



# REVISTA MOLÉCULA

Noticias

Congresos

Concurso Promols

Tesis doctorales y publicaciones

Nº 176 Época III  
Abril 2023

Presentación	P. 2
Limpieza del aire interior	P. 3
La ciencia en el "cole"	P. 6
Svante Arrhenius	P. 8
Music Period Table	P. 11
Spring School PhotoReact Toledo	P. 13
Concurso Promols	P. 15
Tesis doctorales	P. 17
Estancias	P. 19
Artículos Publicados	P. 21
Próximo número de Molécula	P. 23

Comité editorial: Alba Escalona, Beatriz García Béjar, Rafael Granados, Antonio de la Hoz, José Pérez, Álvaro Ramírez, Abelardo Sánchez.

## PRESENTACIÓN

En el número de abril se han recogido las noticias más relevantes para nuestra Facultad en las últimas semanas, así como una nueva participación en el concurso PROMOLS, tesis doctorales defendidas y los artículos publicados por nuestros compañeros, y el congreso Spring School PhotoReact celebrado en Toledo.

El comité editorial.

## Limpieza del aire interior: ¿cuáles son las tecnologías más seguras?



Hasta la llegada de la pandemia de covid-19, se creía que el aire interior era más saludable que el exterior por la falsa creencia de que los edificios nos dan refugio y, por tanto, nos protegen. Sin embargo, la realidad es que el aire interior puede estar hasta cinco veces más contaminado que el aire exterior.

Lo preocupante del asunto es que entre un 80-90 % de nuestro tiempo transcurre en espacios interiores (oficinas, aulas, centros comerciales, hogares, etc.). Por tanto, la mayor parte de las actividades de la vida diaria de una persona tienen lugar en espacios cerrados. Por el ahorro energético estos se suelen ventilar muy poco en otoño e invierno, que es justo cuando más incidencia de enfermedades respiratorias.

### **Aerosoles cargados de patógenos**

Son muchas las enfermedades que se transmiten por los bioaerosoles que exhalamos. Por ejemplo, la COVID-19 que pilló desprevenido al mundo entero y se cobró un precio muy alto en vidas: casi 2 millones de muertes en Europa, si tenemos en cuenta las cifras a 12 de junio de 2022).

También se transmiten por vía aérea los diversos patógenos causantes de la infección del tracto respiratorio superior más frecuente entre los humanos, el resfriado común.

Sin olvidarnos de la gripe, que provoca aproximadamente 70 000 muertes en Europa cada año.

La mejor manera de reducir el riesgo de contagios de estas enfermedades mientras convivimos en interiores es una buena ventilación. Fundamentalmente porque aporta aire exterior, diluye los contaminantes presentes en el interior y regula la humedad y la temperatura.

Pero, ¿qué ocurre si no es posible ventilar constantemente? ¿Qué dispositivos existen en el mercado para limpiar el aire de patógenos?

## Renovar el aire viciado

La normativa actual en España busca lograr una mayor eficiencia energética promoviendo la construcción de edificios cada vez más estancos para aislarnos del exterior, y que, además, posean ventilación mecánica controlada (VMC) para garantizar la renovación de aire y el máximo confort. De hecho, desde el año 2020 es obligatoria la VMC en edificios de nueva construcción en España. Este tipo de ventilación consiste en extraer con un ventilador el aire viciado del interior y reemplazarlo por aire exterior previamente filtrado.

Sin embargo, en los edificios ya existentes sin VMC es importante implementar soluciones para limpiar y reducir la cantidad o actividad de los patógenos que se encuentran en el aire. Por este motivo, ha aumentado el uso de diferentes tecnologías para la limpieza del aire en espacios interiores. Entre ellas la filtración, la adsorción, las lámparas de luz ultravioleta (UV), la ionización bipolar y la fotocatalisis.

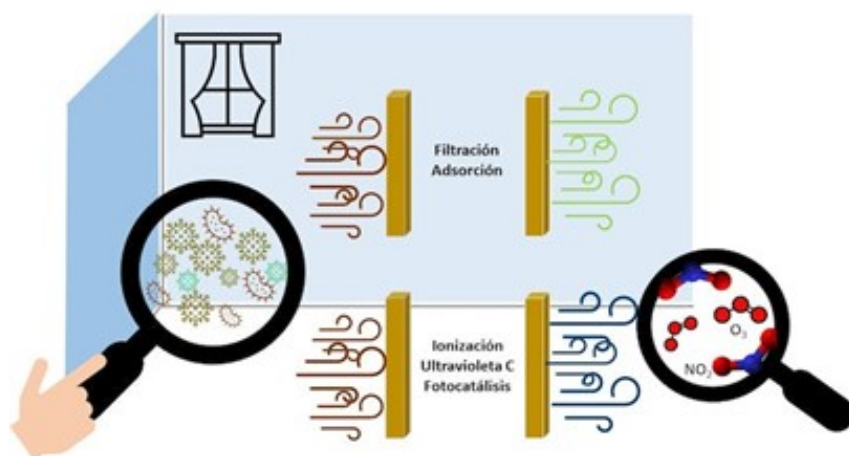


Figura 1. Resumen esquemático de las diferentes tecnologías de limpieza del aire. Elaboración propia

