

Bienal de la RSME 2022

Almadén historical landmark

Artículos de divulgación y publicaciones

Tesis, estancias y distinciones

Nº 163 Época III.  
Enero 2022

Presentación	P. 2
Bienal de RSME 2022	P. 3
Almadén added to the EuChemS Historical Landmarks	P. 7
Noticias	P. 10
Tesis doctorales	P. 11
Estancias	P. 31
Distinciones	P. 33
Artículos destacados	P. 34
Artículo divulgación	P. 36
Conferencias	P. 40
En el próximo número de Molécula	P. 44

Comité editorial: Alba Escalona, Antonio de la Hoz, Beatriz García-Béjar, Diego Jesús González, Rafael Granados, Sonia López, José Pérez.

## PRESENTACIÓN

Inauguramos el 2022 recogiendo en este nuevo número las noticias más relevantes para nuestra Facultad. Entre ellas se destaca la celebración del Congreso Bienal de la Real Sociedad Matemática Española el cual ha sido organizado por los compañeros del Departamento de Matemáticas. Así mismo, nos hacemos eco de un artículo publicado por parte de la European Chemical Society (EuChemS) sobre el reconocimiento de las Minas de Almadén como "Historical Landmark" como ya se avanzó en el pasado número de Septiembre 2021.

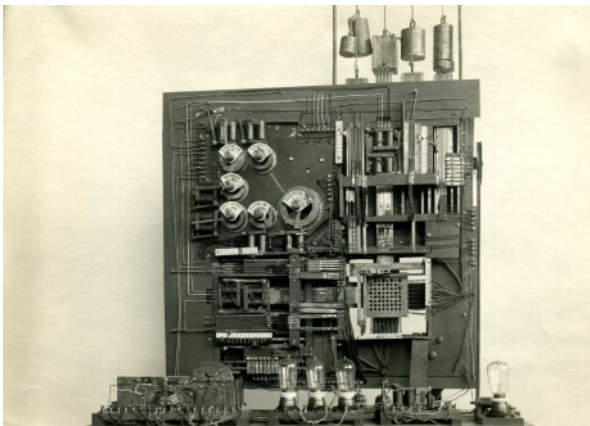
Por otro lado, también se han recopilado otras noticias destacadas o eventos celebrados en la Facultad últimamente, como defensas de tesis, estancias en otros centros, distinciones a coartículos publicados y conferencias.

## La Bienal de la RSME 2022 en Ciudad Real

La Bienal de la Real Sociedad Matemática Española (RSME) se inauguró el lunes 17 en el Paraninfo de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM), presidiendo el acto el rector Dr. José Julián Garde, y participando en la mesa la Alcaldesa de Ciudad Real, Eva María Masías, el Presidente de la RSME, Dr. Francisco J. Marcellán, el Vicepresidente de la Diputación de Ciudad Real, David Triguero, y la Presidenta del Comité Organizador de la Bienal, Dra. Henar Herrero.



También se inauguró oficialmente la exposición “Leonardo Torres Quevedo: ingeniero y matemático, tercer presidente de la RSME”, que ha permanecido expuesta en la Biblioteca General de la UCLM en Ciudad Real, y cuyo comisario ha sido el Dr. Francisco A. González Redondo.



Unos 500 participantes han expuesto a lo largo de estos días del 17 al 21 de enero sus trabajos de investigación, divulgación y experiencias docentes o han participado en debates de actualidad sobre la profesión matemática.



# CONGRESO

Las conferencias plenarias han corrido a cargo de: Teresa Martínez-Seara (U. Politécnica de Catalunya), Marta Casanellas (U. Politécnica de Catalunya), Daniel Peralta-Salas (ICMAT), Diego Córdoba (ICMAT), Javier Fernández de Bobadilla (BCAM), Antonio Alarcón (U. Granada), Kari Astala (U. Helsinki), Gabor Lugosi (U. Pompeu Fabra), Víctor M. Pérez-García (UCLM) y María Ángeles García Ferrero (ICMAT).

Las Mesas Redondas han planteado debates de gran interés sobre matemátic@s español@s por el mundo, el acceso a la profesión docente en secundaria, las relaciones con la empresa, la divulgación en Internet y redes sociales y la influencia de los indicadores bibliométricos en el desarrollo profesional. También se realizó una sesión informativa sobre una colaboración entre la RSME y la RAE para la mejora de la terminología matemática en el Diccionario de la lengua española.



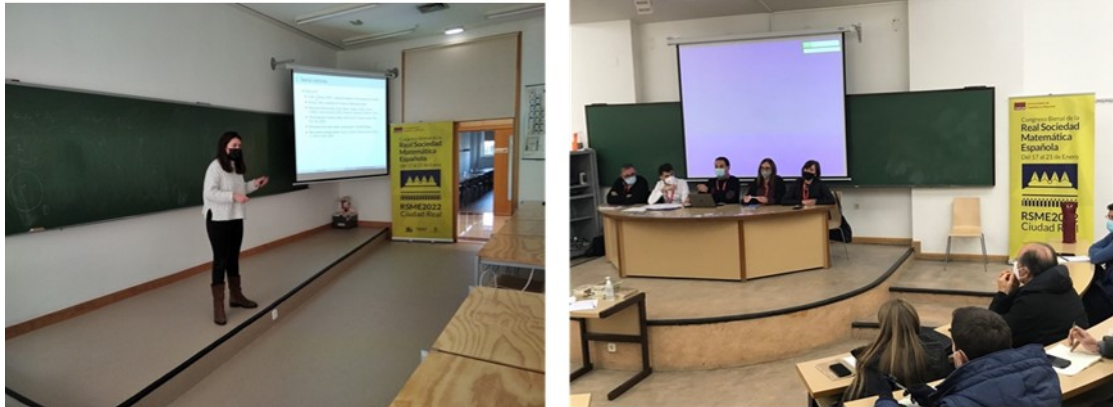
Contamos con tres conferencias divulgativas, dos de ellas sobre Torres Quevedo, a cargo de F. A. González Redondo, y una tercera sobre El espejismo de la mayoría, a cargo de Eduardo Sáenz de Cabezón, con la asistencia de más de 500 personas.



# CONGRESO

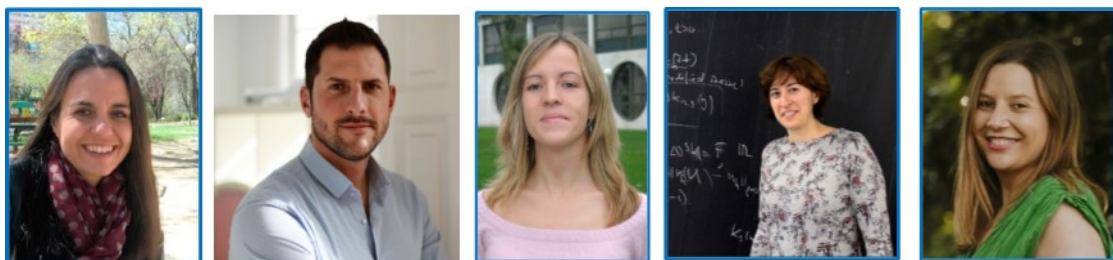
Un póster/prisma Mujeres y Matemáticas que destaca la trayectoria profesional de varias mujeres en distintas etapas de la misma se expuso en el Aulario. Se han presentado 50 pósteres, y hemos contado con tres sesiones de presentación de pósteres en 3 minutos.

Se organizaron 26 sesiones especiales abarcando temas de investigación punteros en métodos numéricos, geometría, análisis, análisis funcional, ecuaciones diferenciales, modelización, teoría de la información, teoría de números, topología, estadística, combinatoria o desarrollo sostenible.



Un subconjunto de actividades del congreso formó parte de una actividad formativa para profesores de Secundaria que contó con una sesión de experiencias docentes.

Se celebraron las elecciones a Presidencia, Tesorería y Vocalías de la Junta de Gobierno de la RSME. Han sido elegidos: Eva A. Gallardo, Javier Martínez, M. Jesús Campión, Luz Roncal y Adriana Suárez.



El lunes por la tarde se organizó una visita guiada de Ciudad Real. El miércoles se celebró la Comida de Gala en los restaurantes El Corregidor y el Parador de Almagro, y los participantes disfrutaron de una visita guiada por Almagro.



Durante la comida se entregaron dos Premios Póster sorpresa para los participantes. El jurado estaba formado por los profesores Dr. Francisco Marcellán, Dra. Eva Gallardo, Dr. Sergio Amat y Dr. Antonio Campillo. Los galardonados han sido:

- Pedro López Gómez (U. Cantabria) y Carmen Ortega-Sabater (UCLM).

También se han entregado premios sorpresa de facilitadores de la organización:

-Premio al participante que primero pagó la inscripción al Presidente de la RSME, Dr. Francisco J. Marcellán.

- Premio Respuesta Rápida al participante que primero respondió a la consulta que se hizo sobre las comidas, al Dr. Juan Carlos Cantero (UAB).

Estos últimos recibieron como regalo el mismo que se entregaba a los conferenciantes plenarios, una copia de un cuadro de nuestro compañero, Dr. Francisco Pla, titulado Jazz. Por otro lado, la Diputación de Ciudad Real regaló a los participantes una botella de vino manchego.

Los medios de comunicación locales y las redes sociales se hicieron eco del evento:



**Lanza**  
Diario de La Mancha

La clausura se realizó en la última comida del evento en el Hotel Doña Carlota. Gracias a todos los participantes, comités, patrocinadores (Ayuntamientos de Ciudad Real y Almagro y Diputación de Ciudad Real), PAS, empresas, que han hecho posible este evento, fue una semana espectacular.



## Almadén added to the EuChemS Historical Landmarks



EuChemS representatives together with the Real Sociedad Española de Química, the Universidad de Castilla-La Mancha, MAYASA industries, Junta de Comunidades de Castilla -La Mancha and other local governmental authorities.

Last September, the EuChemS family finally got together to celebrate the unveiling of the EuChemS Historical Landmarks 2019 plaque in recognition of the role the Mines of Almadén played in the history of chemistry and shared European cultural heritage.

Located in the province of Ciudad Real (Castilla-La Mancha region) in Spain, the Almadén mines, visited the previous day by the attending European guests, represent a world reference of a historic mercury mining site. Mercury is a relatively rare metal: its extraction took place in a very limited number of mines, and Almadén was one of the largest sites of mercury production worldwide until recently. The extensive extraction of mercury deeply impacted the mining industry on a global scale. Thus, the Almadén mines constitute an important heritage of the evolution of scientific and technological methods for mercury extraction. The site has also seen a long history of mercury trade which has generated intercontinental exchanges over the centuries. The mines closed in the year 2000 but remained one of the world's most extensive mercury resources.

# RECONOCIMIENTO



EuChemS representatives and other guests joined in a guided tour to learn more in detail how life was inside the Mines.

The history of Almadén is closely linked to that of the mine and the people who worked in it. Therefore, in the 18th century, the Royal Mining Academy and the Miners' Hospital were established. Both were set up to conduct purely scientific and technical inquiries around the relationship between mercury and life in Almadén. The historic site of Almadén thus tells the entire story of mercury mining, in all its complexity. For several years now, the site's management has successfully shared this history with visitors, including students from all over the country and abroad. This is the reason why the unique and well-preserved Almadén mines were unanimously recommended for the EuChemS HLA award in 2019.

