

Presentación	P. 2
Premios RSEQ	P. 3
Homenaje Ernesto Martínez	P. 4
XXV Aniversario DIQ	P. 6
Tesis Doctorales	P. 8
Estancia Amparo Soto	P. 14
Conferencias	P. 15

Comité editorial: Consuelo Díaz Maroto, Juan Carlos de Haro, Antonio de la Hoz, José Luis Martín, José Fernando Pérez, Javier Torres, Florentina Villanueva.

PRESENTACIÓN

En primer lugar el equipo editorial quiere desearos lo mejor para 2016 tanto personalmente como profesionalmente. En el primer número del año queremos destacar los actos de celebración del 25 aniversario del Departamento de Ingeniería Química y el acto de homenaje a nuestro compañero el rector Ernesto Martínez. Asimismo el acto de entrega de los primeros premios a Tesis doctorales de la sección territorial de la RSEQ. También recogemos los resúmenes de las numerosas tesis defendidas y conferencias impartidas en estos meses. Finalmente resúmenes de estancias postdoctorales en universidades extranjeras.

El comité editorial.

ENTREGA DE PREMIOS A LAS MEJORES TESIS DOCTORALES EN LA SECCIÓN TERRITORIAL DE CASTILLA-LA MANCHA DE LA RSEQ

El pasado 19 de enero, se celebró en el salón de actos de nuestra Facultad la ceremonia de entrega de galardones a la mejores Tesis Doctorales de la Sección Territorial de Castilla-La Mancha de la Real Sociedad Española de Química en el curso 2014-2015. El acto estuvo presidido por el Dr. Julián Rodríguez, presidente de la Sección Territorial, que fue el encargado de leer el acta del jurado que acordó conceder el primer premio a la Tesis presentada por el Dr. Antonio Manuel Rodríguez García. Asimismo, el jurado estimó conceder un accésit a la Tesis presentada por el Dr. Salvador Cotillas Soriano.

Acto seguido se celebraron unas Jornadas Científicas en las que los dos premiados presentaron el trabajo realizado y que se completaron con una conferencia invitada a cargo del Prof. José Elguero Bertolini, actual Presidente de la Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales y científico de reconocido prestigio nacional e internacional. Su charla titulada “Los químicos en la sociedad” trató sobre la importancia de divulgar adecuadamente la química y la ciencia en general en nuestra sociedad, en especial entre las generaciones más jóvenes.



El Dr. Antonio M. Rodríguez (derecha) y el Dr. Salvador Cotillas (izquierda) tras recibir sus galardones.

LA UCLM AGRADECE LA PROFUNDA DEDICACIÓN DEL EXRECTOR ERNESTO MARTÍNEZ ATAZ A LA INSTITUCIÓN

La Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) ha reconocido hoy públicamente al exrector Ernesto Martínez Ataz su trabajo y "profunda" dedicación al frente de la institución durante el acto homenaje que se le ha brindado en el Campus de Ciudad Real. En agradecimiento a su labor, el Paraninfo del Rectorado pasará a denominarse Paraninfo Rector Ernesto Martínez'.

El Paraninfo del Rectorado en el Campus de Ciudad Real se llamará desde hoy con el nombre de quien fuera rector de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) entre los años 2003 y 2011, Ernesto Martínez Ataz, a quien la institución ha rendido un emotivo homenaje en reconocimiento a su trabajo, esfuerzo y dedicación al frente de la misma.

Numerosos compañeros de la comunidad universitaria, amigos y familiares han acompañado al profesor Martínez Ataz durante el acto celebrado en el Paraninfo Luis Arroyo que ha tenido lugar tras el descubrimiento de una placa en el Paraninfo del Rectorado, ahora 'Paraninfo Rector Ernesto Martínez'.

El acto, que ha presidido el rector, Miguel Ángel Collado, ha sido una muestra de "profundo" agradecimiento al profesor Martínez Ataz por sus años de gestión universitaria y por los logros conseguidos en pro del crecimiento, desarrollo y modernización de la institución; y ha servido para poner de manifiesto el inmenso cariño, respeto y admiración que la comunidad universitaria de Castilla-La Mancha siente por él.

Fruto de su trabajo, Ernesto Martínez Ataz consiguió hacer de la UCLM una Universidad moderna, competitiva, abierta al mundo, europea y de excelencia investigadora, por ello, Miguel Ángel Collado ha afirmado que el de hoy es un "acto de justicia" hacia un profesional y una persona que "pilotó la base de la Universidad regional con maestría e inteligencia".

Durante el desarrollo del acto, y en representación de la comunidad universitaria, intervinieron los rectores honorarios de la UCLM, Isidro Ramos Salavert y Luis Arroyo Zapatero; el director del Departamento de Química Física, José Albaladejo; la secretaria de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas, María del Pilar Martín (en nombre del decano del centro, Ángel Ríos, que excusó su presencia); y Sagrario Fernández, miembro del personal de administración y servicios.

