



REVISTA

Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas

<https://moleculauclm.wordpress.com>

MOLÉCULA

Día de la mujer

Premios JCCM y reconocimientos

Olimpiada Química 2023

Tesis doctorales y publicaciones

Nº 175 Época III
Marzo 2023

Presentación	P. 2
Mesa redonda 8M	P. 3
Premios JCCM	P. 4
ERC para Carlos Romero	P. 8
Olimpiada Química	P. 10
Tesis doctorales	P. 12
Taller ChatGPT	P. 14
Concurso Promols	P. 15
Publicaciones	P. 17
Próximo número de Molécula	P. 18

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

PRESENTACIÓN

En el número de Marzo se han recogido las noticias más relevantes para nuestra Facultad en las últimas semanas. Incluye la mesa redonda celebrada el día 8 de Marzo con motivo del día de la mujer, los distintos premios otorgados por el gobierno regional a 13 investigadoras e investigadores de la UCLM, un artículo sobre la concesión de un proyecto en la convocatoria ERC para Carlos Romero, resúmenes de las Olimpiadas de Química y el taller sobre el ChatGPT, así como una nueva participación en el concurso PROMOLS. Además, se incluyen las secciones de tesis doctorales defendidas y artículos publicados por nuestros compañeros, entre otras noticias.

El comité editorial.

Mesa redonda sobre la situación de la mujer en distintos rincones del mundo



Participantes presenciales en la mesa redonda celebrada en el salón de actos Ernesto Martínez Ataz

El día 8 de marzo, con motivo del Día Internacional de la Mujer y organizado por la Comisión de Igualdad de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas, se celebró en el salón de actos Ernesto Martínez Ataz una mesa redonda titulada “Situación de la mujer en distintos rincones del mundo. Perspectivas de estudiantes universitarias”.

En ella participaron la estudiante de Grado de Química, OLGA FERNÁNDEZ NÚÑEZ (España), la estudiante del Máster Universitario en Innovación y Desarrollo de Alimentos de Calidad, ENAURIS R. MATEO LUCIANO (Ecuador), la estudiante predoctoral en Ingeniería Química, ANDREA N. ARIAS SÁNCHEZ (Ecuador) así como la estudiante postdoctoral en Ingeniería Química, GÉSSICA DE OLIVIERA SANTIAGO SANTOS (Brasil). Participó así mismo en modalidad *on-line* una estudiante iraní, actualmente en el País Vasco. Actuó de moderadora la presidenta de la Comisión de igualdad, Blanca R. Manzano.

Hubo público tanto presencial como *on-line*. Tras una breve presentación de las participantes, cada una de ellas expuso de forma sucinta la situación de la mujer en su país, con especial énfasis en la situación en la Universidad. Se destacó la existencia de situaciones claras de desigualdad, pero con una notable diferencia entre los distintos países. La situación de la mujer migrante también fue abordada. A continuación, tuvo lugar un interesante debate con preguntas tanto de las personas participantes *on-line* como de modo presencial.

La UCLM recibe más de una decena de galardones en los Premios de Investigación e Innovación de Castilla-La Mancha 2022



Entregados por el Gobierno regional a investigadoras e investigadores y personal de la institución académica

Un total de 13 investigadoras e investigadores y personal de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) han sido galardonados en diferentes categorías en los Premios de Investigación e Innovación de Castilla-La Mancha 2022 del Gobierno regional, cuyo acto de entrega se celebró el día 6 de marzo en el Campus de Albacete con la presencia del rector de la UCLM, Julián Garde, y del presidente de Castilla-La Mancha, Emiliano García-Page, entre otras autoridades.

El salón de actos del edificio Polivalente del Campus de Albacete acogió el día 6 de marzo el acto de entrega de los Premios de Investigación e Innovación de Castilla-La Mancha 2022, con los que el Gobierno regional reconoce y premia el esfuerzo, la calidad y la excelencia en el ámbito de la investigación y la actividad científica. Durante la ceremonia intervino el rector de la UCLM, Julián Garde; el presidente de Castilla-La Mancha, Emiliano García Page; la consejera de Educación, Cultura y Deporte Rosa Ana Rodríguez; el alcalde de Albacete, Emilio Sáez; y el presidente de la Diputación Provincial de Albacete, Santiago Cabañero.