As is usually the case in the EuChemS Landmarks programme, the event started with a scientific symposium followed by the unveiling of the plaque. The event was attended by different representatives, both from regional and European levels. Representing EuChemS, President Floris Rutjes presided over the event accompanied by Pilar Goya (Vice-President), Nineta Hrastelj (Secretary-General) and Laura Jousset (Science Communication and Policy Officer). The event began with an address of the President of the Spanish Royal Society of Chemistry (RSEQ), Antonio Echavarren, who took the opportunity to refer to the potential of scientific tourism: "We want that when mercury is studied, we think of Almadén; we propose to the families to visit these mines, starting a cultural and scientific tourism, and a historical one, given the importance of these mines in Spain's development". The RSEQ was also represented by some former presidents and its Secretary-General Sonsoles Martín de Santamaria. Furthermore, the ceremony was attended by the Rector of the University of Castilla-La Mancha, José Julián Garde López-Brea, the President of the Portuguese Chemical Society, Artur Silva, managers of the Almadén Mines, as well as the President of MAYASA. S.A., Emiliano Almansa, and by numerous people from the scientific field and by municipal and regional representatives from the region of Castilla-La Mancha.



# RECONOCIMIENTO

The official programme was concluded with the unveiling of the plaque that comes with the EuChemS Historical Landmarks award by Floris Rutjes. "I am sure that recognising the historical importance of the Almadén site by EuChemS will provide an impetus to the current efforts to make the mines more known among the general public and enhance the possibilities for tourism also for educational purposes. On the other hand, we as EuChemS can also be proud that the Almadén mines, which were already recognized as a UNESCO World Heritage site, are now on our Historical Landmarks list and thereby will also contribute to the visibility of this EuChemS programme."

The Almadén population resonated with the EuChemS Historical Landmarks award and its event, reaching out in the form of the words of the last speaker of the day, Rosa Carmen Rodríguez Martín-Doimeadios, a researcher originally from Almadén when she remembered the miners and their families: "With these words, we want to express our gratitude to all the families and all the miners who have made History now written in the history books. Though, this History could not have been written but with many other stories. Those stories represent the people who have made enormous efforts and sacrifices, often leaving their health and, sometimes, their lives behind. This recognition also goes to all the people involved in the mines across the centuries: the miners and their families."



Unveiling of the Almadén plaque from Floris Rutjes, accompanied by other authorities, after the Almadén Symposium.

The event ceremony can be re-watched from the RSEQ YouTube channel, and the final program of the event can be found at the editorial services of UCLM.

Please visit EuChemS website and YouTube channel to discover more about this ceremony.

Written by:

Antonio M. Rodríguez García

Research Assistant Professor at the University of Castilla-La Mancha

María Antonia Herrero

Professor at the University of Castilla-La Mancha

Pilar Goya

EuChemS Vice-President

Floris Rutjes

EuChemS President

## La UCLM contará con un nuevo máster internacional Erasmus Mundus en Sostenibilidad y Bioingeniería



Miembros del Departamento de Ingeniería Química reciben a la comisión de la Universidad Tecnológica de Breslavia el octubre pasado.

La Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) ofertará un nuevo máster internacional Erasmus Mundus en Sostenibilidad y Bioingeniería desarrollado por el Departamento de Ingeniería Química en colaboración con las universidades Tecnológica de Laaperanta (Finlandia) y Técnica de Wroclaw (Polonia).

El Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) ha recibido valoración positiva y financiación para la puesta en marcha de un nuevo Máster Internacional en Sostenibilidad y Biotecnología en el marco de las convocatorias de la Unión Europea Erasmus Mundus. En la propuesta formativa participan las universidades Tecnológica de Laaperanta (Finlandia) y Técnica de Woclaw (Polonia), que lidera el proyecto.

Para su desarrollo, el Máster en Sustainable Biomass and Bioproducts Engineering (Sus2BioEng, Sostenibilidad de la Biomasa e Ingeniería de Bioproductos) ha recibido una financiación total de 4,32 millones de euros, lo que supondrá la realización de cinco ediciones (seis años).

Este proyecto formará por curso a una veintena de estudiantes del campo de la ingeniería procedentes de todo el mundo (exige un 75 % de extracomunitarios), que podrán desarrollar un programa de estudios de máster de dos cursos académicos que contempla estancias de seis meses en cada una de las universidades participantes. Los seis meses finales, que se corresponden con el trabajo fin de máster, se realizarán en empresas y centros de investigación de toda Europa.

## Compuestos heterocíclicos con potencial aplicación en fotónica orgánica y nuevos hidrogeles magnéticos

**Doctorando:** Jesús Herrera Herreros

**Directores:** Dra. María del Pilar Prieto Núñez-Polo y Dra. Ester Vázquez Fernández-Pacheco  
**Departamento de Química Inorgánica, Orgánica y Bioquímica. Área de Química Orgánica**

El pasado 20 de diciembre de 2021 tuvo lugar en el Salón de Actos de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas del campus de Ciudad Real la defensa de la tesis doctoral de Jesús Herrera Herreros, titulada "Compuestos heterocíclicos con potencial aplicación en fotónica orgánica y nuevos hidrogeles magnéticos". La tesis, supervisada por las Dra. María del Pilar Prieto Núñez-Polo y Dra. Ester Vázquez Fernández-Pacheco, obtuvo la máxima calificación por parte del tribunal, que estuvo constituido por la Dra. Elisabeth Pires (Universidad de Zaragoza), la Dra. Sonia Merino Guijarro (Universidad de Castilla-La Mancha) y el Dr. Abel de Cózar Ruano (Universidad del País Vasco).

Esta Tesis se basó en el estudio de tecnologías que tienen que ver con la interacción entre la luz y la materia, así como la introducción de sistemas magnéticos en hidrogeles, con la finalidad de generar nuevos sistemas que puedan dar pie al estudio de cómo afecta un campo magnético externo a las propiedades de diferentes hidrogeles o a células que estén contenidas en ellos.

Desde el inicio de la historia de la humanidad, nuestra sociedad se ha interesado por el desarrollo de nuevas tecnologías, cada vez más avanzadas, para dar respuesta a necesidades también cada vez más complejas. Eso ha llevado al estudio de nuevos materiales que poseen propiedades nuevas y mejoradas, ya que los materiales que fueron novedosos en un tiempo pueden quedarse obsoletos en el futuro. En este marco, los materiales orgánicos han aportado nuevas ventajas sobre los tradicionales materiales inorgánicos, puesto que son más baratos de producir, y ofrecen una alta versatilidad en cuanto a su fabricación. Uno de los campos en los que los materiales orgánicos poseen un gran futuro es en las diversas tecnologías basadas en la luz como, por ejemplo, en la construcción de guías de onda, en láseres o en materiales con propiedades de transferencia de dos fotones (TPA, del inglés Two Photon Absorption).

Así, la obtención de guías de onda óptica con propiedades mejoradas permitirá seguir mejorando las actuales formas de comunicación, los láseres permitirán desarrollar nuevas tecnologías como la cirugía sin sangrado, industria, impresoras láser, etc., y los materiales con propiedades TPAs tienen aplicación en campos como: la microfabricación 3D, almacenamiento de datos ópticos tridimensionales, terapia fotodinámica, microscopía de fluorescencia de barrido con láser de dos fotones e interruptores fotocromáticos.

Por otra parte, la biomedicina es un campo que también necesita desarrollar nuevas tecnologías que permitan curar y erradicar enfermedades para las cuales aún no hay cura, o los tratamientos son demasiado invasivos. En ese sentido, los hidrogeles magnéticos pueden ser una alternativa a la medicina tradicional para el tratamiento de enfermedades, como el cáncer, liberando fármacos dirigidos al foco de la enfermedad. Además, en la actualidad, los hidrogeles magnéticos están siendo investigados para el estudio de la proliferación y diferenciación de células mesenquimales, que den lugar a nuevos órganos o tejidos, ofreciendo una vía no invasiva para el tratamiento de enfermedades como el Alzheimer o el Parkinson.



Con estas premisas, el trabajo recogido en la Tesis presentada por Jesús Herrera está dividido en dos partes bien diferenciadas.

En la Parte I, se han estudiado una serie de derivados alquinílicos de 5H-[1,2,5]tiadiazolo[3,4-f]benzotriazol como posibles bloques de construcción para la obtención de agregados supramoleculares con potencial aplicación como guías de onda óptica, así como también se han estudiado sus propiedades de transferencia de dos fotones. Además, también se han estudiado una serie de derivados alquinílicos de perilenimida con la finalidad de estudiar sus propiedades de emisión espontánea amplificada (ASE) y emplearlos como medios activos en láseres.

En la Parte II se ha llevado a cabo la síntesis de nanopartículas magnéticas, así como la funcionalización de grafeno con nanopartículas magnéticas, con la finalidad de ser introducidas en diferentes hidrogeles y dotarles de respuestas a estímulos magnéticos. Así, se han empleado diferentes técnicas para la introducción de las nanopartículas y el grafeno en hidrogeles, con el objetivo de conocer no solo cómo influyen las distintas nanopartículas en el interior de los hidrogeles, sino también cómo influye la manera de introducirlas. Finalmente, se ha llevado a cabo la caracterización tanto de las nanopartículas magnéticas y el grafeno funcionalizado, como de los hidrogeles que los contienen, centrándose en el estudio de sus propiedades mecánicas, magnéticas, grado de hinchamiento y tamaño de poro.



## Electrochemical Technologies to Reduce the Environmental and Sanitary Impact of Hospital Urines

**Doctorando:** Miguel Herraiz Carboné

**Directores:** Dra. Cristina Sáez Jiménez, Dra. Engracia Lacasa Fernández

**Departamento de Ingeniería Química**

El pasado 10 de diciembre de 2021 tuvo lugar en sesión híbrida en la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de Albacete la defensa de la Tesis Doctoral de Miguel Herraiz Carboné, titulada "ELECTROCHEMICAL TECHNOLOGIES TO REDUCE THE ENVIRONMENTAL AND SANITARY IMPACT OF HOSPITAL URINES" y supervisada por la Dra. Cristina Sáez Jiménez y la Dra. Engracia Lacasa Fernández.

En los últimos años, la aparición de las denominadas bacterias resistentes a los antibióticos (*Antibiotic-Resistant Bacteria*, ARB) con capacidad de sobrevivir y multiplicarse en presencia de antibióticos específicamente diseñados para matarlas, se ha convertido en una preocupación mundial por las potenciales amenazas que pueden suponer para la salud humana. Uno de los puntos de mayor concentración de ARB son los efluentes de hospital, y más concretamente, las orinas hospitalarias. Por tanto, esta Tesis Doctoral se centra en la eliminación de bacterias de las orinas hospitalarias. Específicamente, el objetivo principal es evaluar la viabilidad técnica de diferentes procesos electroquímicos, incluyendo la electrólisis y la fotoelectrólisis, para reducir el impacto ambiental y sanitario de las bacterias resistentes a los antibióticos en orinas hospitalarias, evitando la formación de subproductos de desinfección no deseados.

En primer lugar, se evaluó la presencia de ARB en un entorno real mediante la realización de un estudio prospectivo de los patógenos causantes de las infecciones del tracto urinario (UTIs) en el período 2014 a 2018. Este estudio se realizó en colaboración con el Complejo Hospitalario Universitario de Albacete (CHUA) como modelo de instalación sanitaria. El estudio demostró que *Escherichia coli* (*E. coli*) fue la bacteria más significativa encontrada en las orinas positivas (PUs) y que las bacterias gram-negativas predominan sobre las bacterias gram-positivas y los hongos. La *Klebsiella pneumoniae* (*K. pneumoniae*) mostró los porcentajes más altos de resistencia a los antibióticos. Por lo tanto, se señaló la necesidad de buscar y desarrollar tecnologías novedosas que permitan eliminar cepas resistentes de *K. pneumoniae* para disminuir el impacto sanitario y ambiental de los efluentes infectados con esta bacteria.

