisis y fotocatalisis aplicado a procesos energéticos y de remediación ambiental, hace de él un candidato excepcional para impartir sus conocimientos y experiencia en la parte final de la asignatura de "Tecnologías Emergentes en Energía y Medio Ambiente".

El Dr. Tsampas, es el líder del grupo de investigación "New technologies for environmental and energetic applications" en Holanda y ha impartido un total de 5 h de clases magistrales a los alumnos de Máster. En esta asignatura los alumnos estudian nuevas tecnologías aplicadas a la producción de energía y en el sector del medio ambiente, como son las celdas de combustible, biocombustibles de segunda generación, sistemas de captura y conversión de CO_2 , así como tecnologías de tratamiento de residuos industriales y aguas residuales. Muchas de estas tecnologías se encuentran a nivel de desarrollo o de investigación y serán implementadas a nivel industrial en los próximos años.

En este sentido, el programa impartido por el Dr. Tsampas incluye un temario y una metodología adecuada en el que se han impartido los siguientes temas:

- Fundamentos y aplicaciones de la electrocatálisis
- Termodinámica de procesos electrocatalíticos
- Cinética electródica
- Fundamentos de baterías y Electrolizadores
- Foelectrocatalisis para la producción de combustibles a partir de CO_2
- Fenómeno de Promoción electroquímica de la catálisis

Además de todo ello, es evidente el gran interés para los alumnos del Máster en Ingeniería Química la posibilidad de recibir conocimientos y experiencias (en otro idioma) por parte de un experto internacional como el Dr. Tsampas, con una gran trayectoria científica y profesional en este campo. Sus últimas patentes y publicaciones científicas en este tipo de tecnologías emergentes en el campo de la energía y su conocimiento actual sobre esta temática de gran interés para la Sociedad, permitirá sin lugar a duda completar la formación de los alumnos del Máster en Ingeniería Química, en temas de tan gran interés como los que se han desarrollado.



"CONTAMINACIÓN ATMOSFÉRICA EN LA PROVINCIA"

EL AIRE DE FUERA LLEGA A CASA

La UCLM cuenta con un grupo de investigación dirigido al análisis de la contaminación atmosférica con varios estudios en la provincia

HILARIO L. MUÑOZ / CIUDAD REAL

La UCLM cuenta con un centro dedicado a la investigación de la calidad del aire que se respira en la región. Ubicado en la facultad de Medicina se trata del Instituto de Investigación en Combustión y Contaminación Atmosférica, un centro que realiza análisis para conocer mejor el aire que respiramos y que lleva la última década desarrollando estudios dentro de los hogares, escuelas o en parques nacionales.

«Hace unos años empezamos a investigar la calidad del aire en el interior, se está estudiando en todo el mundo pero aquí es un tema poco conocido», expuso la investigadora del Instituto Florentina Villanueva, quien recordó que la conta-

minación exterior se une a la que hay de productos en casa como ambientadores o los muebles. «Hay muy pocos estudios del tema y se centran, sobre todo, en Cataluña y en la Comunidad Valenciana».

Con esta idea se han realizado estudios dirigidos a investigar la calidad del aire en el interior centrados en el análisis de elementos como el formaldehído, el benceno y una treintena de elementos. En su búsqueda acudieron, en 2013, 22 casas de Puertollano que accedieron a ser analizadas durante dos meses. Con el tiempo se sumó un estudio de seis colegios en Ciudad Real, como zona urbana, seis de Puertollano, como espacio industrial, y otros seis de distintas zonas rurales. La intención de ambos era conocer la media de estas sustan-

cias en los periodos analizados.

Se trata de dos análisis pioneros en España por la cantidad de compuestos que se buscaban y que dieron como resultado datos llamativos sobre la importancia de la calidad del aire en el interior de los hogares como «base para comparar estudios en el futuro». «Los datos en el interior suelen ser mucho mayores que en el exterior, se habla de dos o cuatro veces, pero yo he llegado a contar cantidades mucho más elevadas», dijo Florentina Villanueva, quien recordó que a veces se habla de jornadas de contaminación en la calle pero al llegar a casa «lo que tienes fuera se suma a lo que hay dentro» por lo que el Instituto continúa su labor de investigación con la búsqueda de financiación para sus estudios.