En su discurso, el rector se mostró agradecido porque esta entrega tuviera lugar en la Universidad, a la vez que dijo sentirse orgulloso por todas las personas que han recibido estos galardones. Garde recordó que la UCLM consiguió en 2022 más de 56 millones de euros de fondos para investigación, además de otros cerca de once millones de euros propios para el plan propio de investigación.

El rector indicó que la captación de los fondos externos “es mérito de los grupos de investigación de la UCLM y la gestión es mérito del personal de administración y servicios”, por lo que añadió, que ha sido “un acierto incluir en estos premios esta categoría”. En este punto, el rector recordó emocionado el trabajo de gestión llevado a cabo por la compañera Santiaga Gutiérrez Casanova. “Una parte importante de estos premios se la debemos a Santi por la dedicación durante más de 20 años a la gestión de la investigación en nuestra universidad.”, dijo.

Por su parte, el presidente de Castilla-La Mancha, hizo extensiva también su felicitación a todos los premiados, destacando la importancia que este acto tiene para la sociedad. García-Page habló de investigación y dijo que ésta es determinante para España. En este sentido, recordó lo que supuso la investigación en la pandemia y el hallazgo de las diferentes vacunas.

Estos premios, como dijo, tienen que ser útiles para demostrar a la gente lo que hay que combatir como el debate pernicioso de confundir el coste con el precio, el cortoplacismo, y subrayó la importancia de acabar lo que se empieza. Para finalizar, quiso lanzar un mensaje a los premiados de perseverancia en el trabajo que llevan a cabo.

Premiadas y premiados

La Universidad de Castilla-La Mancha ha recibido un total de 13 galardones, establecidos en diferentes categorías, para sus investigadoras, investigadores y personal de la institución académica.

Trayectoria investigadora e Innovación

Mario Gerardo Piattini Velthuis, doctor en informática en 1994 y catedrático de Lenguajes y Sistemas Informáticos de la UCLM desde 2002. Es director y fundador del Grupo de Investigación Alarcos, especializado en la calidad de los sistemas de información.

Durante su trayectoria ha sido galardonado con numerosos premios, el más reciente el premio nacional 'Profesional, ingeniero informático' en la primera convocatoria de los premios del Consejo General de Colegios Profesionales de Ingeniería en Informática de España; el Premio Gabriel Alonso Herrera a la trayectoria profesional, de la Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha o el Premio Aritmel al Investigador, de la Sociedad Científica Informática de España (SCIE).

Desde el año 2008, y prácticamente de manera consecutiva, viene apareciendo entre los 15 o 20 mejores investigadores del mundo en el ámbito de la ingeniería del software.

En esta categoría se ha premiado también a M^a de los Llanos Palop Herreros, catedrática de la Facultad de Ciencias Ambientales y Bioquímica de la UCLM. Licenciada en Farmacia, Palop Herreros, imparte clases de Microbiología en la Facultad de Ciencias Ambientales y Bioquímica de Toledo. Ha participado en cinco proyectos de innovación docente; responsable de la línea de investigación: productos lácteos/bacterias lácticas, así como coinventora de varias patentes, alguna de ellas en explotación.

Investigación e Innovación

En la presente categoría, han sido premiados: Paulino Capdepon Verdú (Arte y Humanidades), catedrático de Historia de la Música de la UCLM y director del Centro de Investigación y Documentación Musical de Castilla-La Mancha. Unidad Asociada al CSIC.

Capdepon Verdú ha publicado 40 libros y capítulos de libro, y más de 200 artículos en español, inglés, alemán y francés, y ha llevado a cabo más de 70 proyectos de investigación. Cuenta con diez premios, entre los que destaca el "VI Premio de investigación musical Orfeón Donostiarra-Universidad del País Vasco" (2006) o el "XX Premio de Historia Jiménez de Gregorio" (Talavera, 2011).

En 2007 fue elegido Académico de la Real Academia de Doctores y en 2008 Académico de la Real Academia de la Historia.

Ester Vázquez Fernández-Pacheco (Ciencias), profesora de Química Orgánica y directora del Instituto Regional de Investigación Científica Aplicada (IRICA) de la UCLM. Dirige el grupo interdisciplinar "MSOC-Nanochemistry", centrado en la preparación de nanomateriales utilizando procesos sostenibles. Ha producido trabajos de transferencia con siete patentes y participado en numerosos proyectos, destacando el prestigioso europeo Graphene Flagship. Además, es cofundadora de la Spin-off Biograph Solutions.