Todos ellos coincidieron en señalar que Ernesto Martínez Ataz fue un "excelente, prudente, discreto y austero" rector, "digno representante de todos y para todos"; pero también un "magnífico" docente e investigador" y "mejor" persona, "siempre dispuesta a ayudar y afrontar los retos con ilusión y con responsabilidad".

El homenajeado recogió las palabras que sobre él se vertieron con "profunda emoción y agradecimiento" y dejó patente durante su discurso la discreción que siempre le ha caracterizado y que hoy muchos de los presentes le han reconocido, pues no dudó en admitir que el suyo no fue un trabajo individual, sino colectivo. "Hicimos una buena universidad entre todos. Yo sólo traté de predicar con el ejemplo", dijo.

En su intervención, Martínez Ataz aseguró que durante sus 20 años de gestión, los doce primeros como vicerrector y los ocho últimos como rector, aprendió "mucho" de todos –en clara referencia al conjunto de la comunidad universitaria-, y a todos ellos les agradeció "su sentido común y buen juicio" por estar a su lado.

HOMENAJE ERNESTO MARTÍNEZ

Ernesto Martínez Ataz (Murcia, 1950) es licenciado en Ciencias Químicas por la Universidad de Murcia (1972) y doctor en Ciencias Químicas por la Complutense de Madrid (1977). Se incorporó a la Universidad de Castilla-La Mancha en 1988 como catedrático de Química Física, institución de la que ha sido director de los departamentos de Química y de Química-Física, vicerrector de Profesorado (1992-1998) y vicerrector Primero y de Nuevas Enseñanzas (1998-2003).

En su etapa como rector (2003-2011), Martínez Ataz se centró en incentivar la investigación en la Universidad de Castilla-La Mancha hasta posicionarla como institución de referencia en el ámbito académico, científico y cultural del país, en modernizar la Universidad regional y en conseguir la homologación de sus títulos al Espacio Europeo de Educación Superior.

Al término de su etapa al frente de la UCLM, el profesor Martínez Ataz se incorporó a la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas en el Campus de Ciudad Real donde, hasta el día de hoy, sigue desarrollando su actividad docente e investigadora.



Descubrimiento de la placa en ya Paraninfo Rector Ernesto Martínez



Ernesto Martínez durante su discurso



Los asistentes aplauden al homenajeado



Los asistentes aplauden al homenajeado

Gabinete de Comunicación UCLM. Ciudad Real, 15 de diciembre de 2015

El Departamento de Ingeniería Química celebra su XXV aniversario

El Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) ha celebrado en 2015 su cuarto de siglo de vida. En el año 1990 la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) comenzaba a escribir un nuevo capítulo de su todavía corta historia. Aquel año se constituía el Departamento de Ingeniería Química. Un cuarto de siglo después, ha quedado claro que aquella nueva apuesta fue un acierto en pro de la formación de profesionales y de la investigación y el desarrollo tecnológico, soportes del tejido económico, social y productivo de la región.

El acto institucional celebrado el 20 de noviembre, sirvió como antesala de un amplio y variado programa de actividades organizadas por el Departamento de Ingeniería Química de la UCLM para conmemorar sus bodas de plata. El programa incluía un ciclo de conferencias, una super-gymkana con pruebas varias para alumnos del Grado y un concurso de prototipos en el ámbito de la Ingeniería Química diseñados por doctorandos del Departamento.

El ciclo de conferencias que, comenzando el 20 de noviembre, se vino celebrando todos los viernes hasta el 18 de diciembre de 2015, destacó por ser impartidas por profesionales de gran prestigio de las principales empresas relacionadas con la Ingeniería Química. Así, entre los ponentes participantes destacan: el Director del Centro de Competencia Ambiental FERROVIAL Servicios S.A., D. Vicente Galván López; el Director Ejecutivo de Química REPSOL, D. Juan Carlos Ruiz Dorado; el Director de Tecnología de REPSOL, D. Fernando Temprano Posada y, el Director Técnico de Laboratorios SERVIER, D. Conrado López Gómez.

Link al video promocional: <https://www.youtube.com/watch?v=XrA9eg1n0Xs>



Conferencia "Los viernes del DIQ" de Juan Carlos Ruiz, de REPSOL



Participantes de la fase final de la Super-Gymkana DIQ XXV Aniversario



Visita a la exposición de prototipos diseñados por los doctorandos del Departamento de Ingeniería Química

GREEN CHEMISTRY AND NUCLEAR MAGNETIC RESONANCE APPLICATIONS TO THE VALORISATION OF VEGETABLE OILS AND LIGNOCELLULOSIC BIOMASS RESIDUES

Doctorando: Covadonga Lucas-Torres Pérez

Directores: Andrés Moreno y Beatriz Cabañas

La alta demanda de materias primas de origen fósil plantea un reto: evitar la pérdida total de recursos del planeta. En este sentido, este trabajo está basado en las novedosas aportaciones de la Química Sostenible en la revalorización de residuos agroalimentarios, que supongan su establecimiento como novedosas materias primas renovables. Así mismo, a lo largo de los capítulos, se han estudiado las aplicaciones que una técnica analítica tan versátil como la Resonancia Magnética Nuclear (RMN), presenta en este ámbito de trabajo.