DECLARACIONES

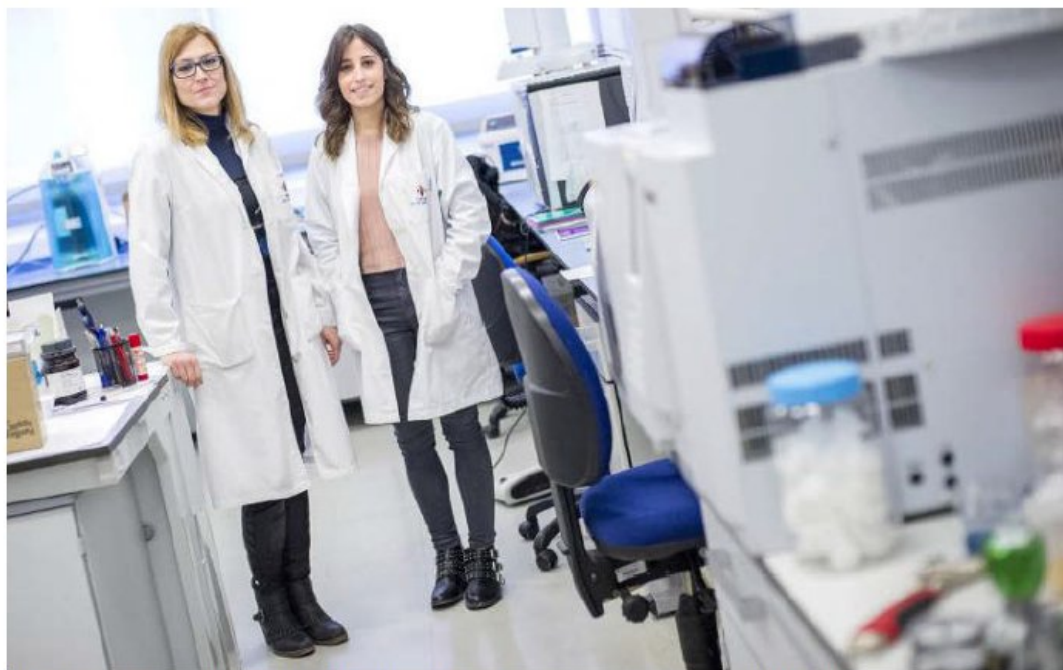
FLORENTINA VILLANUEVA
INVESTIGADORA

«Los datos en interior suelen ser mayores que en el exterior»

«Hay muy pocos estudios y se centran en Cataluña y Valencia»

Los resultados muestran que «no hay superaciones» de los niveles legales en España y demostraron lo que se sabe sobre el benceno, un compuesto del que «no hay un valor límite que sea bueno para la salud», aunque se permiten cinco microgramos por metro cúbico. La sustancia está relacionado con los vehículos a motor y, de este modo, la mayor concentración se dio en Puertollano, seguido de Ciudad Real y cerrando las zonas rurales.

En cuanto al análisis que realizaron de parques nacionales, los datos del Instituto de Investigación mostraron altas concentraciones de ozono en Cabañeros, aunque se consideran motivadas por «las trayectorias de masas de aire», con semanas concretas de procedencia Mediterránea.



Florentina Villanueva (izquierda) junto a una investigadora, en las instalaciones del instituto en Combustión y Contaminación Atmosférica. / PABLO LORENTE

278

microgramos de ozono se registraron el 13 de julio en Puertollano. Es la máxima del año y se produjo el día en que Ciudad Real batió el récord de temperaturas con 43,4 grados.

ARTÍCULO PUBLICADO EN EL PERIÓDICO "LA TRIBUNA" EL 23 de ENERO de 2018.

"CHOCOLATE Y POLIMORFISMO"

Chocolate is a unique substance, solid at room temperature and liquid at body temperature. However, this is not the result of simple crystallization and melting. In fact, cocoa butter is polymorphic and can crystallize into several crystal forms with different physical characteristics.

Crystallization Forms

Cocoa butter can crystallize into six polymorphic forms designated as I–VI according to their stability [1] and different physical characteristics such as gloss, hardness, and melting point (Tab. 3). The chemical composition is identical in all forms; only the arrangement of the lipid molecules varies.

Table 3. Polymorphic forms of cocoa butter.

Crystal form	Formation conditions	m. p. [°C]
I	rapid cooling of the melt	17.3
II	rapid cooling of the melt at 2 °C/min	23.3
III	crystallization of the melt at 5–10 °C, converts into II at 5–10 °C	25.5
IV	crystallization at 16–21 °C	27.3
V	slow crystallization of the melt	33.8
VI	from form V after several months at RT	36.3

The diverse polymorphs are formed under different crystallization conditions. The thermodynamically most stable form, VI, has a dull surface and soft texture; only form V shows the hardness and glossy surface appreciated by the consumer.