Vicente Martínez Vizcaíno (Ciencias de la Salud), catedrático y director del Programa de

Doctorado en Investigación Sociosanitaria y de la Actividad Física de la UCLM. Bajo su tutela, se han desarrollado durante 2020/21, ocho contratos FPU/FPI y becas de iniciación a la investigación, así como un técnico MINECO. Además, han conseguido 298.200 euros en proyectos de financiación competitiva durante 2018 y 2021.

Por otra parte, es consejero delegado de la Spin-Off MOVIFITNESS y director del Centro de Estudios Sociosanitarios, desde el que se ha coordinado el proyecto MOVI un programa de actividad física escolar para mejorar el perfil cardiovascular de los niños.

Por último, Daniel Balsalobre Lorente (Ciencias Sociales y Jurídicas), doctor en Ciencias Económicas por la UCLM y profesor titular de la Facultad de Ciencias Sociales del Campus de Cuenca. Su trabajo de investigación se centra en ámbitos como regulación y economía energéticas, así como en fiscalidad internacional y economía medioambiental. Es autor y editor en numerosas revistas de prestigio internacional indexadas en Scopus y Web of Science (JCR), y ha sido seleccionado como uno de los mejores investigadores a nivel mundial, junto a otros 45 compañeros de la Universidad regional, en el prestigioso ranking de la Universidad de Stanford.

Investigación e Innovación joven

José Manuel López Torán (Artes y Humanidades), doctor en Historia Contemporánea y Profesor en UCLM. Es autor de diversos libros y capítulos de libro, habiendo participado en proyectos a través del grupo: Confluencias. Grupo de investigación del Centro de Estudios de Castilla-La Mancha. También ha participado en diversos congresos internacionales.

Carlos Romero Nieto (Ciencias), profesor de la Facultad de Farmacia de la UCLM. Comenzó su trayectoria como investigador postdoctoral en la Universidad de Erlangen-Nuremberg. 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.

En la actualidad dirige un equipo de investigación internacional en el que están representadas cuatro nacionalidades. Ha sido galardonado con numerosos premios: 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.

En este año, ha logrado un proyecto en la convocatoria 'ERC Consolidator', del programa Horizonte Europa, la más competitiva y de mayor excelencia de la Unión Europea para investigadores de primer nivel, cuyo presupuesto asciende a dos millones de euros, supone la primera financiación de esta modalidad en la historia de la UCLM.

Dolores Utrilla Fernández Bermejo (Ciencias Sociales y Jurídicas), doctora en Derecho por la UCLM. Cuenta con 12 años de experiencia docente e investigadora en la institución académica, habiendo desarrollado una intensa actividad de investigación centrada en varios segmentos centrales del Derecho público (constitucional y administrativo) español, europeo y comparado.

La premiada, ha publicado varios libros y numerosos artículos y capítulos de libros. También se ha integrado en numerosos proyectos, equipos y redes de investigación, tanto a nivel nacional como europeo.

Por último en esta categoría, Cristina Sáez Jiménez (Ingeniería y Arquitectura), catedrática en Ingeniería Química de la UCLM. Su actividad investigadora la desarrolla en el Laboratorio de Ingeniería de Electroquímica y Medioambiental, perteneciente al grupo de investigación TEQUIMA de la UCLM, y está centrada en el desarrollo de Aplicaciones Medioambientales de la Ingeniería Electroquímica, con especial interés en potenciar la transferencia de conocimientos al sector industrial y sociedad.

Ha participado en más de proyectos competitivos, dirigiendo algunos de carácter regional, nacional, europeo y de infraestructuras. Su labor investigadora ha sido reconocida mediante la concesión del premio internacional 'ISE Prize for the environmental Electrochemistry' para jóvenes científicos, además de generar numerosos resultados de transferencia con cuatro patentes y más de 30 informes para empresa.

Mujer investigadora

La premiada ha sido M^a del Rocío Fernandez Santos, licenciada en Biología, doctora y profesora titular de la UCLM y decana de la Facultad de Farmacia. Su actividad investigadora se ha centrado en diversos aspectos relacionados con la fisiología reproductiva de distintas especies animales.

Desde hace años forma parte del grupo consolidado SaBio de la UCLM, habiendo participado en más de 12 proyectos de investigación, regionales, nacionales e internacionales, siendo investigadora principal en nueve de ellos.