En primer lugar, se estudió la degradación de aceite de oliva en procesos a altas temperaturas, que pueden emular las condiciones sufridas por esta materia durante el cocinado. La fuente de energía utilizada para el calentamiento de los aceites es importante, de manera que se estudiaron los productos de degradación obtenidos por calentamiento convencional o bajo radiación microondas, mediante ^{31}P RMN. Esta técnica, gracias a una sencilla reacción de derivatización previa, permitió la identificación y cuantificación de productos de degradación de aceite de oliva, y la comparación entre los resultados obtenidos según el tipo de calentamiento.

Por otro lado, este tipo de aceites de desecho, son una materia prima muy útil en la síntesis de biodiesel. La síntesis de este biocombustible a partir de una reacción de interesterificación de las cadenas de ácidos grasos de los triglicéridos con acetato de metilo, genera unos subproductos que es necesario cuantificar antes de la comercialización del biodiesel. Los productos de la interesterificación incompleta se identificaron y cuantificaron mediante ^{13}C RMN, acentuando el potencial de la RMN como técnica para el control de calidad en la síntesis de biodiesel.

La necesidad de obtención de otros biocombustibles llevó, por otro lado, a la búsqueda de alternativas a partir de residuos de biomasa lignocelulósica. Ciertos componentes de la pared celular vegetal, como hemicelulosas y celulosa, permitieron la obtención de precursores de biocombustibles tan interesantes como el 5-hidroximetilfurfural o el ácido levulínico a partir de la deshidratación de azúcares procedentes de distintos residuos. En primer lugar, la gran cantidad de azúcares presentes en residuos de mosto de uva, fueron transformados mediante una reacción rápida y limpia, bajo radiación microondas y un catalizador ácido heterogéneo. Los residuos de bagazo de caña de azúcar sufrieron una previa despolimerización de los polisacáridos principales de la pared celular, tras la cual se llevó a cabo la deshidratación completa de los monosacáridos obtenidos, para la obtención de ácido levulínico bajo radiación microondas. Por último, los residuos procedentes de corteza de melón fueron estudiados por distintas técnicas para conocer su composición. La ruptura de los enlaces en las cadenas de polisacáridos seguida de la deshidratación de los monómeros obtenidos, pudo llevarse a cabo bajo radiación microondas y catálisis ácida bifásica. En todos los casos, la RMN jugó un papel

primordial, en este caso la ^1H y ^{13}C RMN, al ser las técnicas empleadas en la identificación y cuantificación de los distintos precursores obtenidos a partir de cada materia prima.

En una estancia llevada a cabo en la Universidad de Bath (UK), se estudió otro de los componentes de la biomasa lignocelulósica: la lignina. En este caso se partió del residuo procedente de las reacciones en microondas de la corteza de melón. La lignina forma parte de la pared celular vegetal, aportando la fortaleza necesaria a estos materiales. Se llevó a cabo una despolimerización mediante una técnica tan potente como la ozonólisis, obteniendo compuestos fenólicos a partir de la corteza de melón. La capacidad antioxidante de estos compuestos los convierte en interesantes aditivos para la mejora del comportamiento de biodiesel en almacenamiento a largo plazo, o en procesos oxidativos de los motores. Es por ello, que se llevaron a cabo test de oxidación acelerada en distintos biodiesel procedentes de aceites vegetales, estudiando el comportamiento de los mismos con la presencia de los monómeros de lignina obtenidos. Estos comportamientos se estudiaron mediante ^1H RMN de los biodiesel para seguir la oxidación progresiva de los mismos, y cuantificar la cantidad de dobles enlaces degradados en cada momento del estudio, conociendo así el grado de oxidación.

Las aplicaciones en el campo de los materiales también son importantes para estos residuos agroalimentarios. En las células de biomasa vegetal con bajo contenido en lignina, la pectina es uno de los polímeros que proporciona unión al conjunto. Por este motivo, la última parte del trabajo consistió en su extracción a partir de residuos de piel de mango. Esta se realizó durante una estancia llevada a cabo en el Centro de Excelencia de Química Verde de la Universidad de York (UK). De manera convencional, la pectina se obtiene a partir de cítricos y tras un arduo proceso a alta temperatura y medio ácido. Sin embargo, en este trabajo fue posible la obtención de pectina mediante una extracción hidrotérmica asistida por microondas, a temperaturas más bajas y sin necesidad de catalizador ácido. Con la intención de aprovechar al máximo las posibilidades ofrecidas por el residuo de la piel de mango, se estudió, además, el residuo sólido resultante de la extracción de pectina. Un segundo tratamiento en microondas de este material, que presenta un contenido mayoritario en celulosa, mejoró sus propiedades de porosidad, de manera que el sólido obtenido resultó en un material mesoporoso con potencial aplicación en catálisis.