Gourmets only accept chocolate in its crystal form V, as it is this form that has the noble surface sheen, crisp hardness and the pleasant melting sensation in the mouth.

The chocolate producer must achieve the physicochemical trick of making the chocolate crystallize not in the thermodynamically most stable form VI but in the somewhat more energy-rich form V. If he does not succeed, the chocolate is practically unsaleable, for three reasons:

1. The surface looks dull and shows a pattern reminiscent of frostwork. This renders the chocolate visually unattractive (Fig. 6).
2. Compared to form V with a melting point of 33.8 °C, crystal form VI, due to its higher melting point at 36.2 °C, melts only very slowly on the tongue and produces a coarse and sandy sensation on the tongue.
3. Crystal form VI has a soft texture. Compared to form V, biting into a bar of chocolate of form V does not feel crisp, but rather reminds of candle wax.



Figure 6. Chocolate in crystal forms V und VI.

Tempering

In order to make the chocolate crystallize exclusively in form V, the crystallization process has to be controlled by a sophisticated temperature regime (tempering).

First, the chocolate is melted at 50 °C. For the optimum formation of type V nucleation sites, it is then cooled at 1 °C/min to 22 °C, where it is held for several minutes so that a sufficient number of nucleation sites can form.

Subsequently, it is heated again at 4 °C/min to 31 °C so that the thermodynamically unstable nucleation sites, particularly those of form IV, are melted [2, 3].

Here, an exact temperature control is of the utmost importance; one degree too high or too low will decide on the product quality. Another cooling process follows, with the cooling rate depending on the chocolate variety and the recipe.

Conversion

The reason for the lower stability of crystal form V lies in the relatively loose packing of the lipid molecules, leaving empty spaces [4]. In the solid state, crystal form V also tends to convert into the more stable form VI. The addition of milk fat retards the conversion so that the V→VI transition is less often observed in milk chocolate.

At room temperature, the conversion takes place only slowly; it nevertheless limits the shelf life of chocolate to several months.

Therefore, chocolate should always be stored in a refrigerated environment (15–18 °C). At higher temperature, e.g., in the sun or in a warmed up car trunk, the undesirable phase transition V→VI happens quickly, even faster than during unintentional melting and subsequent cooling. If the phase transition happens, the producer's effort will have been in vain: The chocolate is dull, soft and melts only slowly in the mouth.

On True Pleasure

Chocolate should be stored and consumed like red wine: at a temperature between 15 and 18 °C.

First of all, our eyes should enjoy the noble sheen and the satiated color. Then, the first piece is broken off and an impressive "Snap!" announces the pure crystal form V.

After the visual and the acoustic senses, it is now the turn of the sense of smell: Slowly, but deeply, we inhale the marvelous fragrance of the chocolate and look forward to the pleasures still to come.

After this sensory overture, we place the first piece of chocolate on our tongue. If this piece turns out too large, we carefully reduce it by biting one or two times, but – for heaven's sake! – we do not swallow it, as then all would be lost: There are no sensory cells for taste and smell in the stomach.

With every movement up and down the tongue, this highly sensitive tactile organ explores the smooth surface of the chocolate piece. Solid components with a diameter of more than 20 µm, due to their unpleasant sandiness, would immediately distress our tongues.

Now the molten chocolate surprises us with its non-Newtonian flow characteristics. In simple terms, chocolate behaves like ketchup: From a carefully inverted, open bottle no ketchup leaks out (high viscosity); multiple shaking of the bottle (shear stress) changes the situation: the ketchup flows out in a watery stream (low viscosity). This kind of viscosity change by mechanical forces (shear stress) is called non-Newtonian flow behavior.

Water and organic solvents show a viscosity that is independent of mechanical stress (Newtonian fluids).

When a piece of chocolate melts on the tongue, it at first maintains its shape and does not disperse. When the tongue presses this highly viscous liquid against the upper plate, the chocolate becomes watery due to the mechanical stress. It flows over the surfaces of the tongue and the palate, and its bitter-sweet taste composition finally takes hold of the fifth sense, the sense of taste.