## Tecnologías para limpiar el aire interior

- 1.** La filtración, por ejemplo con filtros HEPA (filtros de partículas de alta eficiencia, de sus siglas en inglés), consiste en hacer pasar el aire interior por una superficie filtrante de fibras muy finas. Generalmente, se usan fibras de cuarzo colocadas al azar. Esto crea un entramado en forma de malla capaz de retener hasta el 99,97 % de los aerosoles de diámetro 0,3  $\mu\text{m}$  (la millonésima parte de un metro) que lo atraviesan.
- 2.** La adsorción consiste en el empleo de un material con una estructura muy porosa (por ejemplo carbón activo o gel de sílice) con propiedades de fijación y retención muy elevadas.
- 3.** Las lámparas germicidas emiten radiación UVC a 253,7 nm y desactivan el ADN de los microorganismos.
- 4.** La fotocatalisis utiliza fotones de luz y materiales semiconductores, como el dióxido de titanio ( $\text{TiO}_2$ ), para generar especies reactivas de oxígeno que destruyen las membranas de los patógenos y, en el caso de la COVID-19, la envoltura proteica del virus.
- 5.** En cuanto a la ionización, se generan iones y radicales libres que también desactivan los microorganismos.

### Algunas tecnologías generan ozono y otros compuestos perjudiciales

La filtración y la adsorción no generan ningún contaminante. Sin embargo, el resto de tecnologías inician reacciones fotoquímicas que generan compuestos orgánicos volátiles, ozono y pequeñas partículas, que pueden provocar efectos perjudiciales para la salud que van desde problemas respiratorios hasta trastornos cardiovasculares e incluso, cáncer.

Entonces, ¿estos equipos no pasan las pruebas pertinentes que verifiquen su inocuidad? ¿Acaso no disponen de las certificaciones oportunas cuando se sacan al mercado?

Sí, pero, a veces, las pruebas que se realizan se hacen en condiciones de laboratorio, muy alejadas de las condiciones reales de uso y las concentraciones de los contaminantes generados pueden encontrarse dentro de los valores permisibles por la normativa vigente.

Así, en un estudio del Instituto de Tecnología de Georgia (Atlanta, Estados Unidos) se ha observado la formación de partículas ultrafinas (de menos de 0,1 micras) durante el funcionamiento de un equipo basado en la fotocatalisis. Estas partículas tan pequeñas pueden alcanzar los alveolos pulmonares causando problemas respiratorios.

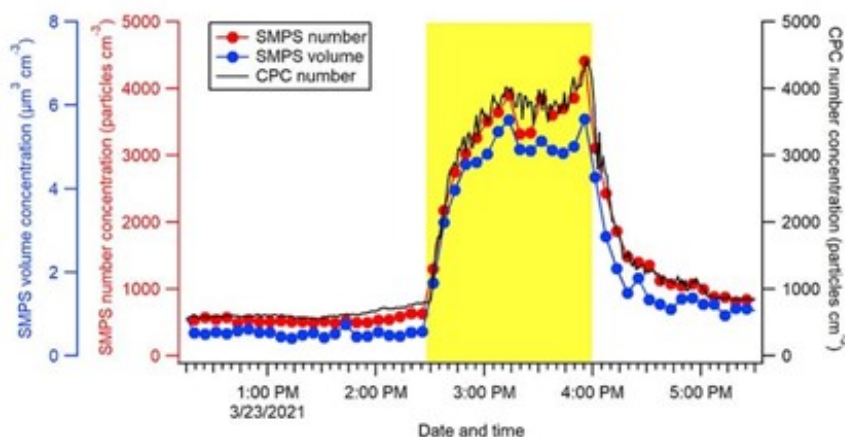


Figura 2. Formación de partículas ultrafinas (de menos de 0,5 micras). Fuente: Joo y col., 2021. Environ. Sci. Technol. Lett. 2021, 8, 8, 691-698.

En la Universidad de Castilla-La Mancha (España) se está llevando a cabo un estudio para evaluar la formación de contaminantes derivados del funcionamiento de un dispositivo basado en la ionización. Los resultados preliminares indican que se forman elevadas cantidades de ozono. En otro estudio realizado en la Universidad de Colorado (Estados Unidos) también se detectó la formación de ozono y de partículas durante el uso de lámparas UVC.

Sin duda, en ausencia de VMC y donde la ventilación natural de un espacio interior no es adecuada o no es posible, se pueden emplear limpiadores de aire. Eso sí, siempre y cuando se basen en tecnologías que no generen contaminantes dañinos para nuestra salud.

Diana Rodríguez Rodríguez, Profesora Titular de Universidad, Universidad de Castilla-La Mancha; Elena Jiménez Martínez, Catedrática de Química Física, Universidad de Castilla-La Mancha y María Antiñolo Navas, Profesora Contratada Doctora Interina, Universidad de Castilla-La Mancha

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

## La Ciencia en el “cole”

El pasado 29 de marzo de 2023, el Grupo COLOR de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas organizó el Taller “La Ciencia en el Cole”. Esta actividad se enmarcó dentro de la Semana Cultural del CEIP José María del Moral de Picón (Ciudad Real).



Los alumnos, de los cursos tercero a sexto de la ESO, disfrutaron participando todos activamente en las experiencias, ya que pasaron en tres grupos distintos de entre 8 y 12 alumnos.

José Antonio Murillo y José Julián de la Rica, trabajaron con estos chicos, presentándoles cuatro experiencias:

- Llévate tu huella, donde obtuvimos la huella dactilar de cada alumno en un papel, mediante al revelado de la huella latente con yodo, y se le dio a cada uno de ellos la suya.