Para concluir, en este trabajo se ha podido llevar a cabo el estudio de cada componente de biomasa lignocelulósica, así como de aceites de oliva, de carácter residual. Además, aquello que hubiese sido considerado como residuo, se ha transformado en recurso para la obtención de numerosos compuestos, utilizando técnicas medioambientalmente benignas, dentro del ámbito de la Química Sostenible.



MARCADORES DE VULNERABILIDAD Y RESPUESTA A LA CIRUGÍA BARIÁTRICA EN LA OBESIDAD MÓRBIDA

Doctorando: José Ramón Muñoz Rodríguez

Directores: Luis Fernando Alguacil y Elisabet Salas

La Organización Mundial de la Salud ha definido la obesidad como la epidemia del siglo XXI, ya que representa uno de los problemas más importantes de salud pública a nivel mundial. Estudios epidemiológicos recientes pronostican además el mantenimiento de esta tendencia creciente y global en un futuro próximo, con el consiguiente incremento de los riesgos asociados para la salud. La obesidad mórbida constituye el grado extremo de exceso de peso y se considera una enfermedad grave con múltiples comorbilidades.

Numerosos antecedentes sugieren que la obesidad es una condición heterogénea y debe contemplarse como tal desde un punto de vista diagnóstico y terapéutico. Asumiendo esta condición, los efectos modestos de las terapias actuales sobre la pérdida de peso de la población en general podrían tener un mayor impacto en subpoblaciones homogéneas de sujetos obesos utilizando la medicina personalizada.

Este trabajo, realizado en la Unidad de Investigación Traslacional (UIT) del Hospital General Universitario de Ciudad Real (HGUCR), pretende avanzar en dicha dirección, mediante el abordaje de la participación de los mecanismos relacionados con la funcionalidad del sistema cerebral de refuerzo y recompensa en la obesidad mórbida, con el fin de proporcionar marcadores de vulnerabilidad y de respuesta al tratamiento que ayuden a refinar el diagnóstico de la enfermedad e individualizar la terapéutica pronosticando la respuesta al tratamiento quirúrgico.

Con éste objetivo, se definieron marcadores clínicos, bioquímicos y genéticos asociados a la obesidad mórbida, a la respuesta a la cirugía bariátrica y a un endofenotipo de adicción por la comida ligado a la obesidad. Se reclutó una cohorte de individuos normopesos y de pacientes obesos mórbidos que fueron sometidos a cirugía bariátrica por bypass gástrico en Y de Roux (BGYR) en el HGUCR y a los que se realizó un seguimiento 12 meses después de la cirugía. El endofenotipo adictivo fue determinado mediante un cuestionario validado que mide la dimensión de “pérdida de control” del ansia por la comida (*craving*). Adicionalmente se planteó la identificación de biomarcadores novedosos mediante técnicas proteómicas y metabolómicas.

Los pacientes del estudio exhibieron unas características similares a las de las poblaciones de otros trabajos y una respuesta adecuada a la cirugía tanto en términos de pérdida de peso como de control de la ingesta y de normalización de la mayoría de parámetros bioquímicos y hormonales. El estudio genético reveló que dos polimorfismos del gen FTO se encuentran presentes en mayor proporción en los pacientes obesos mórbidos que en los individuos normopesos, y se pudo observar por primera vez en este tipo de pacientes una evolución de los niveles de CART paralela a la de leptina e insulina, así como una reducción postquirúrgica de los niveles de BDNF.

Los pacientes con distinto nivel de *craving* por la comida mostraron diferencias notables en parámetros relacionados con el metabolismo de los hidratos de carbono, como son los niveles séricos de glucosa, HOMA-1 β y HOMA-2 β , además del neuropéptido BDNF, cuya disminución postquirúrgica sólo se observó en los individuos con alto *craving*, y grelina, cuyos niveles sólo se recuperaron en los pacientes con bajo *craving*. El estudio proteómico identificó un grupo de proteínas diferencialmente expresadas en pacientes obesos mórbidos cuyas concentraciones un año después de la intervención se equipararon a las concentraciones de los controles. Del mismo modo se identificó a las proteínas clusterina y componente amiloide P sérico como posibles biomarcadores de adicción a la comida, ya que se encontraron sobre-expresadas en pacientes obesos mórbidos con alto índice de *craving*.