The real pleasure of chocolate culminates only at the point of melting. Due to its nonpolar character, it clings to the entire surface of the tongue and the palate in a thin layer which, even after several times of swallowing of watery saliva, does not detach. At temperatures of $>35\text{ }^{\circ}\text{C}$, volatile fragrant compounds rise from this thin layer. They fill the mouth, then ascend into the nasal cavities and there bind to the receptors of the olfactory neurons which, after signal processing in the brain, create this pleasant odor experience.

The watery saliva continuously dissolves bitter constituents and sugar from the thin chocolate layer on the tongue and the palate, providing a long-lasting bitter-sweet basic taste. Only when the aftertaste slowly subsides should we begin to look forward to the next piece of chocolate.

Quality – Grand Cru

There are many kinds of chocolate of different qualities. Those with the highest value are called Grand-Cru (grand produce). In Burgundy, this is the highest, and in Bordeaux the second highest, quality classification of red wines. In the case of chocolate, this term defines the origin of the refined cocoa beans (Criollo and Trinitario) from a limited cultivation area and the particularly elaborate procedures of fermentation, selection and roasting. The producers are small and medium-scale companies, where the products are manufactured in the traditional and therefore time-consuming way. Of course, only select ingredients like high-value cocoa butter and Bourbon vanilla are used, but no non-cocoa lipids. The dwell time in the conche depends on the roasted bean and is often stated on the package label.

References

- [1] S. T. Beckett, *The Science of Chocolate*, Royal Society of Chemistry, London 2000.
- [2] P. Fryer, K. Pinschower, *MRS Bull.* 2000, 25. www.mrs.org/publications/bulletin
- [3] J. Kleinert-Zollinger, *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, 5th edition, Vol. A7, Verlag Chemie (VCH), Weinheim 1986, 23.
- [4] R. Peschar et al., *J. Phys.Chem. B* 2004, 108, 15450. DOI: 10.1021/jp046723c

DOI: [10.1002/chemv.201000030](https://doi.org/10.1002/chemv.201000030)

Author: Klaus Roth

Published Date: 13 septiembre 2010

Source / Publisher: *Chemie in unserer Zeit/Wiley-VCH*

Copyright: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA

"Producción de H₂ mediante reformado electroquímico de etanol" (Ana Belén Calcerrada, Ingeniería Química)

El pasado 14 de diciembre Dña. Ana Belén Calcerrada Martínez defendió la Tesis Doctoral titulada "Producción de H₂ mediante reformado electroquímico de etanol" que ha sido desarrollada en el Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Castilla-La Mancha, bajo la dirección de los Doctores Antonio de Lucas Consuegra y Fernando Dorado Fernández.

La presente Tesis Doctoral tiene como objeto el estudio del reformado electroquímico de alcoholes para la producción de H₂ de elevada pureza. Esta técnica de producción de H₂ consiste en la alimentación de disoluciones acuosas de alcohol en el compartimento anódico de una celda de electrólisis. La aplicación de corriente eléctrica permite llevar a cabo la electro-oxidación de las moléculas de alcohol a otros productos carbonosos y protones. Estos protones son transferidos por la membrana polimérica hasta el cátodo donde se produce su transformación en H₂ junto con los electrones transferidos por el circuito externo. El estudio de esta novedosa técnica de producción de H₂, que permite utilizar recursos renovables, se ha realizado en colaboración con investigadores de otros centros y universidades como la profesora Elena Baranova de la Universidad de Ottawa (Canadá), el profesor David Horwat del Institut Jean Lamour de la Université de Lorraine (Francia), el profesor Fernando Gutiérrez Martín de la Universidad Politécnica de Madrid (España) y el profesor José Joaquín Linares León de la Universidad de Brasilia (Brasil).



La Tesis Doctoral, se ha centrado en el estudio del catalizador anódico, manteniendo en todos los casos como catalizador catódico Pt/C comercial con una carga metálica del 20 %. Para ello se han llevado a cabo estudios en medio ácido empleando distintos catalizadores anódicos de Pt-Sn/C. En dichos estudios se ha determinado la viabilidad del uso estos catalizadores, la proporción óptima entre Pt-Sn y la influencia de la adición de un electrolito ácido en el compartimento anódico de la celda electroquímica y finalmente la influencia del soporte carbonoso. También se llevaron a cabo estudios en medio básico, empleando catalizadores de Pd depositado mediante la técnica de "sputtering" en papel de carbón. Y finalmente, se propuso la hibridación de la electrólisis de alcoholes con tecnologías renovables como la fotovoltaica.