Seguidamente, se realizó un estudio preliminar de la tecnología electroquímica como alternativa para la eliminación de bacterias en dos escenarios de tratamiento diferentes (aguas residuales urbanas sintéticas y orinas hospitalarias sintéticas) utilizando un reactor convencional de flujo paralelo con ánodos DDB a  $10 \text{ A m}^{-2}$ . Este estudio demostró que, aunque la eficiencia de eliminación de bacterias era menor en las orinas hospitalarias (debido a reacciones de oxidación competitivas), se evitaba la aparición de subproductos de desinfección peligrosos en esta matriz, ya que se favorecía la producción de hipoclorito y la posterior formación de cloraminas inorgánicas.

En este contexto, el siguiente paso fue evaluar el desarrollo de tecnologías electroquímicas de desinfección como pretratamiento para eliminar *K. pneumoniae* de las orinas hospitalarias y conocer así, el rol de los oxidantes electrogenerados en el proceso de desinfección. En primer lugar, se evaluó la contribución de las cloraminas probando dos conceptos de diseño de celdas electroquímicas con ánodos de mezcla de óxidos metálicos (MMO): un reactor convencional de flujo paralelo y un reactor microfluídico de flujo a través. Los resultados mostraron que el proceso de desinfección de *K. pneumoniae* a partir de orina hospitalaria depende de la densidad de corriente y de la disposición del reactor. La formación de cloraminas se potenciaba en el reactor microfluídico de flujo a través y se probó que las cloraminas desempeñan un papel clave en el proceso de desinfección, ya que contribuyen no sólo como agentes desinfectantes sino evitando la generación de subproductos de desinfección clorados. También se evaluó la contribución del ozono en el proceso de desinfección mediante un electrolizador tipo PEM (*Polymer Electrolyte Membrane*) (celda MIKROZON®) especialmente diseñado para producir ozono en aguas de baja conductividad. Los resultados mostraron que la celda MIKROZON® alcanzaba la desinfección total a partir de intensidades de corriente superiores a 0,5 A y que el ozono atacaba el ADN en mayor medida a partir de intensidades de corriente superiores a 0,5 A.

A continuación, se evaluó una alternativa para mejorar la eficiencia del proceso de desinfección mediante el acoplamiento de la oxidación electroquímica con la desinfección UV en el reactor microfluídico de flujo a través para la eliminación de *K. pneumoniae* en orinas hospitalarias. Los resultados mostraron que la fotoelectrolisis mejoraba el rendimiento de la desinfección en la fotólisis y en la electrólisis y que al acoplar la irradiación por luz UV al proceso de electrólisis, se obtenía un marcado efecto sinérgico en la desinfección a 5 A m<sup>-2</sup> con ánodos BDD y MMO.

Finalmente se llevó a cabo la validación de la tecnología electroquímica para el tratamiento de matrices complejas de orina sintética (orinas polimicrobianas). Las orinas hospitalarias polimicrobianas simulan las orinas hospitalarias reales, ya que la pandemia causada por el coronavirus SARS-CoV-2 no nos permitió validar la tecnología electroquímica en un entorno real debido a las restricciones sanitarias. En primer lugar, se analizó la ocurrencia simultánea de más de un patógeno causante de ITU en orinas hospitalarias reales, a partir de los datos suministrados por el CHUA. A continuación, se evaluó la influencia del reactor microfluídico de flujo a través y la celda MIKROZON® para la desinfección de orinas polimicrobianas trabajando bajo las condiciones de operación más adecuadas reportadas en las secciones anteriores. Los resultados mostraron que el reactor microfluídico proporciona un proceso de desinfección más eficiente que la celda MIKROZON® en las condiciones de operación utilizadas. Sin embargo, la celda MIKROZON® alcanzó una disminución media de genes de resistencia antibiótica (*Antibiotic Resistance Genes*, ARGs) clasificada en el orden: *blaKPC* (4,18-logs) > *blaTEM* (3,96-logs) > *ermB* (3,23-logs), logrando una disminución media de 3,77-logs para todos los ARGs probados, mientras que la celda microfluídica no fue capaz de disminuir la concentración de ARGs de forma significativa.



Teniendo en cuenta todos los resultados experimentales, la tecnología electroquímica se postula como una alternativa tecnológica prometedora para ser probada en la desinfección de orinas hospitalarias reales, contribuyendo a minimizar la propagación tanto de bacterias resistentes a los antibióticos como sus genes de resistencia hacia otros medios acuáticos. Además, podría ser particularmente interesante la construcción de un prototipo de diseño compacto de un sistema electroquímico que fuese acoplado a un inodoro donde sólo se recogiesen las orinas hospitalarias. Este sistema electroquímico acoplado al inodoro permitiría desinfectar las orinas del hospital antes de que se mezclen con otros efluentes, lo que disminuiría no sólo el riesgo ambiental sino también el sanitario de las orinas hospitalarias. Estas acciones aumentarían los niveles de preparación de la tecnología (TRLs) desde TRL 4 - Tecnología validada en laboratorio hasta incluso TRL 6 - Tecnología demostrada en un entorno relevante (entorno industrial relevante en el caso de las tecnologías facilitadoras clave).



## Derivados de 2H-benzo[d][1,2,3]triazol y 1,8-naftalenimida como esqueletos multifuncionales en optoelectrónica

**Doctorando:** Beatriz Donoso Jurado

**Directores:** Ángel Díaz Ortiz y M<sup>a</sup> Pilar Prieto Núñez-Polo

**Departamento de Química Orgánica, Inorgánica y Bioquímica. Área de Química Orgánica.**

El pasado 16 de diciembre tuvo lugar en el salón de actos de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas del campus de Ciudad Real la defensa de la Tesis Doctoral de Beatriz Donoso Jurado, estudiante del programa de Doctorado en Química, titulada “Derivados de 2H-benzo[d][1,2,3]triazol y 1,8-naftalenimida como esqueletos multifuncionales en optoelectrónica”. La tesis, supervisada por el Dr. Ángel Díaz Ortiz y la Dra. Pilar Prieto Núñez-Polo, obtuvo la máxima calificación por parte del tribunal compuesto por la Dra. Berta Gómez-Lor Pérez (Instituto de Ciencias de Materiales de Madrid), el Dr. Ricardo Mallavia Marín (Universidad Miguel Hernández de Elche), y el Dr. Fernando Langa de la Puente (Universidad de Castilla La Mancha).

La presente Tesis Doctoral se ha centrado en la síntesis de nuevos compuestos derivados de los núcleos de benzotriazol y naftalenimida. La síntesis y el diseño de estos compuestos se han intentado llevar a cabo siguiendo algunos principios de la Química Sostenible con el fin de minimizar el impacto medioambiental. Por este motivo, se ha empleado la Química Computacional para el diseño de los compuestos con el fin de evitar síntesis innecesarias, y los procesos sintéticos se han llevado a cabo, fundamentalmente, mediante reacciones de acoplamiento C-C bajo radiación microondas.



Por otro lado, se ha evaluado la multifuncionalidad de los compuestos sintetizados, estudiando sus propiedades en aplicaciones electrónicas como semiconductores en transistores de efecto campo orgánicos (OFETs, Organic Field Effect Transistor), fotónicas como guías de onda ópticas, láseres orgánicos y cromóforos capaces de absorber dos fotones y optoelectrónicas como células solares.

Cabe destacar que durante la Tesis Doctoral se ha realizado una estancia en el grupo de la Dra. Rocío Ponce de la Universidad de Málaga y se ha participado en 11 congresos de índole nacional e internacional.

Por tanto, el trabajo llevado a cabo en la presente Tesis Doctoral ha permitido la obtención de compuestos multifuncionales en los que a través de pequeñas modificaciones estructurales se



## Electrochemical valorization of ethanol toward high value-added compounds

**Doctorando:** Alberto Rodríguez Gómez.

**Directores:** Fernando Dorado y Ana Raquel de la Osa.

**Departamento de Ingeniería Química.**

El pasado 13 de diciembre tuvo lugar en sesión híbrida en el salón de actos de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de Ciudad Real la defensa de la Tesis Doctoral de Alberto Rodríguez Gómez, titulada “Electrochemical valorization of ethanol toward high value-added compounds” y supervisada por los doctores Fernando Dorado y Ana Raquel de la Osa.

El incesante crecimiento de la demanda energética mundial unido a la fuerte dependencia de los combustibles fósiles ha originado una crisis energética que solo puede resolverse modificando el sistema de producción actual, es decir, generando un mercado de bienes y servicios desde una perspectiva climáticamente sostenible (economía circular). En las últimas décadas, la creciente preocupación por el cambio climático y el agotamiento de los combustibles tradicionales han impulsado la búsqueda de fuentes de energía alternativas. Debido a su naturaleza renovable, la biomasa se ha postulado como uno de los recursos más viables para la producción de biocombustibles tales como el bioetanol, el cual puede integrarse fácilmente en la red de abastecimiento actual (combustible líquido). A principios del siglo XXI, el volumen de mercado asociado a este compuesto aumentó de forma exponencial, convirtiéndose en un combustible consolidado en el sector del transporte. No obstante, dicha tendencia cambió a partir del 2010, cuando la escasa demanda y la caída de los precios en el mercado de los biocombustibles provocaron un estancamiento de la producción (principalmente en Europa), originando una acentuada crisis en el sector. En este contexto, el uso del bioetanol como molécula plataforma para la síntesis de otros productos químicos de interés industrial podría ser una opción más ventajosa en términos económicos comparado con su aplicación como combustible, revalorizando dicho compuesto.

De entre todos los procesos de revalorización de etanol, el reformado electroquímico se ha postulado como una de las alternativas más prometedoras para la producción de hidrógeno verde. Esta tecnología fue inicialmente desarrollada como un sustituto potencial a la electrólisis de agua debido a su bajo consumo energético y la disponibilidad de la materia prima (sobreproducción de bioetanol). Consecuentemente, la mayor parte de los estudios disponibles en la literatura actual relacionados con el proceso de electro-reformado de etanol se han centrado de manera exclusiva en el desarrollo de catalizadores anódicos para impulsar la producción de hidrógeno. Sin embargo, un concepto relativamente novedoso está emergiendo en los últimos años en lo referido a esta tecnología, mediante el cual el reformado electroquímico puede utilizarse para aprovechar la oxidación parcial de etanol hacia compuestos de mayor valor añadido aparte de hidrógeno. Además, los productos químicos obtenidos a partir de biomasa pueden considerarse “libres de carbono”, lo que contribuye a paliar la crisis medioambiental.

Partiendo de esta base y teniendo en cuenta la experiencia de nuestro grupo de investigación en el campo del reformado electroquímico de alcoholes, esta tesis doctoral se ha centrado en el estudio del proceso de electro-reformado de etanol llevando dicho concepto a un siguiente nivel: la producción combinada de hidrógeno verde y productos químicos de alto valor añadido. El desarrollo de este objetivo se ha llevado a cabo a lo largo de tres líneas o pilares principales: (i) el estudio de la arquitectura de la celda electroquímica, (ii) la búsqueda de una fase metálica activa que mejore la actividad electrocatalítica y (iii) la síntesis de un soporte catalítico eficiente, así como la evaluación de la influencia de este en la morfología final del catalizador. Para ello, se sintetizaron varios electrocatalizadores anódicos basados en Pt mediante el método del poliol modificado y se caracterizaron mediante diferentes técnicas fisicoquímicas y electroquímicas. Para el catalizador catódico, se utilizó Pt/C comercial en todos los estudios llevados a cabo a lo largo de esta tesis doctoral. La reacción de oxidación de etanol (EOR) se evaluó desde una perspectiva fundamental utilizando una configuración de celda de tres electrodos en medio ácido, mientras que el proceso de reformado electroquímico se estudió utilizando una celda de membrana polimérica de intercambio protónico (PEM) bajo condiciones suaves de operación (1 atm y 80 °C).