Destacar su participación en el proyecto de divulgación científica POWER ON con la obra de teatro 'Científicas. Pasado, presente y futuro. UCLM', con la que se pretende visibilizar a las mujeres científicas del pasado y del presente para motivar a las científicas del futuro.

Grupo de Investigación

Grupo de Investigación Sanidad y Biotecnología (SaBio) del IREC, constituido en verano de 2013. El Grupo es uno de los principales referentes europeos en la investigación transdisciplinar entre ecología y sanidad animal, contribuyendo a que la UCLM figure desde 2018 entre las 50 mejores universidades del mundo en el área de ciencias veterinarias.

En relación con la sanidad animal y humana, las dos principales líneas de trabajo se centran en la epidemiología y el control de las infecciones compartidas con la fauna silvestre, así como en el desarrollo de vacunas.

Personal de Administración y Servicios

Antonio Alfaro Fernández, director del Área de Investigación y Departamentos donde coordina las distintas estructuras que gestionan la investigación e innovación de la UCLM.

Durante estos años, Alfaro ha participado de forma activa y directa en la implantación y desarrollo del Plan Propio de I+D+i de la UCLM, así como en el diseño, publicación y gestión de diversas convocatorias y, en otro ámbito de actividades, en la actualización de normativas.

Gabinete de Comunicación UCLM. Albacete, 7 de marzo de 2023

El profesor Carlos Romero Nieto logra por primera vez en la UCLM un proyecto de dos millones de euros en la convocatoria de mayor excelencia de la Unión Europea



Carlos Romero Nieto en el laboratorio

El profesor de la Facultad de Farmacia de la Universidad de Castilla-La Mancha -UCLM- Carlos Romero Nieto ha logrado un proyecto en la convocatoria "ERC Consolidator", del programa Horizonte Europa, la más competitiva y de mayor excelencia de la Unión Europea para investigadores de primer nivel. El proyecto concedido, cuyo presupuesto asciende a dos millones de euros, supone la primera financiación de esta modalidad en la historia de la UCLM, y permitirá la fabricación y aplicación de nuevos materiales basados en el elemento de fósforo para el desarrollo de nuevas tecnologías ópticas.

El proyecto conseguido por el investigador Carlos Romero Nieto representa la primera financiación de esta modalidad que logra la UCLM a lo largo de su historia. Con esta cuantía, el grupo de investigación que dirige el profesor estudiará en los próximos cinco años la fabricación y aplicación de nuevos materiales basados en el elemento de fósforo para el desarrollo de nuevas tecnologías ópticas "que permitan la detección de una amplia variedad de biomoléculas humanas como, por ejemplo, las relacionadas con la hipertensión y otras enfermedades de gran relevancia médica. Este proyecto supondrá un gran impulso para la ciencia desarrollada en la Universidad regional, así como una fuente económica importante para la contratación de personal investigador", como indica.

Carlos Romero Nieto, natural de Socuéllamos, se ha mostrado emocionado por este logro y ha agradecido a su familia el apoyo incondicional recibido durante toda su carrera científica; a los docentes del colegio Gerardo Martínez y del instituto Fernando de Mena de Socuéllamos, así como a los de la UCLM, "que han contribuido a mi formación tanto personal como académica", señala. De la misma forma, ha querido agradecer a todas las personas investigadoras y mentores que han contribuido al éxito de este proyecto, al igual que a los equipos rectorales con los que ha trabajado, especialmente al actual rector, Julián Garde, tanto por apostar por su incorporación a la Universidad regional desde el primer momento cuando era vicerrector de Investigación, como por el apoyo recibido durante su carrera científica. "Este logro no solo representa el éxito de un proyecto científico y una carrera investigadora, sino que además representa el mensaje de que sí es posible. Es posible comenzar en un pueblo castellanomanchego a formarse para ir progresivamente alcanzando cualquier cosa que uno se proponga, en este caso, lograr el más alto nivel científico internacional".

La financiación del proyecto conseguido es altamente competitiva, en la que participan anualmente científicos de toda Europa. En la convocatoria de 2022 se presentaron más de 2222 solicitudes de proyectos, financiándose solo 321 de ellas (14%), de las que, entre todas las disciplinas, únicamente 24 fueron otorgadas a investigadores españoles. Este tipo de programa es único en el mundo dado que no existe el equivalente en ningún otro continente.