Entrega del premio a la mejor Tesis Doctoral. Sección Territorial de Castilla-La Mancha de la Real Sociedad Española de Química

La Sección Territorial de Castilla-La Mancha de la Real Sociedad Española de Química entregó el pasado 15 de diciembre el premio a la mejor Tesis Doctoral presentada en el curso 2016-2017. El jurado otorgó este año el galardón a la Tesis titulada 'Dynamics of Proton, Charge & Energy Transfers in Solutions and Within Metal-Organic Frameworks: Toward Sensing and Nanophotonic Applications' cuyo autor es el Dr. Mario Gutiérrez Tovar. El presidente de la Sección Territorial, el Prof. Julián Rodríguez López, quiso destacar el alto interés del trabajo, especialmente en lo que se refiere al desarrollo de nuevos materiales que pueden emplearse como fotocatalizadores, sensores o en la fabricación de LEDs.

Reconocer el talento y la excelencia de los jóvenes investigadores de nuestra región es el objetivo de estos galardones, que alcanzan ya su tercera edición y muestran el apoyo que presta esta organización a la ciencia en general y a la química en particular.

El acto se complementó con sendas conferencias por parte del Dr. Gutiérrez Tovar y del conocido periodista y divulgador científico D. Manuel Toharia Cortés, que fue Director Científico de la Ciudad de las Artes y las Ciencias de Valencia desde enero de 2008 a enero de 2014. Toharia, en su charla titulada "Luchar contra la civilización del desperdicio" quiso destacar el impacto de los residuos que desechamos sobre nuestro entorno, uno de los problemas más acuciantes del mundo moderno. Todos los procesos de transformación implican la producción de residuos que acaban por envenenarnos e incluso inundarnos (incluido el ruido, pero sobre todo de materia y energía), conduciendo a las graves consecuencias medioambientales que sufre nuestra sociedad.



Manuel Toharia (izquierda) junto al premiado (centro) y los responsables de la Real Sociedad Española de Química en Castilla-La Mancha

III Premios a los mejores trabajos de fin de grado (TFG) de la UCLM

La Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) y Caja Rural Castilla-La Mancha, a través de la Cátedra de Innovación y Desarrollo Cooperativo y Empresarial, han entregado los premios a los mejores trabajos de fin de grado (TFG) en cada una de las cinco áreas del conocimiento. En la tercera edición, se han reconocido trabajos relacionados con el circo romano de Toledo, los plásticos biodegradables, una aplicación para pymes y autónomos o la posible elaboración de jamón de cordero, entre otros.

Esta convocatoria, dotada con un total de 5.000 euros, distingue a dos alumnos (primer premio 600 euros y segundo 400) de cada una de las cinco ramas del conocimiento. El primer premio en Artes y Humanidades ha recaído en Laura Montero Moreno, de Historia del Arte, por su trabajo 'El arte de la Orden de San Juan: El castillo de Consuegra'. El segundo ha sido declarado desierto.

En la rama de Ciencias, el primer premio es para David Soriano Fernández, de Ciencias Ambientales, por su trabajo 'Variación del potencial alergénico en el circo romano de Toledo', y el segundo premio para Josué Muñoz Galindo, de Química, por su trabajo 'Medioambiente y polímeros biodegradables'. En la rama de Ciencias de la Salud ha recibido el primer premio Rubén Alcantud Córcoles, de Medicina, por su trabajo 'Calidad muscular en ancianos con artroplastia de cadera' y el segundo premio Alfonso Martínez Cano, de Logopedia, por su trabajo 'Protocolo de evaluación lingüística para personas con esquizofrenia'.

Asimismo, en Ciencias Jurídicas y Sociales ha sido distinguido con el primer premio José Antonio Capuchino Gallego, de Administración y Dirección de Empresas (ADE), por 'Plan empresa APP IVA Recovery'. El segundo ha recaído sobre Marta Cárdenas Martínez, de Ciencias del Deporte, por 'Uso de nuevas tecnologías en personas con esclerosis múltiple'. Además se ha otorgado un premio extraordinario a Daniel Caro Herrero, de Derecho, por 'La economía colaborativa'.



Autoridades y premiados

Finalmente, en la rama de Ingeniería y Arquitectura, los galardonados son Laura Gómez Daza, de Ingeniería Química, con el primer premio por su trabajo ‘Desarrollo de aerogeles de PVA dopados con nanoarcillas para su uso en construcción’ y Kawtar Arbi, de Ingeniería Agroalimentaria, con el segundo premio por su trabajo ‘Proyecto de diseño y construcción de una industria para la elaboración de jamón de cordero con IGP cordero manchego’.