La presente tesis doctoral contiene 6 capítulos de resultados (Capítulos 4-9) en los cuales se desarrollan los objetivos expuestos anteriormente.

En el Capítulo 4, se estudió la influencia de la arquitectura de la celda PEM en el comportamiento electrocatalítico del sistema. Para ello, se diseñaron tres configuraciones de MEA (ensamblaje membrana electrodo) variando el tipo de capa de difusión de gases (papel de carbón o titanio poroso), el modo de deposición de la capa catalítica (sobre el papel de carbón o directamente sobre la membrana) y el modo de ensamblaje (compresión a elevada presión y temperatura o sin ensamblar). En todos los casos se utilizaron catalizadores comerciales de PtRu/C para el ánodo y Pt/C para el cátodo. Los ensayos electroquímicos mostraron una clara dependencia entre el comportamiento del sistema y el tipo de arquitectura utilizada. En términos generales, las configuraciones basadas en papel de carbón mostraron una actividad electrocatalítica superior en comparación con el rendimiento obtenido cuando se utilizó titanio poroso como capa de difusión de gases. Esto se atribuyó a las mayores limitaciones difusionales (transferencia de materia) ofrecidas por esta última, tal y como se comprobó mediante ensayos de espectroscopia de impedancia electroquímica. La distribución de productos también se vio afectada en función de la configuración utilizada. En particular, la configuración basada en papel de carbón y no ensamblada exhibió los mejores resultados, dando lugar a una mayor generación de compuestos orgánicos y desplazando la generación de ácido acético a valores más bajos de potencial. Se concluyó que la deposición directa de la capa catalítica sobre la membrana (en lugar de sobre el papel de carbón) es más eficiente, mejorando el transporte de iones y reactivos incrementando la actividad electrocatalítica. Esta novedosa configuración de MEA se extrapoló al resto de estudios presentados a lo largo de esta tesis doctoral.

En base a los resultados preliminares sobre la distribución de productos obtenidos en el capítulo 4, la determinación de las diferentes rutas químicas implicadas en la generación de cada compuesto (acetaldehído, ácido acético y acetato de etilo, entre otros) resulta esencial para alcanzar un conocimiento más profundo del proceso electroquímico. Por tanto, en el capítulo 5 se estudió el mecanismo de electro-reformado de etanol en una configuración de celda PEM en condiciones suaves de operación (80 °C y 1 atm) utilizando catalizadores bimetálicos de PtRu/C. Para ello se llevaron a cabo ensayos de cronopotenciometría, así como experimentos en circuito abierto (sin aplicar un potencial de trabajo) para diferentes composiciones de reactivos con el fin de explorar la naturaleza de cada vía química involucrada en el proceso de electro-oxidación de forma aislada. Entre todas las rutas de reacción, el acetato de etilo fue el único compuesto que se producía mediante un mecanismo de reacción no electrocatalítico (vía hemiacetal) con la consiguiente producción de pequeñas cantidades de hidrógeno sobrefaradaico. Por otro lado, se estudió la influencia de la concentración inicial de etanol en la selectividad hacia productos de interés para un amplio rango de concentraciones (0.5-6 M) y niveles de corriente aplicada (0.2-1.4 A). El rendimiento electrocatalítico fue similar para concentraciones de etanol elevadas (4-6 M) alcanzando una elevada actividad. No obstante, para una concentración de reactivo inferior, se produjeron pérdidas de actividad sobre todo a elevados potenciales (>1V) debido a limitaciones por transferencia de materia. En cuanto a la distribución de productos, esta se vio influenciada por la variación en la concentración inicial lo que sugiere la formación de rutas químicas preferenciales en el mecanismo de reacción. Bajos niveles de concentración favorecieron la formación de ácido acético, mientras que disoluciones más concentradas potenciaron la generación de acetaldehído y acetato de etilo. Dicho comportamiento se explicó atendiendo a un efecto competitivo de las especies intermedias adsorbidas en la superficie del catalizador.

Una vez estudiada la arquitectura de la MEA y el mecanismo de reacción, la selección de una fase activa metálica eficiente se convirtió en el objetivo prioritario. Así, en el capítulo 6, se exploró el proceso de electro-reformado de etanol sobre catalizadores bimetálicos de PtRu/C con diferentes relaciones Pt:Ru (5:1, 2:1 y 1:2), sintetizados mediante el método del poliol modificado. El objetivo principal fue evaluar la influencia de la composición de PtRu en el comportamiento electroquímico del sistema, así como en la distribución final de productos. Los ensayos de caracterización fisicoquímica revelaron tamaños de partícula más pequeños y un mayor grado de aleación para los catalizadores con mayor contenido en Ru. El comportamiento electrocatalítico de cada catalizador hacia el proceso de electro-reformado de etanol se investigó mediante varias técnicas electroquímicas tanto en configuración de semicelda como en celda completa (electrolizador PEM). Entre todos los ánodos ensayados en semicelda (estudios fundamentales) el catalizador de PtRu/C con una proporción 2:1 mostró los mejores resultados, proporcionando una mayor área electroquímicamente activa (ECSA) y alcanzando así una mayor actividad electrocatalítica. En cuanto a los ensayos en celda completa, dicho catalizador exhibió el mejor comportamiento electroquímico en términos de densidad de corriente, producción de hidrógeno y distribución de productos (mayor selectividad hacia ácido acético), minimizando el consumo energético. Esta ratio óptima entre ambos metales se mantuvo para posteriores estudios a lo largo esta tesis doctoral.

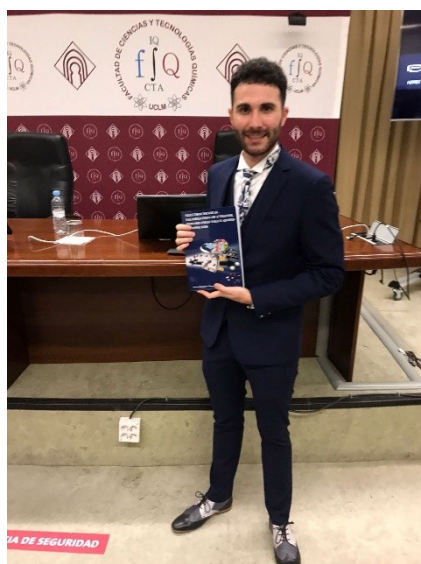
Los dos capítulos siguientes están dedicados al estudio del soporte catalítico utilizando materiales carbonosos basados en Carbones Nobles. Cabe destacar que el descubrimiento de este tipo de carbones es relativamente reciente (2018), siendo esta la primera vez que se utilizan para procesos de oxidación de alcoholes. Estos estudios se han realizado en colaboración con el "Institute of Colloids and interfaces" de la Sociedad Max Planck (Potsdam, Alemania) donde se llevó a cabo la síntesis y caracterización de los materiales carbonosos.



En el capítulo 7, se sintetizaron tres materiales carbonosos dopados con nitrógeno, derivados de la citosina (carbones nobles, NCs) con diferentes relaciones atómicas C/N y redes porosas, mediante la adición de varias mezclas de sales las cuales actuaron como agentes de templado (LiCl/ZnCl<sub>2</sub>, (CLZ), NaCl/ZnCl<sub>2</sub> (CNZ) and LiCl/KCl (CLK)). Posteriormente, estos materiales se utilizaron para la preparación de electrocatalizadores de PtRu/NCs y se testearon en la reacción de electro-oxidación de etanol. Los resultados de la caracterización fisicoquímica mostraron una menor distribución de tamaño de partículas en soportes con relaciones atómicas C/N intermedias y una porosidad definida, mientras que un mayor contenido en nitrógeno y una red porosa menos definida dieron lugar a tamaños de partícula mayores (aglomeraciones) y fomentaron un aumento del grado de aleación. Se observó que el área electroquímicamente activa aumentaba al disminuir el tamaño de las nanopartículas y el grado de aleación, debido a una mayor disponibilidad de los centros activos de Pt. En términos generales, el catalizador de PtRu/CNZ mostró el mejor rendimiento electroquímico tanto en configuraciones de semicelda como de electrolizador PEM. Esto se atribuyó a un compromiso adecuado entre el tamaño de partícula, el grado de aleación, las propiedades texturales y la composición elemental del soporte carbonoso. Aunque la actividad electrocatalítica obtenida no fue sobresaliente en comparación con el estado del arte actual para la reacción de oxidación de etanol (EOR), los resultados fueron prometedores.

Teniendo en cuenta los resultados anteriores, el capítulo 8 consistió en la optimización de los soportes catalíticos basados en Carbones Nobles, para lo cual se utilizó adenina como nucleobase en lugar de citosina. En comparación con la citosina, la adenina presenta una relación C/N inicial más pequeña (cercana a 1) y su estructura química de xantina compuesta por anillos de imidazol confiere a la molécula una mayor estabilidad. Se sintetizaron tres Carbones Nobles diferentes basados en adenina utilizando la misma mezcla de sales que en el estudio anterior. Posteriormente, dichos materiales carbonosos se utilizaron como soportes para la síntesis de electrocatalizadores de PtRu. Tal y como se esperaba, la correlación entre la estructura del soporte y la morfología final del catalizador fue similar a la obtenida para los materiales basados en citosina. Soportes carbonosos con una microporosidad más desarrollada y una mayor área superficial condujeron a la formación de nanopartículas más pequeñas y un mayor grado de dispersión, lo que se tradujo en un mayor valor de ECSA y una actividad electrocatalítica superior hacia la reacción oxidación de etanol. Por el contrario, los materiales carbonosos con un grado de porosidad más pobre y una mayor naturaleza grafitica (menor área activa) fomentaron la formación de nanopartículas más grandes y un mayor grado de aleación, lo que disminuyó la disponibilidad de centros activos de Pt. El electrocatalizador de PtRu/ANZ exhibió el mejor rendimiento electroquímico tanto en configuración de semicelda como de celda completa (electrolizador PEM). Además, el uso de este soporte catalítico resultó ser más eficiente que su equivalente basado en citosina, alcanzando una actividad electrocatalítica alrededor de 4 veces superior en comparación con PtRu/CNZ. Este comportamiento se atribuyó a diferentes aspectos tales como la composición elemental del soporte (mayor contenido en nitrógeno y mayor estabilidad), el mayor grado de dispersión y la naturaleza más básica de estos materiales proporcionando mejores puntos de anclaje para la deposición de las nanopartículas metálicas.