- Tintas invisibles. Aquí utilizamos dos tipos de tintas invisibles: las que se revelan con luz ultravioleta mostrándose los trazos mediante la fluorescencia molecular y las que se revelan mediante reacciones ácido-base utilizando indicadores.

- Mirando lo invisible, donde, mediante un microscopio USB, se mostraban partes de tamaño microscópico de algunas flores, insectos, fibras textiles, el trenzado de sus camisetas, sus cabellos y su piel.

# NOTICIAS

Agradecer a la directora, M<sup>a</sup> Rosario Fernández, y a todo el profesorado del CEIP la ilusión, la implicación y la colaboración con nosotros para que los niños, como puede apreciarse en las fotografías, y nosotros disfrutáramos de este evento.



## Physical Chemistry Pioneer: Svante Arrhenius (1859 – 1927)



- Author: Vera Koester , Catharina Goedecke
- Published On: March 28, 2023
- Copyright: Wiley-VCH GmbH
- DOI: [10.1002/chemv.202300014](https://doi.org/10.1002/chemv.202300014)

Although initially trained as a physicist, Svante Arrhenius is often associated with the field of chemistry and is considered one of the founders of physical chemistry. His groundbreaking contributions to the field earned Svante Arrhenius the Nobel Prize in Chemistry in 1903, making him the first person from Sweden to receive this prestigious award. He is best known for his work on the theory of electrolytic dissociation, activation energy, and the pioneering theory of global warming.

### 1. Svante Arrhenius' Journey to Success

Svante August Arrhenius was born on February 19, 1859, on the estate of Wik on Lake Mälaren, close to Uppsala in Sweden. He is said to have learned to read at the age of three, excelled as a child as a mental calculator, and early on showed a particular interest in mathematics and physics. In 1876, he began studying mathematics and natural sciences at Uppsala University, and in 1881, he transferred to Stockholm University, Sweden, where he received his doctorate in 1884.

His doctoral thesis, written in French, was titled “Recherches sur la conductibilité galvanique des électrolytes.” At that time, it was known that table salt consisted of chlorine and sodium. Sodium and chlorine atoms were thought to be highly reactive, and it seemed highly unlikely at the time that these atoms could move freely in the solution, as the smell of chlorine should have been detectable. Arrhenius proposed that solid crystalline salts disassociate into paired charged particles in solution. His dissertation received a very poor evaluation, and he was not given the opportunity to habilitate.

However, Wilhelm Ostwald (1853 – 1932) was able to experimentally confirm Arrhenius's ideas at the Polytechnic in Riga, which was then part of Livonia, and even came to Stockholm to personally meet the young scientist. Ostwald offered Arrhenius a professorship in Riga, which he could not initially accept due to his father's serious illness.

After receiving a generous travel scholarship from the Swedish Academy of Sciences, Svante Arrhenius traveled throughout Europe. He followed Ostwald to Riga in 1885, worked with Friedrich Kohlrausch and his doctoral student Walther Nernst in Würzburg, Germany, in 1886, went to Ludwig Boltzmann in Graz, Austria, then to van 't Hoff in Amsterdam, The Netherlands, in 1887, and in 1888 back to Ostwald, who was now teaching in Leipzig, Germany. After a brief stay in his homeland, Arrhenius worked again in Leipzig at Ostwald's Physical-Chemical Institute and in Graz in 1889/90.

In 1891, Arrhenius took a position as “Laboratory Director for Physics” at the University of Stockholm. He declined a professorship in Gießen, Germany, which had also been offered to him. In 1895, his position in Stockholm was converted to a professorship. He received the Nobel Prize in Chemistry in 1903, and in 1905, he went to the Nobel Institute for Physical Chemistry.

As an older man, Arrhenius had many administrative duties due to his various positions, but he invested a lot of time in his research and publication work and did not spare his health, such as getting up at four o'clock in the morning to work on a new edition of “The Formation of the Worlds”. He suffered a weakness attack at the end of 1925 from which he did not fully recover. In the spring of 1927, Arrhenius resigned as Director of the Nobel Institute and in the summer he wrote his unfinished memoirs. At the end of September, he was struggling with acute gastroenteritis, which he succumbed to on October 2, 1927. As he wished, he was buried in Uppsala.



Svante Arrhenius was a member of numerous academic and scientific societies in Sweden and abroad, including the Royal Society of Sciences in Uppsala, the Royal Swedish Academy of Sciences, and the Russian Academy of Sciences. He was also honored with numerous awards and honorary doctorates from universities, including the Davy Medal from the Royal Society and the Nobel Prize in Chemistry in 1903. Additionally, several celestial bodies and a scientific award are named after him: The Swedish Chemical Society has been awarding the Arrhenius-plaketten annually since 1962 for outstanding scientific research in the field of chemistry [1].



## 2 Scientific Work

Arrhenius conducted research in various fields, such as physical chemistry, physiology, geology, meteorology, and astrophysics. Some of his most significant contributions were the development of the basics of ionic disassociation [2] and the estimation of the effects of CO<sub>2</sub> increases in the atmosphere on global temperatures via the greenhouse effect—a concept that is central to modern climate science [3,4].