CONVOCATORIA ERC

El sistema de evaluación de las propuestas presentadas a las convocatorias del ERC (European Research Council) pasa por un proceso estricto estructurado en dos fases: evaluación del proyecto de investigación y de la carrera científica del investigador por más de diez expertos internacionales, y una entrevista final ante un comité de quince expertos de la Unión Europea. Finalmente, los proyectos son clasificados por orden de excelencia, financiándose solo aquellos que logran una mayor puntuación.

Carlos Romero es doctor en Química Orgánica por la UCLM, a la que se reincorporó en 2018 con un contrato del prestigioso programa estatal Ramón y Cajal. Ha publicado más de 55 artículos en revistas científicas de alto nivel, de los cuales 18 han aparecido en portada. Desde que comenzó con su grupo de investigación en la Universidad de Heidelberg (Alemania) en 2013 ha supervisado a 50 investigadores y ha dirigido once proyectos de investigación con financiación tanto regional como nacional e internacional. Ha presentado la ciencia de su grupo de investigación en más de 50 conferencias científicas e impartido 25 seminarios en algunas de las universidades más prestigiosas de los 4 continentes como son las universidades de Berkeley (USA), Alberta (Canada), Kyoto (Japón), Auckland (Nueva Zelanda), Imperial College (UK), etc.

En 2022, el doctor Romero Nieto fue profesor invitado en la Universidad de Berkeley, cuya facultad de química ocupa el primer puesto en el ranking mundial. Ha sido galardonado en 2016 con el prestigioso Premio Hengstberger para Jóvenes Investigadores, por la Universidad de Heidelberg; en 2018 con el Premio Nacional para Jóvenes Investigadores, de la Real Sociedad Española de Química (RSEQ); en 2020 con el Premio para Jóvenes Investigadores, de la RSEQ de CLM y en 2021 con el Premio Fellow de la Asociación Internacional de Materiales Avanzados de Suecia. En 2019, con una segunda tesis, fue el primer químico español en obtener la habilitación alemana por la Universidad de Heidelberg (Venia Legendi) en 634 años de historia de la universidad.

Gabinete de Comunicación UCLM. Albacete, 1 de febrero de 2023

Fase regional de la Olimpiada de Química



El pasado 28 de febrero se celebró la Fase Regional de la Olimpiada de Química 2023 en diferentes campus de la UCLM y en el campus de la Universidad de Alcalá de Henares (Guadalajara). En concreto, la prueba tuvo lugar en los siguientes centros:

- Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas (Ciudad Real)
- Facultad de Ciencias Ambientales y Bioquímica (Toledo)
- Facultad de Farmacia (Albacete)
- Facultad de Educación (Cuenca)
- Facultad de Educación (Guadalajara)

El examen constaba de una parte de problemas y otras de tipo test y tuvo 2 horas de duración. Tras acabar la prueba se ofreció una merienda a todos los participantes y se hizo entrega de unos regalos. Esta edición ha contado con la participación de 75 alumnos de diferentes centros de educación secundaria de la región. Los tres primeros clasificados han sido:

- Primer Clasificado: José Manuel Hernández Pérez (IES Lazarillo de Tormes, Escalona, Toledo.)
- Segundo Clasificado: Daniel Ortigado (IES Salesianos de Guadalajara).
- Tercer Clasificado: Ángela Calderero Guerra (IES Lazarillo de Tormes, Escalona, Toledo).

OLIMPIADA QUÍMICA

Los primeros clasificados por provincias fueron:

- Luis Rodríguez López (Albacete).
- Rodrigo Criado López-Prado (Ciudad Real).
- Carla Cantero Carretero (Cuenca).
- Daniel Ortigado (Guadalajara).
- José Manuel Hernández Pérez (Toledo).