Finalmente, en el capítulo 9, se exploró el proceso de electro-reformado de etanol sobre diferentes electrocatalizadores bimetalícos basados en Pt, modificando el metal secundario (PtCo/C, PtNi/C y PtCu/C). El rendimiento electroquímico se comparó con el obtenido con el catalizador de PtRu/C. El objetivo principal fue estudiar la influencia del metal secundario en la distribución final de productos. Los resultados de caracterización mostraron que la incorporación de Ni y Co en la matriz de Pt mejora las propiedades morfológicas del material, proporcionando tamaños de partícula más pequeños, mayores áreas superficiales y, por tanto, una mejor dispersión de la fase activa en comparación con los electrocatalizadores basados en Ru y Cu. El proceso de electro-oxidación de etanol se evaluó de forma preliminar mediante una configuración en semicelda y posteriormente se escaló a un electrolizador PEM. En términos generales, los catalizadores de PtCo/C y PtNi/C mostraron la mayor actividad electrocatalítica a elevados niveles de polarización, lo que se tradujo en una mejora de más del 30 % en la producción de hidrógeno y en la generación de compuestos orgánicos de interés industrial. Por otro lado, el catalizador de PtRu/C resultó ser más ventajoso para un intervalo de potencial más bajo ( $< 0.85$  V) promoviendo la producción de ácido acético a pesar de sacrificar conversión de etanol. Por el contrario, el catalizador de PtCu/C presentó los peores resultados tanto en rendimiento electroquímico como en distribución de productos, lo que se atribuyó a su limitado comportamiento hidrofílico y a su reducida área activa.



## Development of nanostructured electrodes by magnetron sputtering for anion exchange membrane water electrolysis

**Doctorando:** Ester López Fernández

**Directores:** Dr. Antonio de Lucas Consuegra y Dr. Francisco Yubero Valencia

**Departamento de Ingeniería Química.**

El pasado 21 de Diciembre tuvo lugar en sesión híbrida en la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Agrónomos de Ciudad Real la defensa de la Tesis Doctoral de Ester López Fernández titulada “Development of nanostructured electrodes by magnetron sputtering for anion exchange membrane water electrolysis” y supervisada por los doctores Antonio de Lucas Consuegra y Francisco Yubero Valencia.



La investigación llevada a cabo en la presente tesis doctoral se ha centrado en el desarrollo de electrodos nanoestructurados mediante la técnica de magnetron sputtering para su uso en electrolizadores de agua con membranas de intercambio aniónico. Esta técnica de preparación de catalizadores presenta numerosas ventajas frente a otros métodos de preparación tradicionales y permite la disminución de la cantidad de catalizador.

El continuo incremento de la demanda energética y el carácter finito de las fuentes de energía tradicionales que emiten grandes cantidades de gases de efecto invernadero han contribuido a un cambio climático que solo puede salvarse con una rápida adopción de nuevas fuentes de energía que no dañen el medioambiente. Esta transformación energética requiere un cambio en la generación de electricidad, disminuyendo drásticamente el uso de combustibles fósiles y sustituyéndolos por fuentes de energía renovables como la energía solar o la eólica.



Aunque el hidrógeno es el elemento más abundante del planeta, no se encuentra en la naturaleza como fuente de energía, si no que funciona como vector energético pudiendo producirse mediante diferentes métodos de obtención y utilizando una gran variedad de fuentes de energía. Por otro lado, aunque la forma más simple de producir hidrógeno es mediante la electrólisis de agua, que además presenta la ventaja de no producir gases de efecto invernadero, actualmente la mayoría del hidrógeno (alrededor del 96 %) se genera mediante combustibles fósiles. En este contexto, el objetivo de esta tesis fue contribuir en el desarrollo de electrodos eficientes y económicos para su uso en electrolizadores de agua con membranas de intercambio aniónico para producir hidrógeno.

Para ello, esta tesis se enmarcó en una colaboración entre el Laboratorio de Catálisis y Materiales de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) y el grupo de investigación Nanotecnología en Superficies y Plasma del Instituto de Ciencia de Materiales de Sevilla (ICMS), Centro Mixto Universidad de Sevilla - Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC). Además, la doctoranda realizó una estancia de investigación de tres meses en el Dutch Institute for Fundamental Energy Research en Eindhoven (Países Bajos) y varias estancias cortas en el sincrotrón ALBA de Barcelona con el fin de completar los estudios con técnicas de caracterización.

En primer lugar, en la primera parte de la tesis doctoral se demostró por primera vez en la bibliografía, la viabilidad de preparar electrodos para electrolizadores con membranas de intercambio aniónico mediante deposición física en fase vapor y, en particular, utilizando la técnica de preparación de películas delgadas basadas en pulverización catódica o magnetron sputtering en configuración de ángulo oblicuo (MS-OAD). Esta técnica, que trabaja a temperatura ambiente, permite la deposición de catalizadores nanoestructurados con bajo contenido metálico y un preciso control de la microestructura de los mismos directamente en la capa de difusión de gases. En particular, en esta primera etapa se realizó un estudio del efecto de la estequiometría, cristalización y cantidad de material de óxidos de Co/Cu en la reacción de evolución de oxígeno y producción de hidrógeno. Estos estudios se realizaron tanto en configuración de semicelda electroquímica como en configuración de celda de electrólisis completa. Así, junto con la exhaustiva caracterización llevada a cabo de los electrodos antes y después de su uso, se concluyó que los electrodos anódicos que proporcionaban un mayor rendimiento electroquímico eran electrodos amorfos con una proporción atómica de Co/Cu cercano a 1,8 y con una cantidad de catalizador equivalente a una micra de espesor ( $0,4 \text{ mg cm}^{-2}$ ). Con estos electrodos, se obtuvieron densidades de corriente de  $60 \text{ mA cm}^{-2}$  a  $2,0 \text{ V}$  y  $40 \text{ °C}$  en configuración de celda de electrólisis.

En una segunda etapa, se prepararon electrodos de níquel mediante la misma técnica con diferentes estados de oxidación (metálicos, óxidos u oxihidróxidos). Esto fue posible gracias a la gran flexibilidad que ofrece la técnica de fabricación que, variando parámetros de proceso, permite la deposición de materiales con diferentes estados químicos sin modificar la microestructura. Se demostró que los catalizadores de níquel depositados mediante MS-OAD en estado metálico presentaban los mejores rendimientos en la reacción de evolución de oxígeno. Además, se determinaron las cantidades de catalizador óptimas de  $1080 \text{ nm}$  ( $0,78 \text{ mg cm}^{-2}$ ) en el ánodo y  $540 \text{ nm}$  en el cátodo, debido al balance entre el aumento de los sitios activos con el aumento de la carga de catalizador y su disminución cuando comienzan a producirse aglomeraciones. Con estos electrodos se obtuvieron alrededor de  $45 \text{ mA cm}^{-2}$  a  $2,0 \text{ V}$  y  $40 \text{ °C}$  en celda de electrólisis.

Teniendo en cuenta que en la bibliografía está reportado un efecto positivo en la reacción de evolución de oxígeno al añadir Fe a electrodos basados en Ni, se realizó un estudio de electrodos de Ni-Fe variando la estequiometría. Al añadir Fe, se observó un desplazamiento del pico redox hacia valores de potenciales más positivos asociado con la formación de oxihidróxidos de Ni y Fe. Se observó que al aumentar la cantidad de Fe se mejoraba el rendimiento electroquímico del catalizador hasta unos resultados óptimos con una proporción atómica de Ni/Fe alrededor de 10. Los valores de actividad específica obtenidos en celda de electrólisis superaron incluso hasta en 10 veces los valores reportados por otros grupos de investigación, alcanzando valores de más de  $1000 \text{ mA mg}^{-1}$  a  $40 \text{ }^\circ\text{C}$  (densidades de corriente alrededor de  $400 \text{ mA cm}^{-2}$ ). Para este sistema se investigó también el efecto de añadir ionómero al electrodo, un punto crítico para la mayoría de los métodos de preparación tradicionales. En este estudio se demostró que los electrodos sin ionómero presentaban los mejores resultados, simplificando su proceso de fabricación y reduciendo costes y problemas asociados a este compuesto.

Con el objetivo de continuar mejorando el sistema, se estudió la influencia del resto de elementos que componen un electrolizador. Se probaron diferentes capas de difusión de gases como papeles de carbón o aceros inoxidable, así como varias membranas de intercambio aniónico, y se optimizaron parámetros de operación. Con el uso de electrodos compuestos de una capa de catalizador de Ni-Fe con un *espesor equivalente* de  $540 \text{ nm}$  para el caso del electrodo anódico, y Ni con un *espesor equivalente* de  $540 \text{ nm}$  para el caso del electrodo catódico, ambas capas depositadas en un papel de fibras de acero inoxidable y una membrana comercial Sustainion® 37-50 como membrana de intercambio aniónico, se obtuvo una gran estabilidad durante 7 días, manteniendo la densidad de corriente constante a  $400 \text{ mA cm}^{-2}$ , con una degradación de apenas  $0.05 \text{ \% V h}^{-1}$  utilizando  $1.0 \text{ M KOH}$  a una temperatura de  $40 \text{ }^\circ\text{C}$ .

Por último, una de las limitaciones que presenta la electrólisis de agua son los relativamente altos sobrepotenciales necesarios para producir hidrógeno, lo que limita su comercialización. Para contribuir a minimizar este problema, en la parte final de la tesis se estudió la viabilidad de usar electrodos basados en níquel fabricados mediante MS-OAD en un sistema de electrólisis híbrida de etanol-agua. Los menores requerimientos energéticos para producir hidrógeno se deben a que parte de la energía la proporciona la propia molécula orgánica. Así, se demostró que, añadiendo etanol al electrolito básico, la reacción de oxidación de etanol comenzaba simultáneamente a la formación del oxihidróxido de níquel en el pico redox (en ausencia de reacción de evolución de oxígeno). Además, de forma inversa a la mejora observada al añadir Fe a los electrodos de Ni en la reacción de evolución de oxígeno, cuando añadimos Fe al electrodo de Ni, el rendimiento hacia la reacción de oxidación de etanol disminuye. Se observó una disminución del potencial requerido para alcanzar una cierta densidad de corriente al añadir etanol al sistema en comparación con electrolitos compuestos solamente por KOH. Por último, con la celda de electrólisis óptima y bajo unas condiciones de operación de  $40^\circ\text{C}$ ,  $1.0 \text{ M KOH}$  y  $1.5 \text{ M EtOH}$ , se consiguió una reducción del consumo energético del  $10 \text{ \%}$  (en  $\text{kWh kg}_{\text{H}_2}^{-1}$ ).

## Coupling microbial electroactive anodes with the cathodic treatment of polluted streams

**Doctorando:** Luis Fernando León Fernández

**Directores:** D. Francisco Jesús Fernández Morales y D. José Villaseñor

**Departamento de Ingeniería Química**

El 25 de noviembre de 2021 tuvo lugar la lectura de la Tesis doctoral de D. Luis Fernando León Fernández, del departamento de Ingeniería Química. El título de su tesis fue “Coupling microbial electroactive anodes with the cathodic treatment of polluted streams”. La tesis fue supervisada por los catedráticos D. Francisco Jesús Fernández Morales y D. José Villaseñor. D. Luis Fernando obtuvo la máxima calificación por parte del tribunal, compuesto por: Presidente- D. Juan García Rodríguez (Universidad Complutense de Madrid); Secretario- D. Juan Manuel Ortiz Díaz-Guerra (IMDEA Agua); y Vocal- Dña. Xóchitl Domínguez Benetton (VITO, Flemish Institute for Technological Research).



Su tesis se basó en el desarrollo de sistemas bioelectroquímicos (BES, por sus siglas en inglés), eficaces para el tratamiento de aguas residuales con bajos costes energéticos asociados. Los BES pueden presentar diferentes configuraciones en cuanto al compartimento biótico, en el cual las bacterias electroactivas biocatalizan las reacciones electroquímicas. En la mayoría de los casos, los BES se basan en un ánodo biótico y un cátodo abiótico. En el ánodo biótico, los microorganismos electroquímicamente activos biocatalizan la oxidación de un sustrato orgánico, cediendo electrones al ánodo. En el cátodo abiótico, los electrones se consumen en las reacciones de interés.