### 2.1 Electrolytic Dissociation of Solutions

Arrhenius made a significant contribution to the theory of the electrolytic dissociation of solutions. He studied how electrical current is conducted in chemical solutions. In his dissertation, he proposed that electrolytes disassociate into paired charged particles, i.e., ions, when dissolved. Depending on the substance and the concentration of the solution, they dissociate to varying degrees.

In 1887, Arrhenius wrote an article on his dissociation theory [2], introducing the term “activity coefficient”. The activity coefficient indicates the proportion of dissolved ions (“active” molecules) to the sum of dissolved and undissolved (“inactive”) particles of that type. Arrhenius used conductivity measurements to determine the degree of dissociation of electrolytes. He concluded from these measurements that in very dilute solutions, the activity coefficient approaches 1, i.e., the electrolytes are fully dissociated into ions. In concentrated solutions, the activity coefficient is less than 1.

Arrhenius later proved the influence of electrolytic dissociation on the osmotic pressure, the lowering of the freezing point, and the increase of the boiling point of solutions containing electrolytes [5]. The Nobel Prize in Chemistry 1903 was awarded to Svante Arrhenius “in recognition of the extraordinary services he has rendered to the advancement of chemistry by his electrolytic theory of dissociation.”

### 2.2 Arrhenius Equation

The Arrhenius equation is a formula that describes the temperature dependence of the rate of chemical reactions. It was introduced by Arrhenius in 1889 [6,7].

The equation shows the dependence of the rate constant  $k$  of a chemical reaction on the temperature  $T$ , with the activation energy of the reaction  $E_a$ , a pre-exponential factor  $A$  (also called the frequency factor), and  $R$  as the universal gas constant:

The equation is based on the concept that chemical reactions occur when molecules collide with sufficient energy and in the proper orientation. Explained in simple terms,  $k$  is the rate of collisions that result in a reaction,  $A$  is the rate of collisions occurring with the proper orientation to react, and  $e^{-E_a/(RT)}$  is the probability that any given collision will result in a reaction.

$$k = Ae^{\frac{-E_a}{RT}}$$

## 2.3 The Greenhouse Effect

In 1896, Arrhenius proposed a theory on the greenhouse effect. He wanted to determine whether greenhouse gases could contribute to explaining the temperature variations between ice ages and the periods of warmer climate between them. He calculated estimates for the extent to which a raise in the atmospheric CO<sub>2</sub> concentration increases the Earth's surface temperature via the absorption and re-emission of heat radiation—i.e., the greenhouse effect. Based on these calculations, Arrhenius was the first to predict that emissions of carbon dioxide from the burning of fossil fuels and other combustion processes were large enough to cause global warming [3,4].

## 2.4 Other Work

In addition to his work on electrolytic dissociation and kinetics, Arrhenius also conducted research on the atmosphere and meteorology, as well as physiology, where he studied physiological problems in terms of chemical theory. He also branched out to astronomy and proposed theories for the cause of, e.g., the polar lights and the origin of life on our planet.

## 3 Arrhenius' Dual Legacy

Despite being renowned for his contributions to the field of chemistry, Arrhenius was also a member of the board of the Swedish Society of Racial Hygiene, an organization that was established in 1909 with the goal of promoting eugenics [8]. The Swedish government established the State Institute for Racial Biology twelve years later. This eventually led to a state-sanctioned program of racial purity that resulted in the forced sterilization of approximately 63,000 individuals, mostly women, from 1934 to 1976.

## References

- [1] Svenska Kemisamfundet (SK, Swedish Chemical Society), Arrhenius-plaketten, kemisamfundet.se. (accessed February 20, 2023)
- [2] S. Arrhenius, Über die Dissociation der in Wasser gelösten Stoffe, Z. Phys. Chem. 1887, 1, 631–648. <https://doi.org/10.1515/zpch-1887-0164>
- [3] S. Arrhenius, On the influence of carbonic acid in the air upon the temperature of the ground, Lond. Edinb. Dublin Philos. Mag. J. Sci. 1896, 41, 237–276. <https://doi.org/10.1080/14786449608620846>
- [4] S. Arrhenius, On the Influence of Carbonic Acid in the Air Upon the Temperature of the Ground, Publ. Astron. Soc. Pac. 1897, 9, 14. <https://doi.org/10.1086/121158>
- [5] Svante Arrhenius – Biographical, Nobel Lectures, Chemistry 1901-1921, Elsevier Publishing Company, Amsterdam, 1966.
- [6] S. Arrhenius, Über die Dissociationswärme und den Einfluß der Temperatur auf den Dissociationsgrad der Elektrolyte, Z. Phys. Chem. 1889, 4, 96–116. <https://doi.org/10.1515/zpch-1889-0408>
- [7] A S. Arrhenius, Über die Reaktionsgeschwindigkeit bei der Inversion von Rohrzucker durch Säuren, Z. Phys. Chem. 1889, 4, 226–48. <https://doi.org/10.1515/zpch-1889-0416>
- [8] N. Ball, Arrhenius, Svante, eugenicsarchive.ca. (accessed March 7, 2023)

## Musical periodic table being built by turning chemical elements' spectra into notes



Rebecca Trager

A researcher at Indiana University in the US, who just received a degree in music composition and chemistry, has turned elements' spectra into haunting music.

W. Walker Smith has built computer code to convert each element's spectrum into a mixture of notes. He hopes that transforming the light into sound will make it easier to detect elemental differences, and also help to teach chemistry. Smith reported this first step toward creating an interactive, musical periodic table at the spring meeting of the American Chemical Society (ACS) on 26 March.