El estudio metabólico reveló asimismo distintas familias de metabolitos en concentraciones diferentes en los individuos normopesos y obesos y en los individuos con alto y bajo *craving*. Entre estos últimos destacan algunos metabolitos originados por microorganismos intestinales, lo que sugiere que la pérdida de control sobre la ingesta está relacionada con la alteración de la microbiota.



SYNTHESIS OF MICROCAPSULES CONTAINING EXTRACTANT AGENTS FOR THE SELECTIVE REMOVAL OF HEAVY METALS FROM WASTEWATERS

Doctorando: Ángela Alcazar Román

Directores: Juan Fco. Rodríguez y Manuel Salvador Carmona

Esta tesis doctoral estudia la síntesis y caracterización de las denominadas microcápsulas complejantes, que consisten en la encapsulación de un agente de extracción dentro de una carcasa polimérica. Este material combinaría las ventajas de los métodos tradicionales, extracción con disolventes e intercambio iónico, empleados en la recuperación o eliminación de metales pesados de aguas contaminadas, solventando las desventajas que presentan ambas técnicas por separado.

Para ello, se sintetizaron microcápsulas que contenían diferentes agentes de extracción (MC-extractante) de diferente naturaleza química: ácido di(2-etilhexil)fosfórico (DEHPA), tributilfosfato (TBP), óxido de trioctilfosfina (TOPO) y cloruro de trioctilmetilamonio (TOMAC); mediante la técnica de polimerización en suspensión dentro de una carcasa de P(St-DVB).

Se estudió la influencia del tipo de diluyente y agentes de suspensión sobre las propiedades de estos materiales. Tras el proceso de optimización se obtuvieron valores superiores al 90 % para la conversión de los monómeros, rendimiento de la reacción y eficiencia de encapsulación. Respecto al tamaño y la morfología de estas microcápsulas, las MC-DEHPA, MC-TBP y MC-TOPO presentaron un tamaño de partícula en torno a las 300 μm , mientras que las MC-TOMAC mostraron un tamaño inferior a las 100 μm ; siendo todas ellas de forma esférica.

A partir de los estudios de equilibrio se comprobó que las MC-TBP y MC-TOPO solo extrajeron un 7 y 65 %, respectivamente; de hierro. Las MC-DEHPA no intercambiaron cobre hasta que la matriz polimérica fue sulfonada; ya que la incorporación de centros sulfónicos activos en la carcasa de las mismas convirtió su naturaleza hidrofóbica en una con carácter hidrofílico. No obstante, este proceso dio lugar a fisuras y/o roturas en el material así como a la pérdida de parte del DEHPA; hecho que fue caracterizado mediante un modelo teórico que tiene en cuenta los procesos difusivos y de reacción que tienen lugar durante la sulfonación.

Por último, se utilizó la ley de acción de masas para describir el comportamiento de las MC-DEHPA sulfonadas y de las MC-TOMAC, dando lugar a capacidades útiles de 1.782 eq kg^{-1} y 1.009 eq kg^{-1} , para el cobre y el mercurio, respectivamente. Asimismo, se utilizó un modelo homogéneo para determinar el coeficiente de distribución del cobre ($1.86 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$) y se regeneró el material tal y como se hace para las resinas de intercambio iónico. Por lo tanto, el empleo de estos materiales en la eliminación de metales pesados es completamente factible; incluso para el tratamiento de aguas naturales contaminadas con mercurio debido a las actividades mineras de Almadén (España) y Monte Amiata (Italia).



NUEVAS APLICACIONES ELECTROCATALÍTICAS PARA PROCESOS ENERGÉTICOS Y DE REMEDIACIÓN MEDIOAMBIENTAL

Doctorando: Nuria Gutiérrez Guerra

Directores: José Luis Valverde y Antonio de Lucas Consuegra

Este trabajo forma parte de un amplio programa de investigación sobre la aplicación de sistemas electrocatalíticos en procesos de interés energético y medioambiental que se viene desarrollando, durante los últimos años en el Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Castilla-La Mancha. En particular, esta Tesis Doctoral, financiada por ABENGOA Research, tiene como objetivo el uso de nuevos sistemas electrocatalíticos para la producción de hidrógeno e hidrocarburos y la valorización de CO_2 .

El modelo energético actual, basado en combustibles fósiles, presenta serios problemas de sostenibilidad. En primer lugar, por el agotamiento progresivo del petróleo y las sucesivas crisis que afectan periódicamente a su producción. En segundo lugar, por los impactos ambientales que se derivan del uso intensivo de los recursos energéticos fósiles. Por todo ello, resulta evidente la necesidad de buscar nuevas alternativas energéticas.

Así, el objetivo global del presente trabajo fue estudiar y explorar nuevas configuraciones electrocatalíticas, basadas tanto en reactores de membrana de electrolito sólido (SEMR) como en reactores electroquímicos de membrana polimérica (PEM) para la producción de hidrógeno y gas de síntesis así como para la valorización de CO_2 para obtener combustibles líquidos.