Estudio del material particulado atmosférico PM₁₀ y hollín: caracterización de la fracción orgánica soluble, identificación de las fuentes y evaluación del riesgo para la salud



Doctorando: Sonia Lara Gómez

Directores: Dra. María del Pilar Martín Porrero, Dra. Florentina Villanueva García y Dr. Andrés Moreno Moreno

Departamento de Química Física e Instituto de Investigación en Combustión y Contaminación Atmosférica (ICCA)

El material particulado (PM) atmosférico es cualquier sustancia a excepción del agua pura, presente en la atmósfera en estado sólido o líquido. Presenta diferentes diámetros clasificados como “partículas finas” o PM_{2.5} (diámetro $\leq 2.5 \mu\text{m}$) y “partículas gruesas” entre las que se encuentran las PM₁₀ (diámetro $\leq 10 \mu\text{m}$). Es considerado uno de los principales contaminantes por los efectos que provoca sobre el cambio climático a escala global, el deterioro de la calidad del aire a escala local y el efecto pernicioso sobre la salud humana. Se encuentra presente en la atmósfera por emisiones directas, tanto naturales como antropogénicas, o formados en la atmósfera por procesos de conversión de gas a partícula. Las principales fuentes de emisión que elevan las cantidades de material particulado en la atmósfera son las procedentes de emisiones antropogénicas como los procesos de combustión del tráfico, sistemas de calefacción y quema de biomasa que se dan en zonas industrializadas y residenciales. La materia particulada que emerge de estos procesos es el denominado hollín. Este material particulado también se ha encontrado en ambientes interiores y a elevadas concentraciones, debido a las actividades desarrolladas en estos ambientes por los ocupantes.

El efecto nocivo que presenta el material particulado atmosférico sobre la salud radica en que éste presenta una fracción orgánica soluble (SOF) adsorbida formada por multitud de compuestos (carbonilos, aldehídos, hidrocarburos alifáticos (AH) como alcanos, alquenos entre otros y los compuestos aromáticos policíclicos (PACs)). Estos últimos son de alto interés y preocupación ya que son clasificados como cancerígenos y mutagénicos. Sin embargo, los hidrocarburos alifáticos son también importantes por su implicación en la formación de aerosoles orgánicos secundarios (SOA) que a su vez están implicados en el cambio climático.

Así, en esta tesis, con el fin de comprender los efectos de la contaminación por los compuestos asociados a las partículas y presentes en la SOF, tales como los hidrocarburos aromáticos policíclicos (PAHs) y sus derivados, los hidrocarburos aromáticos policíclicos nitrados (NPAHs) y los hidrocarburos aromáticos policíclicos oxigenados (OPAHs), hidrocarburos alifáticos (alcanos, alcanos ramificados y cicloalcanos) y ácidos alcanóicos, se ha estudiado el material particulado PM₁₀ de un área urbana

(Ciudad Real), un área industrial (Puertollano) y el aire interior de viviendas y locales situados en Ciudad Real. También se ha caracterizado la SOF de diferentes tipos de hollines (diésel y biodiésel) generados a partir de la combustión en motores diésel. Para la determinación de los compuestos se ha desarrollado, optimizado y validado una metodología analítica que consiste en la extracción con microondas (MAE) y ultrasonidos de las especies del PM_{10} y posterior análisis mediante GC-MS/MS como técnica de separación y detección de compuestos. Además, se han empleado otras técnicas menos convencionales durante una estancia de tres meses en el grupo de investigación ANATRAC (*Analysis of Traces*) del Centro de Estudios de Investigaciones Láseres y Aplicaciones (CERLA, *Centré d'Etudes et de Recherches Lasers et Applications*) de la Facultad de Ciencias y Tecnologías de la Universidad de Lille (Francia) como son las de desorción láser (L2MS, *two-step laser mass spectrometry*, HR-LMS, *high-resolution laser mass spectrometry*, HR-L2MS, *high-resolution two-step laser mass spectrometry*) y de iones secundarios (SIMS, *secondary ion mass spectrometry*) acoplados a un sistema de detección de iones por tiempo de vuelo (ToF) para confirmar o complementar la caracterización. Entre las ventajas de estas técnicas destaca la pequeña cantidad de muestra que se requiere y la baja manipulación de esta.

Se han empleado herramientas estadísticas para identificar el comportamiento atmosférico y procedencias del PM_{10} , así como de sus compuestos adsorbidos y para diferenciar entre la composición de los diferentes hollines evaluando la influencia de los parámetros de generación, recolección y diferentes combustibles.