Previously, Smith converted the natural vibrations of molecules into a musical composition, and during that process he observed the spectra of elements. 'I was always looking for a way to turn my chemistry research into music, eventually I stumbled across the visible spectra of the elements and I just was overwhelmed by how beautiful, gorgeous and how different they all look,' he recalled during a briefing at the ACS meeting. 'And I thought "Wow, it would be really cool to turn these beautiful spectra, these beautiful images, into sounds".'

Every element gives off a unique set of wavelengths of light when excited, with brightness levels that are specific to each element – its spectrum. The wavelengths of light emitted by each element can be hard to differentiate from one another, however, especially for the transition metals because they can have thousands of individual colours. Smith hopes his work will provide a new way to interpret elements' spectra.

Other scientists have turned chemistry into sound before. In 2019, researchers from the Massachusetts Institute of Technology assigned each of the 20 common amino acids a note on the C minor scale to create a unique composition to each protein. In another instance, the brightest wavelengths in an element's spectrum were assigned to single notes played on piano keys. But that method produced just a few sounds that didn't reflect the multitude of different wavelengths that some elements emit, Smith said. So, he decided to create his computer code to allow these notes to be generated in real time, forming harmonies and beating patterns as they combined.

Simpler elements like hydrogen and helium sound like chords, while others have a more complex collection of noises. Calcium, for instance, sounds like bells chiming together, while zinc sounds 'angelic', according to Smith. His two favourites are zinc and helium, which he described as a 'groovy, very fun' scale pattern when listened to one-by-one instead of all at once.

Previous research from a team at Nova University Lisbon in Portugal has found sonification to be very effective at helping students with visual impairments to interpret spectroscopic data, Smith noted. 'But I think this goes even beyond that, because even for students that don't have visual impairments, we could still use this as an alternative or supplementary means of data analysis, and perhaps glean some more information, or different types of information, from this spectra using our ears in addition to our eyes,' he added.

In terms of next steps for his project, Smith is currently working with the WonderLab Museum of Science, Health and Technology in Bloomington, Indiana to develop an interactive exhibit that would allow visitors to listen to elements and make their own music with them.

URL del video:<https://youtu.be/4SBRqVCWBZM>

## Spring School PhotoReact Toledo



Los días 28 a 31 de Marzo se ha realizado en el campus de Toledo (Edificio Madre de Dios) la “Spring School” de la red europea PhotoReact.

Las jornadas se estructuraron en dos partes. Los días 28 y 29 se impartieron charlas donde los doctorandos implicados en el consorcio PhotoReact expusieron sus resultados de investigación y el día 29 por la mañana se impartieron una serie de conferencias invitadas sobre distintos aspectos de la fotocatalisis:

Prof. Dr. Paolo Melchiorre - “Photochemistry & Organocatalysis – New Radical Opportunities”

Dr. Esther Alza - “Efficient Reaction Technologies and Processes for Sustainable Chemistry”

Dr. Catherin Holden - “HTE and Automation Enabled Application of Photochemical Synthesis in Crop Protection Research Chemistry.”

Dr. Simon Berritt - “Utilizing Photoredox Catalysis to Enable Challenging Medicinal Chemistry Transformations. ”

Los días 30 y 31 se impartió a los doctorandos un curso impartido por la empresa Talengo

El proyecto PhotoReAct (Home PhotoReact), coordinado por el Dr. Timothy Noël de la Universidad de Amsterdam (UvA), está financiado por la Unión Europea dentro del programa H2020 y tiene como objetivo llevar a cabo investigaciones con el objetivo de superar las limitaciones actuales hacia la aplicabilidad y escalabilidad de las transformaciones fotoquímicas.

# CONGRESOS

La Red de Formación Innovadora PhotoReAct establece una red de formación con 10 grupos beneficiarios del mundo académico y 4 beneficiarios de la industria para abordar los desafíos asociados con la fotocatalisis de una manera coherente e integral.

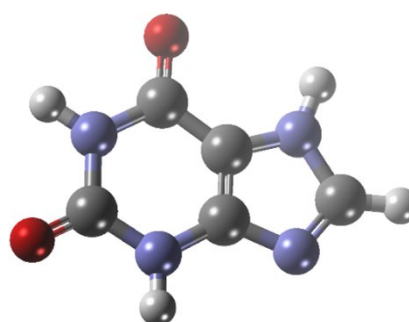
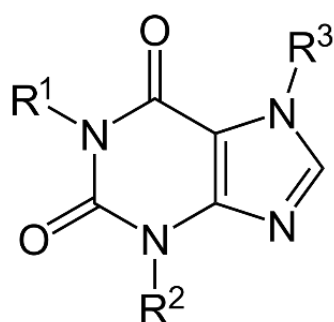
Cada grupo recibe financiación para formar un doctorando con la característica de que se debe realizar la Tesis doctoral en un grupo de un país diferente al de su formación predoctoral. El grupo de Microondas en síntesis orgánica y química verde de nuestra facultad (los profesores Angel Díaz y Antonio de la Hoz) participa como “socio asociado” dentro de la colaboración que mantiene con el centro de investigación de JANSSEN en Toledo (el grupo dirigido por el Dr. Jesús Alcázar).