En primer lugar se ha estudiado la posibilidad de obtener gas de síntesis de razón variable a partir de la combinación de los procesos de electrólisis de vapor de agua y oxidación parcial de etanol. A continuación se utilizó un SEMR de doble cámara para llevar a cabo la producción y separación simultánea de H_2 e hidrocarburos C_2S , a partir de la alimentación de vapor de agua y metano. Continuando con los diversos métodos de producción de hidrógeno, se realizó un análisis energético para la producción de hidrógeno mediante dos métodos muy diferenciados: reformado catalítico de etanol y reformado electroquímico de etanol, demostrando que el proceso de reformado electroquímico de etanol presentó el menor consumo energético. A continuación, se estudió la aplicación del fenómeno de la promoción electroquímica de la catálisis (EPOC) en procesos de hidrogenación de CO_2 . Se pudo comprobar, como la selectividad y la actividad hacia CO y CH_4 podían ser controladas y modificadas mediante el efecto EPOC. Finalmente, se desarrolló un sistema para llevar a cabo la reducción electrocatalítica a baja temperatura del CO_2 en fase gas. Obteniéndose productos como gas de síntesis, metano, monóxido de carbono, metanol, acetaldehído, acetona, formato de metilo, etanol, 2-propanol y n-propanol que pueden actuar como vector energético.



ESTANCIA AMPARO SOTO

Soy Amparo Soto Manzano. Realicé la tesis doctoral en el departamento de Química-Física de la Facultad de Ciencias Ambientales y Bioquímica de Toledo. En la actualidad trabajo como personal contratado en el mismo departamento, pero en este caso en el Instituto de Investigación en Combustión y Contaminación atmosférica de la UCLM, situado en el Edificio Polivalente, Facultad de Medicina de Ciudad Real.

Mi grupo de investigación, llamado FOTOAIR, trabaja en el campo de la Química de la Atmósfera. Estudiamos la reactividad de reacciones de gran interés atmosférico, calculando constantes de velocidad de las mismas, analizamos de forma cualitativa y cuantitativa los productos generados en fase gas, y en la actualidad parte de nuestro esfuerzo lo estamos poniendo en el estudio de formación de aerosoles secundarios, que se forman a partir de reacciones con precursores gaseosos contaminantes, ya sean de origen natural o antropogénico.

Este último punto tiene un alto interés en la actualidad, ya que los efectos de la formación de estos aerosoles son de gran importancia por su impacto, por una parte en el clima ya que producen de una manera directa fenómenos de absorción y dispersión de la radiación solar e indirectamente funcionan como núcleos de condensación que modifican las propiedades radiativas y de persistencia de las nubes. Por otra parte, no debemos olvidar los efectos en la salud humana ya que aerosoles inferiores a 10 μm pueden ser fácilmente inhalados y por lo tanto son potencialmente dañinos para las funciones tanto pulmonar como cardiovascular.



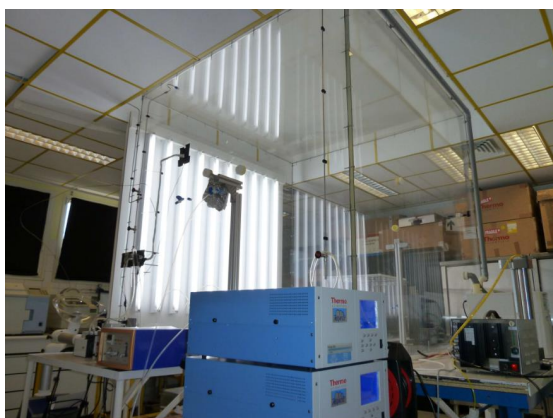
Así, al ser aún “principiantes” en el estudio de este tema, decidimos que realizara una estancia durante dos meses en un laboratorio que llevan unos años investigando sobre la generación de estos aerosoles. Este laboratorio es el Laboratoire de Physico-Chimie de l’Atmosphère, de la Universidad del Litoral Côte d’Opale. Situado en el pueblo costero de Wimereux, al norte de Francia, en la región de Nord Pas de Calais.

En este laboratorio trabajan, la responsable del mismo, la Doctora Cécile Coeur-Tourneur y el

técnico Thomas Fagniez. Está provisto de una cámara de simulación atmosférica de 8 m^3 de capacidad, donde se introducen en fase gas los compuestos objeto de estudio en condiciones atmosféricas de presión y temperatura, y donde se simula la radiación solar con unas lámparas que emiten a una radiación determinada. Además, posee los detectores necesarios para la experimentación sobre este tema.

Así, durante los dos meses me enseñaron el procedimiento en la experimentación sobre la generación de aerosoles, además de su forma de trabajar, realizando varios estudios con distintos compuestos de interés atmosférico.