En esta tesis doctoral, se estudió el tratamiento de dos aguas residuales industriales típicas en el cátodo abiótico de sistemas bioelectroquímicos: aguas contaminadas con aromáticos clorados, típicamente utilizadas para la formulación de pesticidas y herbicidas; y aguas contaminadas con metales, típicamente generadas durante la actividad minera industrial.



La deshalogenación electroquímica es considerado un método prometedor para el tratamiento de compuestos aromáticos clorados debido a su alta reactividad, condiciones de reacción suaves y bajo mantenimiento. La deshalogenación electroquímica no conduce a la degradación completa de estos contaminantes, sino que genera productos intermedios más biodegradables que podrían ser eliminados posteriormente por la tecnología más adecuada. El principal mecanismo en la deshalogenación electroquímica de compuestos organoclorados consiste en la degradación indirecta por  $H^*$  atómico fruto de la reducción de protones en el cátodo, mecanismo conocido como hidrogenolisis electrocatalítica (ECH).

En cuanto a efluentes industriales abordados en esta investigación, los drenajes ácidos mineros (AMD) son generados en minas abandonadas tras su explotación, produciéndose a través de una combinación de procesos de oxidación química y bioquímica durante la erosión de los sulfuros metálicos de dichos residuos mineros. Como resultado, los AMDs son aguas residuales ácidas (pH entre 1 y 4), con altas concentraciones de sulfatos metálicos ferrosos y no ferrosos disueltos y otras sales, y concentraciones variables de otros metales como Al, Pb, Cd, Cu, Zn, Mn, Ni o Sn, en un intervalo de  $10^{-3}$  a  $10^4$  mg L<sup>-1</sup>. Estos efluentes, de no ser tratados, pueden contaminar los cursos de agua subterráneos y superficiales, dañando la salud de las plantas, seres humanos y fauna.

Esta tesis doctoral se enmarca en la línea de investigación de tratamiento de aguas residuales mediante tecnologías electroquímicas y biológicas, desarrollada en el Laboratorio de Ingeniería Electroquímica y Ambiental (E3L) del grupo TEQUIMA de la Universidad de Castilla-La Mancha.

Cabe destacar que fruto de dicho trabajo se ha contribuido con 7 publicaciones en revistas de alto impacto, así como contribuciones en congresos de ámbito nacional e internacional. Años de intensa dedicación, crecimiento y agradecimiento por participar en equipos de alta calidad profesional y humana.

¡Enhorabuena Luisfer!

## Desarrollo de fluidos termorreguladores de alta estabilidad

**Doctorando:** Macarena Jiménez Vázquez.

**Directores:** Dr. Manuel Carmona Franco y Dr. Ignacio Garrido Saenz.

**Departamento de Ingeniería Química.**

El pasado 15 de diciembre tuvo lugar en sesión híbrida en el Instituto de Tecnología química y medio ambiental (ITQUIMA) de Ciudad Real la defensa de la Tesis Doctoral de Macarena Jiménez Vázquez, titulada “Desarrollo de fluidos termorreguladores de alta estabilidad” y supervisada por los doctores Manuel Carmona Franco e Ignacio Garrido Saenz.



La investigación llevada a cabo en esta tesis doctoral se ha centrado en el desarrollo de nuevos productos que contengan materiales de cambio de fase (PCM), para su aplicación en el sector residencial a través de sistemas activos y pasivos de captación de energía térmica está siendo ampliamente estudiado. Estos sistemas permiten mejorar el aislamiento, reducir los saltos térmicos y el consumo de energía de los sistemas de calefacción y refrigeración. Por esta razón, este trabajo se centra en la producción de fluidos termorreguladores de alta estabilidad y elevada capacidad de almacenamiento térmico.

Existen diferentes tipos de fluidos termorreguladores, pero esta investigación tiene como objeto de estudio, la síntesis, producción y caracterización de slurries de PCM encapsulado (PCSs) y dispersiones de PCM (PCDs). Para ello se han utilizado PCMs con diferentes temperaturas de cambio de fase, n.octadecano (C18) y parasur 130 (P) con unas temperaturas de fusión de 28 y 55°C respectivamente.

Tras la obtención de un polímero de MF con las características deseadas, alta estabilidad térmica y la formación de partículas esféricas de tamaños submicrométricos, se llevó a cabo la síntesis de PCSs, compuestos por cápsulas de MF conteniendo C18 en su interior. Durante esta etapa, se sintetizaron PCSs con un contenido constante de C18+MF del 15 % p/p pero con diferentes relaciones másicas C18/MF, entre 1,86 y 4,00. El objetivo era encontrar la relación C18/MF que permitiera la encapsulación de todo el PCM utilizando la menor cantidad posible de polímero y formando un slurry con buena estabilidad coloidal.

Se encontró que la relación óptima de C18/MF fue 2,33, permitiendo la producción de slurries estables con cápsulas de tamaño nanométrico. A partir de la relación óptima de C18/MF se realizaron diferentes experimentos para la producción de slurries concentrados. Para realizar este proceso fue necesario también la producción de dispersiones concentradas de C18. Se produjeron dispersiones con concentraciones de hasta 34 % p/p de C18 y slurries con concentraciones de hasta 37 % p/p de C18+MF. El proceso de producción de los slurries producidos en la primera parte de la investigación, se realizó en un solo paso a diferencia de la metodología encontrada en bibliografía que plantea un proceso con diferentes pasos.

En segundo lugar en esta investigación, se llevó a cabo la producción de dispersiones utilizando como PCM parasur 130, un material con una temperatura de fusión entre 50-55 °C y dodecilsulfato de sodio (S) como surfactante. El estudio realizado se centró en la producción de dispersiones concentradas con contenidos de P desde 30 hasta 50% p/p utilizando para ello diferentes relaciones de S/P entre 0,100 y 0,200. El objetivo de este estudio es encontrar la dispersión o dispersiones que presenten mejor estabilidad junto con una capacidad de almacenamiento térmico elevada y una viscosidad baja. La dispersión que mejores propiedades presentó fue aquella con un contenido de PCM del 40 % p/p y una relación S/P de 0,200.

Debido a que las dispersiones producidas con parasur 130 presentaron valores altos de subenfriamiento, se planteó realizar dos estudios diferentes para tratar de reducir este efecto. Por un lado, se adicionaron entre un 1 y 1,5 % p/p de nanopartículas de óxido de Zinc a la dispersión óptima (contenido de PCM: 40 % p/p y relación S/P: 0,200), estudiando el efecto que esta adición genera en el subenfriamiento, encontrándose que no se experimenta ninguna mejora.

Por otro lado, se procedió a la producción dispersiones con una relación S/P de 0,200 y un contenido de PCM del 40 % p/p. En este caso, el PCM utilizado fue una mezcla parafina-ácido graso del 90-10 % p/p, la parafina utilizada fue P mientras que los ácidos grasos utilizados fueron ácido mirístico (MA), ácido palmítico (PA) y ácido esteárico (SA). Las dispersiones producidas, no mostraron reducción del subenfriamiento y además presentaron viscosidades bastante elevadas por lo que se planteó la producción de dispersiones con un contenido inferior de PCM del 30 % p/p. En este caso se produjeron diferentes PCDs con un 30 % p/p de PCM y una relación S/PCM de 0,200, utilizando las siguientes relaciones parafina-ácido graso 100-0, 90-10, 80-20, 50-50 y 0-100 % p/p. Nuevamente los resultados sobre el subenfriamiento no fueron los esperados ya que no solo no disminuyó el subenfriamiento si no que además se experimentó un aumento de la viscosidad.



Para finalizar la investigación, se procedió a escalar el proceso de producción de las dispersiones, para ellos se produjo la PCDs de parasur 130 con mejores propiedades (contenido de PCM: 40 % p/p y relación S/P: 0,200) en diferentes volúmenes, 0,1, 0,5 L a escala laboratorio y 90 L a escala planta piloto. Este proceso reveló que la energía de sonicación necesaria para la obtención de dispersiones a gran escala es menor que la necesaria a escala laboratorio, permitiendo la obtención de dispersiones sin comprometer ninguna de sus propiedades. A raíz de estos buenos resultados, se llevó a cabo la producción de 360 L de la dispersión optimizada en 4 lotes diferentes comprobando que el sistema utilizado es robusto ya que las dispersiones producidas en cada uno de los lotes no mostraron diferencias significativas entre las propiedades de los diferentes lotes.

## Estancia de Josué Muñoz Galindo

Mi nombre es Josué Muñoz Galindo y, actualmente, me encuentro realizando mi tesis doctoral en el grupo MSOC Nanochemistry, bajo la supervisión de las profesoras María Antonia Herrero Chamorro y Sonia Merino Guijarro, en el área de Química Orgánica en la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas/IRICA.

Durante 6 meses, de junio a diciembre de 2021, he realizado una estancia predoctoral en la Eindhoven University of Technology (Eindhoven, Países Bajos), en el grupo Stimuli-responsive Functional Materials and Devices (SFD), bajo la supervisión del profesor Albert Schenning.

El tema de mi tesis se centra en la preparación de hidrogeles para ingeniería de tejidos, así como el uso de nanomateriales, como el grafeno, para mejorar, ya sean las propiedades mecánicas de estos materiales, así como facilitar la proliferación y crecimiento celular.

Estos materiales tienen la capacidad de albergar grandes cantidades de agua manteniendo su estructura tridimensional, por lo que se asemejan a los tejidos humanos y son óptimos para su uso en cultivos celulares. Además, son materiales inteligentes, capaces de responder a estímulos externos, como pueden ser la temperatura, cambios de pH o campos magnéticos, entre otros.

En este contexto, y con el fin de ampliar mis conocimientos en nuevos materiales poliméricos, me trasladé a Eindhoven para trabajar con otro tipo de materiales: los Cristales Líquidos. Éstos combinan las propiedades características de los sólidos y de los líquidos, lo que los convierte en materiales muy versátiles en el campo de la electrónica, ya sea para pantallas o relojes, o en el campo de la medicina.

Mi trabajo consistió en optimizar la preparación de unos polímeros basados en cristales líquidos, que responden, como los hidrogeles, a estímulos externos, para su aplicación, de nuevo, en cultivos celulares.



# ESTANCIAS

Más allá del trabajo, la ciudad de Eindhoven no es la clásica ciudad neerlandesa, pues es una ciudad pequeña, tranquila, con numerosas zonas verdes y, sobre todo, muy multicultural, con mucha gente de diferentes países. Esa mezcla de culturas la convierte en una ciudad atípica de Países Bajos, pero con un encanto especial.

Por supuesto, el transporte principal es la bicicleta y, como siempre he dicho desde que llegué, no es una ciudad para visitar, sino para vivir, con un ambiente universitario maravilloso y multitud de actividades para estudiantes e investigadores.

Por otro lado, la estancia no solo ha sido productiva en el ámbito laboral, con buenos resultados y un gran aprendizaje, sino que me ha hecho crecer como persona, abriéndome la mente y mostrándome otras maneras de vivir y disfrutar.





## El profesor Carlos Romero Nieto ha sido reconocido por la Asociación Internacional de Materiales Avanzados de Suecia

El profesor de la Facultad de Farmacia de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) Carlos Romero Nieto ha recibido recientemente el título honorífico “Fellow” por parte de la Asociación Internacional de Materiales Avanzados de Suecia. Se trata de una distinción que le ha sido otorgada en reconocimiento a sus contribuciones y esfuerzos en el desarrollo de materiales funcionales avanzados.