En la entrega de premios participaron la vicerrectora de Internacionalización y Formación Permanente, Fátima Guadamillas Gómez, el director de la Fundación de Caja Rural, Vicente Muñoz Almagro, el decano de la Facultad de Ciencias Jurídicas y Sociales de Toledo, José Alberto Sanz Díaz-Palacios y la directora del Centro de Estudios de Postgrados, Susana Villaluenga de Gracia.

En su intervención, la vicerrectora destacó que estos trabajos “contribuyen a buscar soluciones a los problemas que tiene la sociedad desde el rigor científico y el conocimiento” y dio la enhorabuena a la Fundación Caja Rural Castilla-La Mancha por sus más de cinco años de colaboración con la Cátedra de Innovación y Desarrollo Cooperativo y Empresarial. Además, animó a estos alumnos a crear nuevas empresas y aplicar las investigaciones plasmadas en estos trabajos a “un nuevo camino en vuestro mundo laboral”.

Por su parte, el gerente de la Fundación Caja Rural Castilla-La Mancha dio la enhorabuena a los premiados y destacó la “calidad de los trabajos presentados como fiel reflejo del talento universitario y de la excelencia y rigor de la UCLM”.

MEDIOAMBIENTE Y POLÍMEROS BIODEGRADABLES

Nuestro alumno de la Facultad de Químicas JOSUÉ MUÑOZ GALINDO ha resultado premiado con su TFG Medioambiente y Polímeros biodegradables, bajo la dirección de la profesora ANA MARÍA SÁNCHEZ-MIGALLÓN BERMEJO.

Imaginar el mundo actual sin la existencia de polímeros es muy complicado. No existe ámbito de nuestra vida que no haya sido mejorado con la utilización de estos materiales sintéticos, así por ejemplo, su uso en medicina, como material desechable, evita la proliferación de microbios, facilitando la higiene y esterilidad de los mismos.



La producción de polímeros es cada vez mayor y la cantidad prevista para 2050 es de 40 mil millones de toneladas, lo que es suficiente para envolver la Tierra en 6 capas de film de plástico.

El escaso reciclaje de los materiales plásticos, en particular, de aquellos que se utilizan para el envase y el embalaje, que tienen una vida útil muy corta, ha propiciado su acumulación desorbitada, provocando la contaminación de hábitats acuáticos (mares, lagos, ríos) y terrestres.

El amontonamiento de plásticos en los ecosistemas terrestres es tal, que éstos se pueden utilizar como “tecnofósiles”, es decir, como marcadores de la edad de los depósitos sedimentarios en que están enterrados, de la misma manera que los geólogos usan fósiles (Figuras 1a y 1b).¹



Figura 1a: Cedars Park, Londres, 2010.

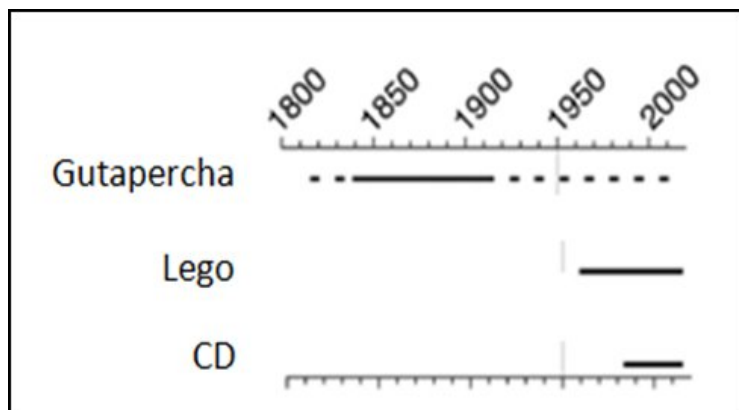


Figura 1b: Tecnofósiles: plásticos y épocas.

¹ J. Zalasiewicz et al. *Anthropocene*. 2016, 13, 4–17.

² ABC El «séptimo continente»: un basurero flotante en el Pacífico.

PREMIOS



Figura 2: Basurero flotante en el Pacífico.