## CHOCOLATE, CAFÉ Y TÉ, ¿QUÉ TIENEN EN COMÚN?

M<sup>a</sup> Esperanza Fernández Cruz, alumna del Grado en Química

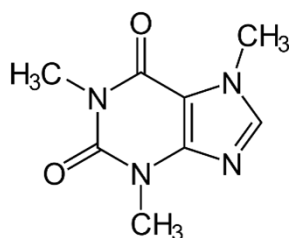
Estos tres alimentos contienen derivados de metilxantinas: como son la cafeína, teobromina y teofilina. Estas moléculas están presentes en distintas concentraciones en estos tres alimentos y son las responsables de sus propiedades características.



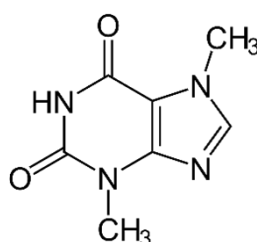
Estructura general de las metilxantinas.

La cafeína fue descubierta en 1819 por el químico alemán Friedrich Ferdinand Runge que le dio el término Kaffein, que pasaría posteriormente al español como cafeína. El químico ruso Alexander Voskresensky descubrió la teobromina en el año 1841 en los granos del cacao y en 1888 Kossel aisló una pequeña cantidad de un nuevo derivado de dimetil-xantinas a partir de las hojas del té, denominándolo teofilina.

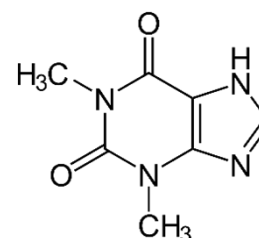
Estas moléculas son consideradas alcaloides, ya que son sustancias fisiológicamente activas, contienen nitrógeno y se encuentran en plantas, siendo ligeramente solubles en agua.



Molécula de cafeína.



Molécula de teobromina.



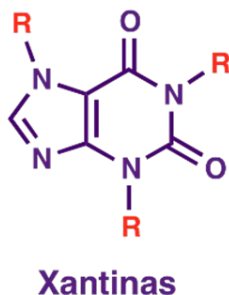
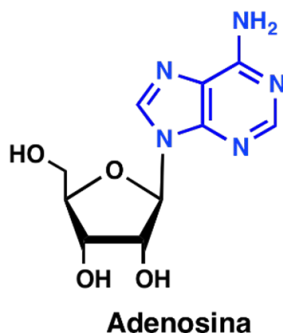
Molécula de teofilina.

Cabe destacar la etimología de sus nombres: teobromina, "comida divina"; teofilina, "hoja de dioses" y cafeína, que viene del alemán como ya se ha mencionado anteriormente.

Todas estas moléculas tienen en común un efecto euforizante, ya que las metilxantinas son alcaloides que tienen efecto estimulante del sistema nervioso y diurético. Su efecto parece deberse a que son antagonistas de los receptores de adenosina.

# PROMOLS

En otros términos, bloquean los receptores de adenosina en el cerebro, neurotransmisores inhibidores, es decir, pueden actuar como un depresor del sistema nervioso central, pudiendo llegar a ser adictivos.



Similitud entre las xantinas y la base nitrogenada de la adenosina (adenina).

Son responsables del tan conocido estado de vigilia y excitación que sentimos después de tomarnos un café, efecto producido también al ingerir el té y chocolate en mayor o menor medida.

Son dignos de mención algunos estudios recientes que han descubierto que la inhibición antes explicada de las metilxantinas podría llevar al desarrollo de tratamientos contra enfermedades como Alzheimer o Parkinson, ya que producen el mismo efecto que los fármacos diseñados para aliviar sus manifestaciones. En cuanto a la teobromina, se ha demostrado que es efectiva contra ciertos episodios de asma y apneas. Además, reduce la concentración de LDL conocido como colesterol malo y aumenta el HDL o colesterol bueno. La teofilina se utiliza también para prevenir y tratar las sibilancias, la falta de aliento y la opresión en el pecho.

A pesar de todos estos beneficios, teniendo en cuenta que pueden convertirse en sustancias adictivas e incluso tóxicas en grandes cantidades, en especial la cafeína, que puede llevar a episodios de ansiedad e insomnio, se recomienda un consumo moderado de estas sustancias.

## Referencias:

<https://isqch.wordpress.com/2013/12/16/chocolate-si-pero-sin-pasarse/>

<https://es.wikipedia.org/wiki/Xantina>

<https://todoenpolimeros.com/2020/09/13/la-quimica-del-chocolate/>

<https://es.wikipedia.org/wiki/Cafe%C3%ADna>

<https://www.interempresas.net/Quimica/Articulos/10751-La-quimica-de-la-cafeina.html>

Trabajo realizado por: María Fernández Cruz.



## EFECTO ANTITUMORAL DEL RESVERATROL A TRAVÉS DE LA MODULACIÓN DE LA SEÑALIZACIÓN ADENOSINÉRGICA Y DEL METABOLISMO LIPÍDICO

**Doctoranda: Sonia Muñoz López**

**Directores: Dra. Mairena Martín López, Dr. José Luis Albasanz Herrero y Dr. Alejandro Sánchez Melgar**

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



El pasado 30 de marzo de 2023, en el edificio San Alberto Magno de la Universidad de Castilla-La Mancha, tuvo lugar la defensa de la Tesis Doctoral de Sonia Muñoz López, estudiante del programa de doctorado en Ciencias de la Salud, con título “Efecto antitumoral del resveratrol a través de la modulación de la señalización adenosinérgica y del metabolismo lipídico”. Este trabajo se ha desarrollado en el área de Bioquímica y Biología Molecular de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de Ciudad Real, bajo la dirección de la Dra. Mairena Martín López, el Dr. José Luis Albasanz Herrero y el Dr. Alejandro Sánchez Melgar.