Ahora aquí en España, ya nos queda poner en práctica todo lo aprendido y adaptar nuestro laboratorio lo más posible para llevar a cabo estas investigaciones.



Cámara de simulación del Laboratoire de Physico-Chimie de l’Atmosphère

Conferencia: "Continuum mathematics at the nanoscale"

Impartida por Tim Myers

La nanotecnología es un área interdisciplinar que está creciendo rápidamente. Los campos de biología y química, que estudian los niveles moleculares y atómicos, se han ocupado clásicamente de las cuestiones nano. Los físicos han ayudado en la observación, comprensión y manipulación de objetos a escala nano, mientras que los esfuerzos de ingenieros ha sido clave para la fabricación y el uso de dispositivos a esta escala. Sin embargo, muchos avances han sido el resultado de prueba y error porque todavía no existe un marco matemático, ni técnicas de solución apropiadas.

En esta charla vamos a describir una serie de proyectos llevados a cabo en el Centre de Recerca Matemàtica (CRM) donde los modelos matemáticos que se ha aplicado a los fenómenos de nanoescala:

1. Fusión de nanopartículas (NP). Es un área de investigación activa por su utilidad en nuevas aplicaciones relacionadas con aplicaciones térmicas, incluidos los sistemas de administración de fármacos, la memoria de cambio de fase y nanolitografía. Vamos a tratar un modelo matemático para fusión NP y demostrar que predice tiempos de fusión de órdenes de magnitud más rápidos que lo predicho por la teoría clásica.

2. Flujos de nanofluidos. Ha sido aclamado como un posible salvador en la búsqueda de mejorar la transferencia de calor que se requiere para los dispositivos electrónicos modernos. Existen numerosos experimentos que demuestran sus propiedades de transferencia de calor notablemente mejoradas. Sin embargo, hay mucha dispersión en los datos. En esta parte de la charla analizamos la transferencia de calor de un nanofluido utilizando quizás el modelo más popular en la literatura. Contrariamente al análisis original (pero de acuerdo con algunos experimentos recientes) nos muestran que el modelo realmente predice una disminución de la transferencia de calor.

3. Flujo mejorado en los nanotubos de carbono. Una propiedad inusual de los nanotubos de carbono es que los flujos de líquidos se han reportado hasta cinco órdenes de magnitud más rápido que lo predicho por las teorías clásicas. Vamos a describir un modelo para el flujo de fluido en un CNT y mostrar que el límite teórico está más cerca de 50 veces el valor clásico. Este resultado está en consonancia con los últimos trabajos de dinámica experimentales y moleculares.

Conferencia: "Autenticación y calidad del aceite de oliva: situación actual y retos."

Impartida por Diego Luis González

El aceite de oliva, y muy especialmente el aceite de oliva virgen, es de los aceites comestibles más apreciados por los consumidores debido a sus propiedades saludables y organolépticas. De esta forma, el aceite de oliva, en todas sus categorías, es más caro que otros aceites comestibles y es susceptible de ser adulterado. Por esa razón, la investigación en el ámbito de la autenticidad del aceite de oliva ha sido muy intensa, y ha tenido impacto en una regulación que es de las más estrictas en los productos alimentarios y que garantiza que el aceite llegue al consumidor con la genuinidad y propiedades que se le presuponen. Esta investigación ha dado lugar a un número elevado de métodos oficiales, en general basado en principios cromatográficos, que hoy en día están en continua fase de revisión crítica por parte de los organismos reguladores. Entre estos organismos destacan en primer lugar el Consejo Oleícola Internacional y la Unión Europea, si bien otros organismos internacionales o nacionales tienen también influencia en los foros científicos (Codex Alimentarius Commission, Association of Official Analytical Chemistry-AOAC, American Oils Chemists' Society-AOCS, International Union of Pure and Applied Chemistry -IUPAC, German Society for Fat Science-DGF, etc). No obstante, y a pesar del conocimiento elevado que existe de su composición química, todavía existen retos a los que la comunidad científica debe enfrentarse. Estos están relacionados con la evolución del concepto actual de calidad y seguridad alimentaria que exige que un producto cumpla todas las expectativas, explícitas e implícitas. Este concepto complejo puede definirse con el término de "integridad de alimentos", que implica incluso anticiparse a posibles problemas de seguridad o calidad que pudieran ocurrir. Con este principio, la investigación actual persigue autenticar el aceite de oliva teniendo en cuenta diferentes problemas generales: (1) mezclas entre diferentes categorías de aceite de oliva, (2) mezclas de aceite de oliva con otro aceite comestible, (3) detección en la falsificación de algún aspecto declarado, como identificación geográfica, o autenticación de denominaciones de origen protegidas. Estos trabajos de investigación vienen marcados por una serie de circunstancias actuales como la revolución de nuevas prácticas agrícolas (producción intensiva o superintensiva), cambios en las variedades locales o autóctonas e introducción de variedades nuevas, y sobre todo la producción de aceite de oliva en zonas muy alejadas de la cuenca mediterránea (Australia, Argentina, Chile, etc.), en los que se producen cambios notables en la composición química que hay que considerar. A todo esto hay que sumar la demanda actual hacia métodos rápidos y con menor consumo de tiempo y disolventes, como es el caso de los métodos espectroscópicos.