En los ecosistemas marinos, el depósito de los residuos plásticos se produce, porque las corrientes oceánicas arrastran los residuos, formando grandes acumulaciones de los mismos en puntos de remolinos, llamadas islas de basura.²

Este gran problema medioambiental se puede paliar con el uso de polímeros biodegradables. Un polímero biodegradable es aquel cuya degradación resulta de la acción de microorganismos (bacterias, hongos o algas) que provocan la ruptura de los mismos. En condiciones aerobias se genera CO_2 y H_2O y en condiciones anaerobias, además de los dos productos anteriores, se generan H_2 , CH_4 , SH_2 y NH_3 .

Si esta biodegradación se produce en un periodo de tiempo inferior 3 meses y da lugar a fragmentos menores de 2 mm (EN-13432) a podemos hablar de polímeros compostables, que es la situación ideal. En la figura 3 se puede apreciar la degradación compostable en solo 30 días de una botella de ácido poliláctico.³

Otro ejemplo de biodegradación ha sido publicado recientemente por Yoshida y col.⁴ en el que la bacteria *Ideonella skaiensis* (Figura 4) es capaz de digerir y asimilar una lámina de politereftalato de etileno (PET) en seis semanas a una temperatura de 30 °C hasta producir etilenglicol y ácido tereftálico.

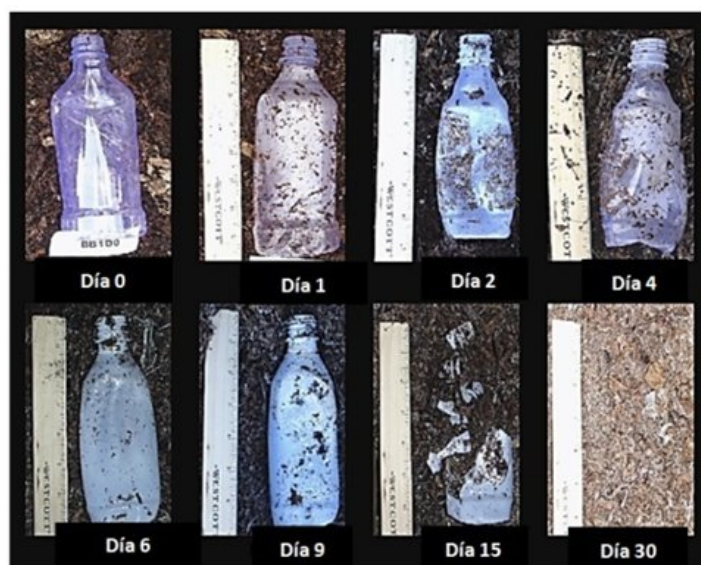


Figura 3: Material compostable.

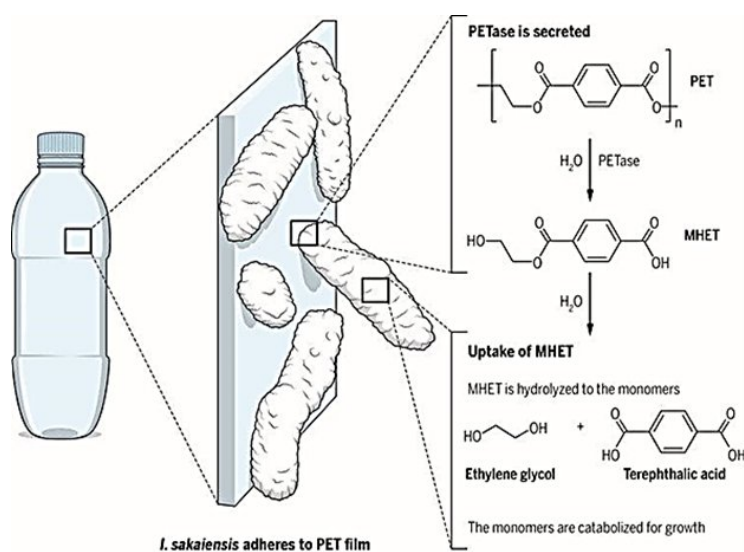


Figura 4: Degradación de PET por *Ideonella skaiensis*.

Por lo tanto, una alternativa para cuidar nuestro planeta es el desarrollo de polímeros biodegradables, tanto naturales como sintéticos, que presenten prestaciones similares a los plásticos derivados del petróleo para poder sustituirlos paulatinamente.

Entrevista a Josué: <http://cienciaes.com/entrevistas/2017/12/26/polimeros-biodegradables/>

² Normas ISO 17088:2008 y EN-13432.

³ Kale et al. Macromol. Biosci. 2007, 7, 255–277.

⁴ Yoshida et al. Science 2016, 351, 1196-1199.