El cáncer es un grave problema de salud a nivel global y es una de las principales causas de muerte en todo el mundo. Tradicionalmente, esta enfermedad puede tratarse mediante el empleo de distintos métodos, incluyendo la cirugía, la radioterapia, la quimioterapia y la inmunoterapia. En las últimas décadas, el empleo de compuestos naturales presentes en la dieta ha surgido como una estrategia antitumoral preventiva bastante prometedora. Entre estas moléculas, el resveratrol, un polifenol contenido en uvas tintas, cacahuetes o frutos rojos, ha mostrado tener numerosos efectos beneficiosos en la salud por sus propiedades antitumorales, antioxidantes, cardioprotectoras, antiinflamatorias y neuroprotectoras. Sin embargo, el mecanismo molecular de acción a través del cual el resveratrol ejerce sus efectos beneficiosos aún sigue investigándose. Los receptores de adenosina han sido relacionados con el cáncer, puesto que el microambiente tumoral es rico en adenosina, una potente molécula inmunosupresora que favorece la proliferación y expansión de las células tumorales, la angiogénesis y la metástasis. Además, las células tumorales sufren una reprogramación lipídica y metabólica con el fin de satisfacer las demandas biosintéticas y energéticas para mantener su elevado crecimiento y proliferación. Por ello, las alteraciones en el metabolismo lipídico y energético se han considerado un fenotipo característico de las células cancerosas y son dianas potenciales en la terapia contra el cáncer.

El objetivo principal de esta tesis doctoral fue estudiar los mecanismos moleculares que subyacen al efecto antitumoral del resveratrol, fundamentalmente los que implican los receptores de adenosina y el metabolismo lipídico. Para ello, se emplearon distintas líneas tumorales humanas y de rata y el estudio se abordó mediante diversas técnicas de bioquímica y biología molecular.

Los resultados de la primera parte de este trabajo mostraron que el resveratrol fue capaz de modular los niveles de los receptores de adenosina y su funcionalidad, además de las enzimas implicadas en el metabolismo de la adenosina y los metabolitos de esta purina y sus derivados en todas las líneas tumorales. En la segunda parte, la deprivación lipídica indujo la formación de numerosas vesículas intracelulares en las líneas tumorales, con una composición lipídica diferente a los ésteres de colesterol y triglicéridos y una modulación de las enzimas implicadas en la síntesis de novo del colesterol y la lipogénesis de novo dependiente de la línea tumoral.

Como conclusión, la acción antitumoral del resveratrol implicaría la modulación de la vía adenosinérgica y, en función del tipo celular, también la disponibilidad de lípidos y la función energética mitocondrial, por lo que el diseño de una estrategia antitumoral basada en el resveratrol debería considerar no solo los receptores de adenosina sino también al metabolismo lipídico.

## Josué Muñoz Galindo: estancia en Zaragoza

Mi nombre es Josué Muñoz Galindo y, actualmente, soy investigador postdoctoral en el grupo MSOC Nanochemistry, en el área de Química Orgánica en la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas/IRICA.

Durante los meses de febrero y marzo, he realizado una estancia en la Universidad de Zaragoza, concretamente en el Instituto de Investigación en Ingeniería de Aragón (I3A), en el grupo Tissue MicroEnvironment (TME) fruto de una colaboración entre dicho grupo y el grupo MSOC Nanochemistry, de nuestra facultad/IRICA.

El grupo TME tiene como objetivo general la comprensión, simulación y preservación del entorno de células y tejidos en sus condiciones fisiopatológicas para encontrar nuevas estrategias terapéuticas y soluciones personalizadas a los pacientes. Para ello, se centran en el desarrollo de dispositivos microfluídicos (tipo organ on chip) para estudiar procesos biológicos complejos implicados en enfermedades cardiovasculares o el cáncer.

Por su parte, en el grupo MSOC Nanochemistry centramos nuestros esfuerzos en la preparación de nanomateriales (especialmente estructuras de carbono) e hidrogeles, y su combinación para diferentes aplicaciones en el campo biomédico y de la robótica blanda, entre otros.

En este sentido, los hidrogeles (Figura 1a) son materiales tridimensionales tienen la capacidad de albergar grandes cantidades de agua manteniendo su estructura, 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.

Por tanto, la combinación de los sistemas microfluídicos (Figura 1b) con los hidrogeles podría abrir muchas puertas en la simulación de ciertas estructuras biológicas y ampliar nuestro conocimiento en el tratamiento de muchas enfermedades.

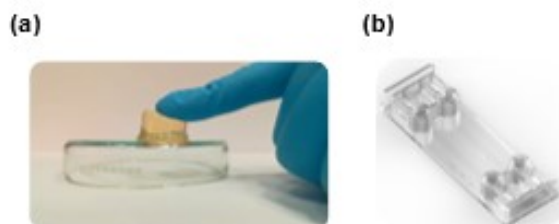


Figura 1: (a) Hidrogel. (b) Sistema microfluídico (BeOnChip®)

Además, en el trabajo tuve la oportunidad de compartir conocimientos con gente de un campo diferente al químico, pues estuve rodeado de biólogos, bioquímicos e incluso matemáticos. Ello permite no sólo comprobar cómo se trabaja en otras áreas, sino que enriquece el conocimiento, confirmando que la colaboración multidisciplinar es esencial para el desarrollo de una investigación fiable y de calidad.