Este estudio demuestra que la calidad del aire en las zonas muestreadas es buena, siendo los riesgos para la salud bajos. La procedencia principal de los PACs son los procesos de combustión como los sistemas de calefacción y el tráfico rodado. El estudio de la composición de PACs en hollines confirma que la fuente origen de los PACs encontrados en el aire ambiente exterior es la combustión de combustibles fósiles. En las partículas de hollín, la composición de la SOF respecto a los PACs y su interacción con el material particulado tienen una fuerte dependencia con las condiciones de recolección, los parámetros de conducción y sistemas post-tratamiento que presenta el motor y el tipo de combustible utilizado. En el área industrial, el complejo petroquímico no ha influido en la concentración de PACs presente en el PM_{10} durante el tiempo de muestreo. Las fuentes de los AH en esta zona son antropogénicas; emisiones procedentes de la industria petroquímica, tráfico (combustible sin quemar o aceite lubricante) y calefacciones, pero también biogénicas procedentes de las plantas. Por otro lado, el estudio de los PACs y AH identificados y cuantificados en el aire interior demuestra que estos ambientes están influenciados por el aire exterior para los primeros y por fuentes endógenas para los segundos.

La presente tesis doctoral se enmarca en dos líneas de investigación presentes en el Instituto de Investigación en Combustión y Contaminación Atmosférica (ICCA): Contaminación Atmosférica y estudio de procesos de combustión: análisis de la composición de las emisiones de diferentes (bio)combustibles, especialmente en la caracterización química de las partículas de hollín y en el estudio de las emisiones producidas por biocombustibles que se obtienen a partir de la revalorización de residuos agroalimentarios, desarrolladas en el grupo de investigación de Química y Contaminación Atmosférica (QyCA) de la Universidad de Castilla La Mancha.

Taller sobre las implicaciones de la Inteligencia Artificial (ChatGPT)

En el taller celebrado el 23 de febrero en la Facultad, se han expuesto y discutido las implicaciones de la Inteligencia artificial (IA), en el mundo de la educación universitaria. Se ha contado con Jesús Salido Tercero, profesor Titular Profesor del Depto. de Ingeniería Eléctrica, Electrónica, Automática y Comunicaciones (Área de Ing. de Sistemas y Automática) de la E. S. de Informática de la UCLM.

El mensaje que se ha transmitido es que los modelos de Inteligencia Artificial (IA) que generan lenguaje natural y se aplican en los "bots" conversacionales, como ChatGPT, están demostrando una calidad notable en su capacidad para recuperar información, reescribir, resumir y traducir textos. Estas herramientas emergentes tienen un gran potencial para ser utilizadas en numerosas áreas de la actividad humana, y en particular, su aplicación en el ámbito educativo puede fomentar aspectos como la creatividad, el pensamiento crítico, la toma de decisiones y la personalización de la enseñanza (p.ej., "virtual tutoring", "peer-instruction", autoevaluación, etc.). Sin embargo, es importante ser conscientes de los riesgos que su abuso y uso deshonesto pueden acarrear, como la suplantación de autoría y la dependencia tecnológica.

Por lo tanto, su uso requiere de un replanteamiento de los procesos de enseñanza/aprendizaje y de evaluación de resultados. Sin duda estamos ante una "revolución", sin precedentes en la historia contemporánea gracias a los avances en IA, para la que debemos prepararnos con serenidad y entusiasmo para aprovechar todo el potencial de esta herramienta emergente en la mejora de la calidad de la educación y en la promoción del aprendizaje personalizado.

Lo que no te mata, te hace más fuerte.

Ana Cabañero Recuero, alumna del máster de Ingeniería Química

Aunque a veces nos pueda parecer incierto, dicen que “del amor al odio sólo hay un paso” pero, ¿y si pudiéramos decir que de un veneno a un fármaco sólo hay una modificación molecular? Sería aún más increíble y, el ejemplo de que es posible, se traduce en la molécula apodada “MiniCTX3”.

Esta molécula surge como acercamiento a un gran rompecabezas en el ámbito de la investigación: la barrera hematoencefálica. Ésta es una barrera de células cerebrales endoteliales que posee permeabilidad selectiva para prohibir el paso al encéfalo de determinadas sustancias como bacterias, neurotoxinas o la gran mayoría de medicamentos, pero permitir el paso de agua, péptidos, algunos gases y moléculas solubles en lípidos.

La existencia de una barrera infranqueable para la mayoría de los fármacos útiles para el tratamiento de enfermedades neurológicas y tumores supone la necesidad de descubrir o crear un “medio de transporte” al que llamaremos lanzadera peptídica. Esta lanzadera se compone por aminoácidos que forman péptidos, capaces de superar la barrera y alcanzar el cerebro.