“Green Chemistry Centre of Excellence” Universidad de York (Reino Unido)

Mi nombre es Almudena Lorente y estoy desarrollando mi tesis doctoral en el departamento de Química Orgánica bajo la dirección del Dr. Andrés Moreno Moreno y la Dra. María del Prado Sánchez Verdú.

El pasado Septiembre decidí emprender una aventura de la que a día de hoy no me arrepiento, es más, volvería a repetir sin dudar!!.



Mi estancia se ha llevado a cabo en el “Green Chemistry Centre of Excellence” de la Universidad de York (Reino Unido), desde Septiembre hasta Diciembre bajo la supervisión del Professor James H Clark y del Dr. Vitaliy Budarin.

Cuando me planteé hacer una estancia en el extranjero tenía varios objetivos en mente. Quizá el que más prima en esos momentos, es hacerlo para conseguir el título de doctor internacional. Sin embargo, también es importante salir para conocer cómo se trabaja fuera de nuestra zona de confort, y como no, mejorar la lengua inglesa.

En cuanto al centro, fue fácil decidirlo, pues desde hace años nuestro grupo de investigación mantiene una colaboración con ellos. Su gran experiencia en el campo de la revalorización de residuos me permitiría complementar mi trabajo (obtención de biocombustibles de segunda generación a partir de residuos agroalimentarios).

Así, decidí pasar unos meses trabajando en mi línea de investigación pero empleando una metodología diferente y novedosa. Mediante un tratamiento de licuefacción hidrotermal asistido por radiación microondas se ha obtenido un bio-oil, con muy buenas propiedades y apto para su uso como biocombustible.



Hasta aquí parece que todo ha sido muy fácil, pero NO! Llegar a una ciudad donde no conoces nada, ni a nadie, donde les encanta ir por el lado izquierdo y los primeros días no sabes por dónde te van a aparecer los coches, tener que leer las monedas para irte familiarizando con ellas y como no, esforzarte y tener paciencia para poderte comunicar, no es tarea fácil. Sin embargo, he tenido mucha suerte con la gente que he conocido, pues me han ayudado en todo lo que he necesitado, tanto dentro como fuera del laboratorio

Institut de Physique de Rennes (Université de Rennes 1)

Mi nombre es Antonio Jesús Ocaña Fernández, nacido, criado y formado en la provincia de Málaga. Una vez finalizados mis estudios de licenciatura en química en la universidad de Málaga y pasar un año de erasmus en Ulm (Alemania) en la universität Ulm, comencé mis estudios de doctorado en la UCLM en el departamento de química física, bajo la supervisión de la Dra. Elena Jiménez y el Dr. Bernabé Ballesteros.

Durante los tres últimos 3 meses de 2017 se me presentó la oportunidad de hacer una estancia predoctoral en Francia, con el grupo de investigación de uno de nuestros colaboradores más queridos, el Dr. André Canosa, en la universidad de Rennes, en la región de Bretaña. Una universidad que ha sido pionera en uno de los estudios en los que se centra mi tesis doctoral. La generación de un Jet supersónico en un reactor químico, con el objetivo de conseguir un enfriamiento rápido de las moléculas que lo componen ($T=10-100K$), para así poder hacer estudios cinéticos de moléculas orgánicas con el radical OH. El interés final de este tipo de estudios es incluir esas constantes cinéticas experimentales en modelos que explican las abundancias de las moléculas detectadas en el medio interestelar ($T= 10-100K$). Mis experimentos en Rennes han sido una pieza clave para entender cómo se comportan las moléculas en el Jet supersónico (formación de dímeros, clusters...). Para ello hicimos estudios de espectrometría de masas de tiempo de vuelo.

Pero no todo fue trabajar en el laboratorio, durante el tiempo que estuve allí pude aprovechar para descubrir la maravillosa y mágica Bretaña francesa, plagada de paisajes de ensueño y la cultura francesa más allá del tópico de la baguette, el vino y la boina.

Además de toda la experiencia que obtuve al trabajar en el laboratorio (nuevas técnicas experimentales y modos de trabajo), también conseguí lo que es aún más importante, una experiencia vital inolvidable con los compañeros y amigos de la universidad de Rennes.



En el próximo número de Molécula...

En el próximo número de MOLÉCULA recogeremos la Olimpiada de Química y las conferencias de los viernes del IRICA, además de interesantes temas sobre Innovación Docente y estancias postdoctorales...