# ESTANCIAS



Figura 2. Basílica del Pilar desde el puente de piedra (izda.) y Palacio de Aljafería (dcha.)

Más allá del ambiente laboral, donde desde principio me hicieron sentir integrado y partícipe de todo, tuve la oportunidad de conocer Zaragoza, una ciudad con historia, con mucho ocio y llena de oportunidades. La Basílica del Pilar, el puente de piedra (Figura 2, izda.) o el Palacio de Aljafería (Figura 2, dcha.) son sus mayores atractivos, aunque, para la gente joven y universitaria, lo más sonado es la “Zona del Tubo”, (caracterizado por un entramado de calles estrechas y llenas de bares ideales para el tapeo) y el “Juepintxo” (jueves universitario de “cerveza + pintxo”) (Figura 3).



Figura 3. Cena con los integrantes del grupo TME lab.

Josué Muñoz Galindo.

## QUÍMICA ORGÁNICA

Ramírez López, T.; Plaza-Pedroche, R.; Rodríguez López, J. (2023). Evaluación de la carga bacteriana del aire en centros educativos como proyecto didáctico. *Revista Eureka sobre Enseñanza y Divulgación de las Ciencias*, 20, 2203.

DOI: [https://doi.org/10.25267/Rev\\_Eureka\\_ensen\\_divulg\\_cienc.2023.v20.i2.2203](https://doi.org/10.25267/Rev_Eureka_ensen_divulg_cienc.2023.v20.i2.2203)

Antón-Cánovas, T.; Achelle, S.; Fernández-Lienres, M. P.; Navarro, A.; Alonso, F.; Rodríguez-López, J. (2023). Acidochromism of amino-substituted indolizine chromophores: towards white light emission. *J. Mol. Liq.*, 380, 121758.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2023.121758>

## TECNOLOGÍA DE ALIMENTOS

Ramos, I.M.; Seseña, S.; Poveda, J.M. (2023). Screening of Lactic Acid Bacteria Strains to Improve the Properties of Non-fat Set Yogurt by in situ EPS Production. *Food and Bioprocess Technology*

DOI: <https://doi.org/10.1007/s11947-023-03080-7>

## INGENIERÍA QUÍMICA

Álvaro Ramírez, Martín Muñoz-Morales, Francisco Jesús Fernández-Morales, Javier Llanos. (2023). S Valorization of Polluted Biomass Waste for Manufacturing Sustainable Cathode Materials for the Production of Hydrogen Peroxide. *Electrochimica Acta*, 456, 142383.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2023.142383>

Ismael F. Mena, Miguel A. Montiel, Cristina Sáez, Manuel A. Rodrigo. (2023). Improving performance of proton-exchange membrane (PEM) electro-ozonizers using 3D printing. *Chemical Engineering Journal*, 464, 142688.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cej.2023.142688>

Rafael Granados-Fernández, Miguel A. Montiel, Andrea N. Arias, Carmen M. Fernández-Marchante, Justo Lobato, Manuel A. Rodrigos. (2023). Improving treatment of VOCs by integration of absorption columns into electrochemical cells using 3-D printing technology. *Electrochimica Acta*, 451, 142298.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2023.142298>

## MATEMÁTICAS

N. Alguacil, H. Herrero and C. Solares. (2023). Observability analysis and restoration for distribution grids: A robust greedy numerical algorithm. IEEE Transactions on Smart Grid.

DOI: [10.1109/TSG.2023.3256488](https://doi.org/10.1109/TSG.2023.3256488)

J. Cortés, H. Herrero, F. Pla. (2023). A POD/Galerkin model from eigenfunctions of non-converged Newton iterations in a convection problem. Physica D: Nonlinear Phenomena 446, 133658.

DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physd.2023.133658>

D. Martínez, H. Herrero and F. Pla. (2022). 2D Newton Schwarz Legendre Collocation Method for a Convection Problem. Mathematics 10(19) 3718

DOI: [10.3390/math10193718](https://doi.org/10.3390/math10193718), 2022.

F. Pla and H. Herrero. (2022). A POD Reduced Order Method Applied to an Instability Problem of Rayleigh-Bénard Convection. International Journal of Bifurcation and Chaos 32 (09) 2250128.

DOI: [10.1142/S0218127422501280](https://doi.org/10.1142/S0218127422501280), 2022.

J. Cortés, H. Herrero and F. Pla. (2022) A Galerkin/POD Reduced-Order Model from Eigenfunctions of Non-Converged Time Evolution Solutions in a Convection Problem. Mathematics 10 (6) 905.

DOI: [10.3390/math10060905](https://doi.org/10.3390/math10060905), 2022.

D. Castaño, M. C. Navarro, H. Herrero. (2022) 3D structure of single and multiple vortices in a flow under rotation. International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulation, 23(5) 777-785.

DOI: <https://doi.org/10.1515/ijnsns-2020-0019>

## En el próximo número de Molécula...

El próximo número de MOLÉCULA incluirá las actividades que tengan lugar en la Facultad durante el mes de mayo, así como más noticias de interés y curiosidades.

**#DivulgaUCLM**

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