Se puede considerar que la molécula MiniCTX3 es una lanzadera peptídica, pero ¿de dónde proviene? Este elemento surge como modificación de la clorotoxina que es otro péptido presente en el veneno de escorpión palestino amarillo.

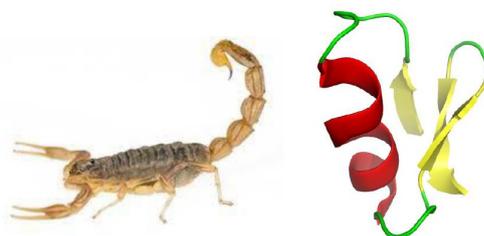


Ilustración 1. A la izquierda el escorpión palestino amarillo y a la derecha la clorotoxina

Los venenos tienen naturaleza peptídica por lo que en la mayoría de los casos pueden traspasar la barrera hematoencefálica sin alterarla. En este caso concreto, se optimiza la secuencia peptídica minimizando la longitud de la neurotoxina CTX. Este péptido ya se ha usado con éxito para delinear tumores y para la administración de cargas terapéuticas a células malignas.

La MiniCTX3 surge en Instituto de Investigación Biomédica (IRB Barcelona) como optimización de la CTX aumentando la carga de transporte, reduciendo su longitud para facilitar la producción y aumentando su permeabilidad. A diferencia de la CTX que posee 36 aminoácidos, la MiniCTX3 posee 11 aminoácidos. No obstante, se demuestra que existe un alto grado de solapamiento entre CTX y MiniCTX3, así como valores de permeabilidad superiores de MiniCTX3 con respecto a la original tanto a la barrera hematoencefálica como de AuNPs que son nanopartículas para liberar de manera específica fármacos.

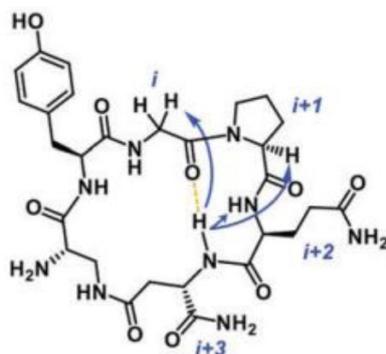


Ilustración 2. Molécula MiniCTX3

Se puede concluir, por tanto, que el descubrimiento de la molécula MiniCTX3, así como de todos aquellos péptidos procedentes de distintos venenos se pueden considerar una fuente prometedora de barreras peptídicas y una esperanza para paliar las enfermedades neurológicas y tumores. Porque, efectivamente, lo que no te mata, con la química se hace más fuerte.

BIBLIOGRAFIA

Díaz-Perlas C., Varese M., Guardiola S., García J., Sánchez-Navarro M., Giralt E., Teixidó M. (2018) From venoms to BBB-shuttles. MiniCTX3: a molecular vector derived from scorpion venom. Chem. Comm. Vol. 54, 90 (12738-12741).

Oller-Salvia B., Sánchez-Navarro M., Giralt E., Teixidó M. (2016) Los péptidos lanzadera, una herramienta prometedora para el transporte de medicamentos. Chem. Soc. 45: 4690-707.

Barrera hematoencefálica <https://www.cancer.gov/espanol/publicaciones/diccionarios/diccionario-cancer/def/barrera-hematoencefalica> (accessed March 12, 2023).

INGENIERÍA QUÍMICA

Ramírez, Á., Muñoz-Morales, M., de la Morena, A., Sánchez, N., Peñuela, L., Sánchez, A., & Llanos, J. (2023). Screening of technologies for limiting the occurrence of disinfection by-products in urban water systems. *Journal of Water Process Engineering*, 53, 103660.

DOI: <https://doi.org/10.1016/J.JWPE.2023.103660>

Serrano-Jiménez, J., de la Osa, A. R., Rodríguez-Gómez, A., Sánchez, P., Romero, A., de Lucas-Consuegra, A. (2023). Electro-reforming of bioethanol produced by sugar fermentation on a Pt-Ni anodic catalyst supported on graphene nanoplatelets. *Journal of Environmental Chemical Engineering*.a

DOI: <https://doi.org/10.1016/J.JWPE.2023.103660>

En el próximo número de Molécula...

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

#DivulgaUCLM

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