Este reconocimiento, es “un título muy prestigioso que confiere uno de los mayores honores dentro de la comunidad de científicos que desarrollan materiales avanzados”, según destacan desde la Asociación Internacional de Materiales Avanzados. Para el profesor de la UCLM “es un gran honor que esta asociación haya reconocido el esfuerzo de mi grupo de investigación en el desarrollo de nuevas moléculas con propiedades multifuncionales”, dijo, a la vez que agradecía el trabajo y apoyo a todas las personas que han participado en los trabajos de investigación.

El doctor Carlos Romero Nieto fundó su grupo de investigación en el año 2013. Desde entonces sus investigaciones se han centrado en el desarrollo de nuevas moléculas basadas en el átomo de fósforo. Tras lograr la preparación de estructuras moleculares desconocidas hasta la fecha, las investigaciones del profesor han recibido un gran reconocimiento por parte de la comunidad científica internacional. “Estas moléculas han sido aplicadas hasta la fecha en LEDs, sistemas de generación de energía a partir de la luz solar, sensores, bio-marcadores y como agentes quimioterapéuticos contra el cáncer de cerebro”, señala.

En la actualidad se encuentra desarrollando sus investigaciones en la Facultad de Farmacia de Albacete donde dirige un equipo de investigación internacional en el que están representadas cuatro nacionalidades. La distinción de “Fellow” se suma a su Premio Hengstberger por parte de la Universidad alemana de Heidelberg en 2016; el Premio Nacional para Jóvenes Investigadores, de la Real Sociedad Española de Química en 2018 y el Premio para Jóvenes Químicos de la Sección Territorial de Castilla-La Mancha, de la Real Sociedad Española de Química en 2020.

Originalmente publicado en: Gabinete de Comunicación UCLM. Albacete, 7 de diciembre de 2021



## PtRu nanoparticles supported on noble carbons for ethanol electrooxidation

Journal of Energy Chemistry  
Volume 66, March 2022, Pages 168-180  
Doi: [10.1016/j.jechem.2021.07.004](https://doi.org/10.1016/j.jechem.2021.07.004)

Alberto Rodríguez-Gómez<sup>a</sup>, Enrico Lepre<sup>b</sup>, Luz Sánchez-Silva<sup>a</sup>, Nieves López-Salas<sup>b</sup>, Ana Raquel de la Osa<sup>a</sup>

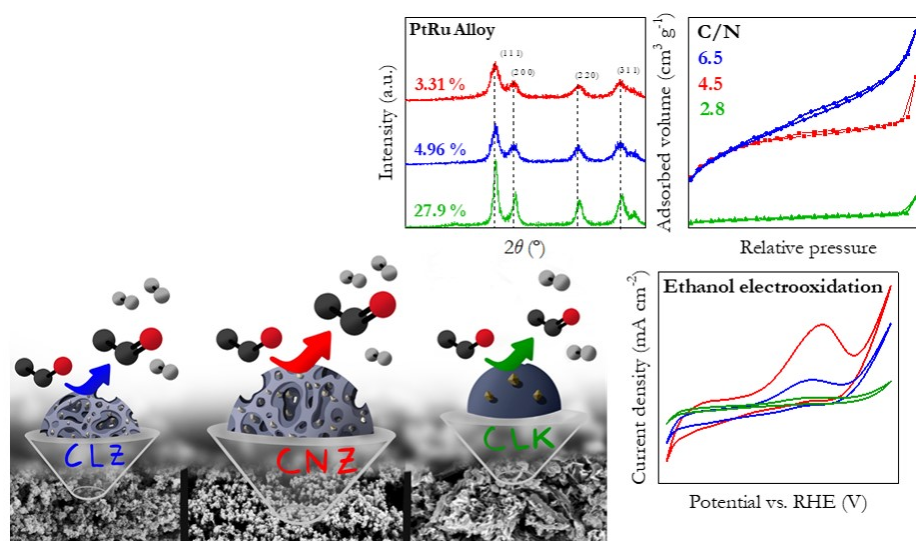
<sup>a</sup>Faculty of Chemical Sciences and Technologies, University of Castilla-La Mancha, Enrique Costa Novella Building. Avda. Camilo Jose Cela, 12, 13071 Ciudad Real, Spain.

<sup>b</sup>Colloid Chemistry Department, Max Planck Institute of Colloids and Interfaces, Am Mühlenberg 1, 14476 Potsdam, Germany.

### Abstract

In this work, three cytosine derived nitrogen doped carbonaceous materials (noble carbons, NCs) with different atomic C/N ratios and porous networks have been synthesized and used as supports for PtRu electrocatalysts in the ethanol oxidation reaction (EOR) for clean hydrogen production. Both, the metal phase, and the carbon support play critical roles in the electrocatalysts final performance. Lower NPs size distribution was obtained over supports with low atomic C/N ratios (i.e., 4 and 6) and defined porosity (i.e., 1701 m<sup>2</sup> g<sup>-1</sup> for PtRu/CNZ and 1834 m<sup>2</sup> g<sup>-1</sup> for PtRu/CLZ, respectively). In contrast, a lower C/N ratio and poor porous network (i.e., 65 m<sup>2</sup> g<sup>-1</sup>, PtRu/CLK) led to the largest particle size and fostered an increase of the alloying degree between Pt and Ru NPs (i.e., 3% for C/N ~ 6 and 28% for C/N ~ 3). Electrochemical active surface area was found to increase with decreasing NPs size and the alloy extent, due to a higher availability of Pt active sites. Accelerated degradation tests showed that PtRu/NCs outperform similar to PtRu NPs on commercial carbon pointing at the stabilizing effect of NCs. PtRu/CNZ exhibited the best electrochemical performance (i.e., 69.1 mA mgPt<sup>-1</sup>), outperforming PtRu/CLZ and PtRu/CLK by 3- and 9-fold, respectively, due to a suitable compromise between particle sizes, degree of alloy, textural properties and elemental composition. Best anodes were scaled-up to a proton exchange membrane cell and PtRu/CNZ was proved to provide the best electrocatalytic activity (262 mA cm<sup>-2</sup> and low energy requirements), matching the values obtained by the state of the art of EOR electrocatalysts.

### Graphical Abstract



DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA

**Gasification versus fast pyrolysis bio-oil production: A life cycle assessment.** A. Alcazar-Ruiz, M. L. Ortiz, F. Dorado, L. Sanchez-Silva. Journal of Cleaner Production. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2022.130373>

**CO<sub>x</sub>-free hydrogen production from ammonia at low temperature using Co/SiC catalyst: Effect of promoter.** M. Pinzón, A. Romero, A. de Lucas-Consuegra, A.R. de la Osa, P. Sánchez. Catalysis Today. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2021.12.005>

**New Advances in Graphene-Based Three-Dimensional Structures: Synthesis and Applications.** In R. Garg, R. Garg, & N. Eddy (Ed.), Handbook of Research on Green Synthesis and Applications of Nanomaterials (pp. 101-128). IGI Global. Javier Cencerrero Fernández del Moral, Amaya Romero Izquierdo, Paula Sánchez Paredes, Osmín Avilés-García and Israel Fernandez-Reina. DOI: <https://doi.org/10.4018/978-1-7998-8936-6.ch005>

**Kinetics of Grape Seed Oil Epoxidation in Supercritical CO<sub>2</sub>.** Juan Catalá, Jesús Manuel García-Vargas, María Jesús Ramos, Juan Francisco Rodríguez and María Teresa García. Catalysts. DOI: <https://doi.org/10.3390/catal11121490>

**PtRu nanoparticles supported on noble carbons for ethanol electrooxidation.** Alberto Rodríguez-Gómez, Enrico Lepre, Luz Sánchez-Silva, Nieves López-Salas, Ana Raquel de la Osa. Journal of Energy Chemistry. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jechem.2021.07.004>

**Additional pathways for the ethanol electro-reforming knowledge: The role of the initial concentration on the product yields.** Alberto Rodríguez-Gómez, Fernando Dorado, Antonio de Lucas-Consuegra, Ana Raquel de la Osa. Fuel Processing Technology. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuproc.2021.106954>



## Biocombustibles: menos emisiones de CO<sub>2</sub> pero también menos aerosoles contaminantes



El avión Airbus A320neo de Iberia, con capacidad para 180 pasajeros, ha realizado [el primer vuelo regular con biocombustible proveniente de residuos de la industria agroalimentaria](#) producidos en España.

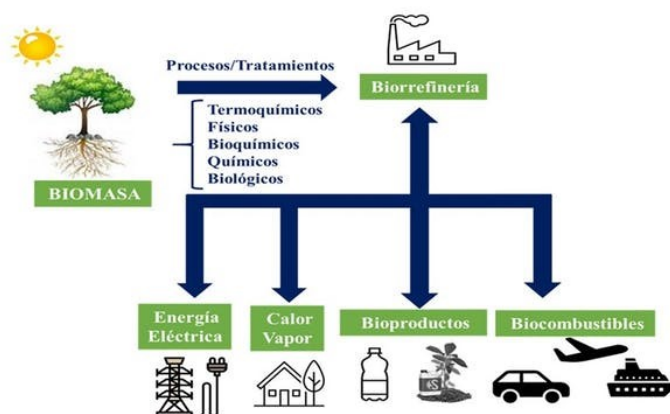
A los más cinéfilos puede que este hecho les recuerde a la mítica película *Regreso al futuro*, donde el entrañable científico Doc hacía funcionar el DeLorean simplemente con basura. Sin duda en 1985 este hecho era ciencia ficción, pero ahora el [uso de residuos para la síntesis de biocombustibles](#) es posible. Veamos en qué consiste este proceso y qué impacto puede tener en el medio ambiente.



Imágenes de la película *Regreso al Futuro* donde se reposta con basura el DeLorean.

## ¿Qué son los biocombustibles?

Los **biocombustibles** son carburantes que han sido diseñados para reemplazar, principalmente, a los derivados del petróleo (combustibles fósiles tradicionales como la gasolina y el diésel). El uso del petróleo no solo es muy contaminante, sino que también se ha vuelto cada vez más escaso, lo que eleva su precio. Los biocombustibles son el resultado del tratamiento físico o químico de la materia vegetal o de residuos orgánicos (biomasa). El objetivo es obtener productos de alto valor energético que contribuyan al desarrollo de una economía más sostenible con el medio ambiente.



Esquema de aprovechamiento de la biomasa.

Cuando la producción de los biocombustibles se basa en el uso de cultivos agrícolas comestibles, se denominan biocombustibles de primera generación (1G). Estos biocombustibles están siendo **los principales sustitutos de la gasolina y el diésel**. Un ejemplo son los bioalcoholes como el etanol y el metanol. También el biodiésel es un biocombustible de primera generación muy utilizado y que puede obtenerse a partir de aceites vegetales.

Sin embargo, la producción de biodiésel y bioalcoholes 1G **ha generado debate acerca de su sostenibilidad**. Su uso ha causado problemas socioeconómicos debido, sobre todo, al encarecimiento de los productos agrarios por el aumento de la demanda de estos cultivos para producirlos.

Los biocombustibles 1G también han originado serios problemas medioambientales como la deforestación. En Indonesia **se destruyeron 20 000 hectáreas de selva tropical para el cultivo de palma** destinada a la producción de biodiesel. Además, su producción consume mucha agua. Se estima que, por cada kilogramo de cereal que se produce, se consume 1 m<sup>3</sup> de agua.

Teniendo en cuenta estos antecedentes, durante los últimos años se ha puesto en marcha el desarrollo de biocombustibles de segunda generación (2G) **obtenidos a partir de biomasa no comestible**. Es por tanto una biomasa más respetuosa con el medio ambiente al ser generada a partir de pastos, madera, residuos agroindustriales y urbanos, de forma que la producción de los alimentos no se ve afectada.