Autenticación y calidad del aceite de oliva: situación actual y retos.

Importancia de las propiedades del aceite y susceptibilidad de ser adulterado. Autenticidad del aceite de oliva. Nuevos retos para el futuro para proteger un producto que sigue constituyendo un patrimonio cultural.

Instituto Regional de Investigación Científica Aplicada (IRICA)

En el marco de las actividades formativas del Máster universitario en Innovación y Desarrollo de Alimentos de Calidad.

Conferencia a cargo de: **D. Diego Luis García González**
Instituto de la Grasa (CSIC), Sevilla

Jueves, 10 de diciembre de 2015, a las 12:10 h en el Salón de Actos de la Facultad de Ciencia y Tecnología Químicas.

Conferencia: "Diseño y síntesis de ligandos y complejos de Ni, Al y B para activación de moléculas pequeñas "

Impartida por Rene Rojas

El diseño y síntesis de compuestos orgánicos que contengan en sus estructura grupos funcionales (a lo menos dos) como OH, NH, C=O, C=N, etc. en disposiciones espaciales adecuadas para coordinar un metal, constituye una de los principales estrategias para acceder a compuestos organometalicos y de coordinación capaces de catalizar, en algunos casos selectivamente, procesos para activar y transformar moléculas pequeñas, como CO₂, CO, H₂, Etileno, etc. en nuevos compuestos o materiales con aplicaciones específicas.

En esta presentación mostrare los resultados de investigaciones realizadas en los últimos años en mi grupo de trabajo, sobre complejos de níquel II, con ligandos bidentados, capaces de activar o transformar etileno en oligomeros y también polímeros de peso molecular y tipo de ramificación controlada.

Los estudios de oligomerizacion dan cuenta sistemas catalíticos capaces de oligomerizar selectivamente etileno a 1-bueno e isomerizar alfa olefinas a olefinas internas. En estos estudios, el foco ha estado centrado en entender los mecanismos de reacción mediante reacciones in situ, el empleo de técnicas y herramientas menos convencionales, como por ejemplo ESI-MS, reacciones a escala de RMN o reacciones en reactor en medio marcados isotopicamente. Basado en estos resultados , el rediseño de los catalizadores permite el acceso a nuevos sistemas para generan materias primas útiles en la fabricación de shampoo, detergentes y el acceso a ceras, plastificantes, plásticos de variadas propiedades que permite reducir los requerimientos de materiales como madera y metales.

Adicionalmente la utilización de este tipo de ligandos con precursores de B y Al, nos permiten acceder a nuevos compuestos capaces de activar moléculas pequeñas como CO, H₂ y e-caporlactona y contar con sistemas simples para transformar y producir nuevos materias. El potencial de estos desarrollos en la transformación de moléculas comunes y no deseadas como CO, CO₂, es sin duda uno de los principales atractivos de este tipo de trabajos y la discusión adecuada permitirá acelerar estos desarrollos que impactan positivamente a la sociedad.

Conferencia: "Química en flujo como una nueva herramienta para el descubrimiento de nuevos fármacos"

Impartida por Jesús Manuel Alcázar Vaca

La conferencia versó sobre su labor investigadora en JANSSEN y fundamentalmente sobre la introducción de la metodología de Química en flujo en la investigación en la investigación farmacéutica. La química en flujo implica nuevos conceptos en relación a la química en "batch". Es una técnica que puede usarse para la optimización, síntesis y escalado de reacciones químicas.

Para la industria farmacéutica la química en flujo tiene numerosas ventajas, la primera es la posibilidad de escalado sin necesidad de reoptimización de las condiciones de reacción, lo que implica que puede utilizarse el mismo procedimiento desde la escala de laboratorio hasta la escala necesaria para los primeros ensayos clínicos.

Otras ventajas de la técnica pueden resumirse en:

- Pueden realizarse varias etapas de síntesis en secuencia continua.
- Puede usarse reactivos inmovilizados.
- Pueden utilizarse con facilidad reactivos gaseosos.
- Pueden utilizarse reactivos peligrosos con seguridad debido al menor volumen de reacción.
- Facilita el acoplamiento con otras técnicas no convencionales, como ultrasonidos, fotoquímica, electroquímica...

En el próximo número de Molécula...

En el próximo número incluiremos nuestras secciones habituales de investigación, Tesis doctorales, conferencias, estancias, investigadores INCRECYT. Asimismo, artículos sobre prevención de riesgos laborales y de la unidad de servicios del rectorado y la Olimpiada de Química.