Un buen ejemplo de biocombustibles de segunda generación obtenidos a partir de este tipo de biomasa no comestible son los furanos y lactonas, considerados en la actualidad como uno de los combustibles y materias primas renovables más prometedoras en la industria química.

## Furanos y lactonas como biocombustibles

Los furanos y lactonas son compuestos orgánicos volátiles (COV) con estructuras muy versátiles que son obtenidos a partir de la biomasa mediante reacciones catalíticas y pueden utilizarse como biocombustibles. Así, por ejemplo, es posible sintetizar el furano 2,5-dimetilfurano (2,5-DMF) a partir de los azúcares presentes en la biomasa.

El 2,5-DMF tiene una densidad energética más alta que el etanol y, por tanto, también puede ser empleado como combustible. Sin embargo, durante la síntesis, tratamiento y uso de los biocombustibles, estos COV pueden ser emitidos a la atmósfera y participar en procesos reactivos.

Entre estos procesos destacan la fotólisis (descomposición por acción de la luz del sol) y la reacción con los agentes oxidantes presentes en la atmósfera, como el radical hidroxilo (OH), conocido como el “detergente atmosférico”. Estas reacciones pueden dar lugar a la formación de partículas de tamaño muy pequeño, del orden del nanómetro ( $1\text{ nm} = 10^{-9}\text{ m}$ ), que se conocen como aerosoles orgánicos secundarios (AOS).



### Esquema simplificado de la formación de aerosoles orgánicos secundarios en la atmósfera.

La presencia de estos aerosoles en la atmósfera tiene un gran impacto en la calidad del aire regional y global, provocando daños en la salud humana y efectos en el clima.

Un estudio reciente de la NASA revela que la presencia excesiva de aerosoles en la atmósfera impide la formación y crecimiento de las nubes convectivas, que son las que generan las tormentas. Aunque para la formación de nubes se necesitan partículas de aerosoles que actúan como núcleos de condensación, hay algunos tipos que interfieren negativamente en este proceso.



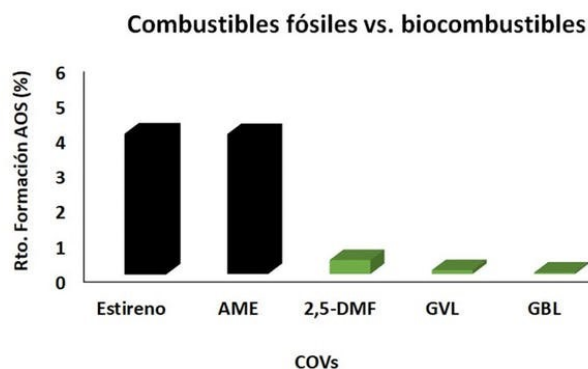
## Menos CO<sub>2</sub> y menos aerosoles

Se espera que con el uso de biocombustibles se produzca una disminución de las emisiones de gases de efecto invernadero, como el CO<sub>2</sub>. En ese sentido, el CO<sub>2</sub> emitido por la combustión de biocombustibles se compensa con el CO<sub>2</sub> absorbido durante el crecimiento de las plantas, con lo que se considera un ciclo neutro.

Así, por ejemplo, [según Iberia](#), el trayecto realizado por el Airbus A320neo ha supuesto un ahorro de 1,4 toneladas en emisiones de CO<sub>2</sub>. Sin embargo, el nivel de contaminación por partículas, entre las que se encuentra el aerosol orgánico secundario, es más incierto.

La [Organización Mundial de la Salud](#) no distingue entre los efectos provocados por partículas derivadas de la quema de combustibles fósiles y las partículas originadas en la combustión de biomasa. Por eso es necesario realizar estudios dentro del campo de la química y la contaminación atmosférica que permitan evaluar las implicaciones de las emisiones de los biocombustibles en la contaminación atmosférica en general, y su aportación como generadores de aerosoles en particular.

Para contribuir a esta labor, una de las líneas de trabajo del grupo [Química de los Procesos Atmosféricos: Experimentación en Laboratorio y Medidas de Campo](#) de la Universidad de Castilla - La Mancha se centra en el estudio de la degradación atmosférica de algunos COV emitidos por el uso de combustibles convencionales ([estireno](#) y [alfa-metilestireno](#)) y biocombustibles ([2,5-DMF](#), [gamma-valerolactona](#) y [gamma-butirolactona](#)), comparando su contribución a la formación de AOS.



**Capacidad de formación de aerosol orgánico secundario (AOS) a partir del uso de combustibles fósiles convencionales (estireno y alfa-metilestireno (AME)) y biocombustibles (2,5-DMF, gamma-valerolactona (GVL) y gamma-butirolactona (GBL)).**

Los resultados indican que, a partir de los compuestos utilizados como biocombustibles, los rendimientos de formación de aerosoles son menores. Por tanto, su uso puede suponer una alternativa más limpia a la de los combustibles convencionales y contribuir a paliar algunos de sus efectos negativos en la atmósfera. Además, estos resultados podrían ser de utilidad en modelos atmosféricos de formación de aerosoles orgánicos secundarios. Principalmente, en los enfocados al estudio de la calidad del aire de áreas que experimentan una grave contaminación por aerosoles.

Escrito por [Diana Rodríguez Rodríguez](#) (Profesora Titular UCLM) y [Ana Rodríguez Cervantes](#) (Profesora de la UCLM) en colaboración con con M<sup>a</sup> Mercedes Tajuelo Díaz-Pavón.

Este artículo fue publicado originalmente en [The Conversation](#).

## La Química Orgánica más allá de la síntesis: Los nuevos materiales orgánicos

**Conferencia impartida por Dr. Iván Torres Moya.**

La Química Orgánica es el área de la Química que se encarga del estudio de las moléculas y los compuestos derivados del carbono. La aparición de la Química Orgánica se asocia a menudo al descubrimiento, en 1828, por el químico alemán Friedrich Wöhler, de que la sustancia inorgánica cianato de amonio podía convertirse en urea. Este descubrimiento rompió la barrera entre compuestos inorgánicos y orgánicos.

La concepción que tiene la mayoría de la sociedad es que un químico orgánico se dedica a la síntesis, y a “mezclar” reactivos para obtener compuestos nuevos, pero hay que aprovechar esta posibilidad que ofrece la Química Orgánica, en colaboración con otras ramas de la ciencia, en lo que se conoce como interdisciplinariedad, para dar un paso más allá y poder construir lo que se llaman materiales orgánicos, que presentan grandes ventajas con respecto a sus análogos inorgánicos como pueden ser la gran versatilidad química, su capacidad de modulación, su mayor ligereza y procesabilidad, su bajo coste o su biocompatibilidad. Todo esto hace que la síntesis en el laboratorio deba dar un paso más allá, y que los compuestos que obtenemos en él puedan aplicarse en campos muy diversos.

Una de las principales ramas donde puede participar la Química Orgánica es en la electrónica orgánica, que consiste en el empleo de moléculas orgánicas con aplicación en dispositivos electrónicos como son los transistores de efecto campo (OFETs) que actúan como interruptores o moduladores de la carga. La modulación de los orbitales molecular frontera mediante la síntesis orgánica permite obtener semiconductores de tipo n, tipo p o ambipolares con movilidades electrónicas altas y aptas para su aplicación en dispositivos.

Por otro lado, los compuestos orgánicos se pueden aplicar como guías de onda óptica, que son estructuras físicas capaces de absorber y transmitir la luz incidente. La Química Orgánica nos ofrece la posibilidad de modular estas propiedades mediante la introducción de diferentes grupos en sistemas dador-aceptor-dador (D-A-D), el dopado con grafeno o el dopado con otras moléculas orgánicas. Además, también es posible la obtención de cristales orgánicos flexibles y la creación de circuitos fotónicos.

Otra aplicación que pueden tener los compuestos orgánicos es como cristales líquidos, que es un estado de la materia intermedio entre el estado sólido y el estado líquido. Para ello, las moléculas orgánicas sintetizadas deben tener un núcleo central rígido y cadenas periféricas que le otorguen flexibilidad, y pueden aplicarse en la fabricación de las pantallas de los dispositivos que utilizamos en nuestro día a día.

En el campo de los geles también tienen mucho que decir las moléculas orgánicas. Las moléculas que sintetizamos en el laboratorio pueden actuar como organogeles, generalmente aquellas moléculas que tengan grupos amida que le permitan formar enlaces de hidrógeno. Es posible la obtención de derivados que tengan una gran estabilidad térmica y mecánica y que puedan aplicarse en la cristalización de fármacos, una técnica muy empleada en la industria farmacéutica para la purificación

# CONFERENCIA

Finalmente, el diseño racional de moléculas orgánicas puede permitir su aplicación como biomarcadores, es decir, moléculas que sean capaces de marcar células, y que además puedan hacerlo selectivamente.

Por lo tanto, como puede verse, la Química Orgánica es una herramienta muy poderosa para el diseño de moléculas con aplicación en campos muy diversos, ya que permite la modulación de las propiedades mediante la síntesis orgánica. Para poder expresar este potencial es necesario la colaboración con el resto de las disciplinas científicas y de esta manera, aprovechar el potencial de la Química Orgánica para contribuir a una sociedad mejor.



## Estados de la materia y sus transformaciones

El viernes 26 de noviembre de 2021, se impartió la conferencia-taller “Estados de la materia y sus transformaciones”, en el CEIP Don Quijote, de Ciudad Real.

Esta actividad es fruto de una colaboración entre la Dirección de este CEIP y el Grupo de Investigación COLOR, y el motivo fue celebrar el mes de la Ciencia, presentando a los alumnos de sexto curso de Educación Primaria, experimentos que, mostrados y explicados de acuerdo con este nivel educativo, muestran todas las transformaciones de los estados de la materia, con ejemplos que todos los chicos de esta edad conocen, realizados directamente delante de los asistentes.



Participantes: Nathalia Hernández, Beatriz Navas, Armando Carrasquero, Riansares del Rey y J.A. Murillo.

Se hace una destilación del vino en tan solo unos dos o tres minutos, mostrando la ebullición y la condensación, la fusión de sólidos, cómo algunos compuestos pueden pasar de sólido a gas sin pasar por líquidos, etc. Se muestran experimentos de congelación con nitrógeno líquido, que se encuentra a una temperatura próxima a 200 grados bajo cero y, para terminar, se les introduce en el cuarto estado de la materia: el plasma. Se muestra experimentalmente la transformación del estado gaseoso en estado de plasma, con un experimento muy atractivo. Por supuesto, las experiencias son totalmente seguras y no cuentan con productos químicos ni residuos peligrosos, ni tan siquiera contaminante, reforzando la realidad de que la química, como Ciencia que es, sólo busca el beneficio y progreso de la humanidad.

Es importante resaltar, que esta conferencia está enfocada de acuerdo con los principios de la educación STEAM, en la que se presentan los fenómenos de forma interdisciplinar y única, sin dividir los procesos en las diferentes formas de estudiarlos individualmente por las diferentes áreas del saber. Así, se combinan las matemáticas, las ciencias, las tecnologías y las artes y las humanidades.

# CONFERENCIA



Destilación de vino utilizando un alquitrabe.



Sublimación de yodo.

## En el próximo número de Molécula...

El próximo número de MOLÉCULA incluirá las actividades que tengan lugar durante el mes de febrero, haciendo especial mención al día de la mujer y la niña en la ciencia, así como más noticias interesantes y curiosidades.

**#DivulgaUCLM**

<https://moleculauclm.wordpress.com/>