

Presentación	P. 2
Premios Nobel	P. 3
Grupo de luminiscencia molecular analítica	P. 9
Tesis doctorales	P. 13
Investigadores INCRECYT.	
Sergio Moreno	P. 17
Artículo Manuel Rodrigo	P. 19
Reconocimiento Antonio Antiñolo	P. 20
Congreso E2KW	P. 21
Jornadas doctorales	P. 22
Conferencias	P. 23
Apertura de curso	P. 25
SCIFEST	P. 26
Programa San Alberto Magno	P. 27

Comité editorial: Consuelo Díaz Maroto, Juan Carlos de Haro, Antonio de la Hoz, José Luis Martín, Antonio M. Rodríguez, Javier Torres

## PRESENTACIÓN

En primer lugar indicar que se ha producido un cambio en el comité editorial, Juan Carlos de Haro ha sustituido a Cristina Gutiérrez a la que queremos agradecer su importante contribución y desearle lo mejor para su futuro profesional. El número de Octubre es muy denso debido a la gran cantidad de actividades y de acontecimientos ocurridos. Queríamos destacar en primer lugar la concesión de los premios Nobel en ciencias y en segundo lugar la apertura de una nueva sección sobre los investigadores INCRECYT que desarrollan su labor en la Facultad y en el IRICA. También se incluyen las habituales secciones de investigación, conferencias, Tesis doctorales y un adelanto del programa de San Alberto Magno que ocupará el número monográfico de Noviembre.

Antonio de la Hoz Ayuso

## PREMIO NOBEL DE QUÍMICA

**Eric Betzig, Stefan W. Hell y William E. Moerner “ por el desarrollo de la microscopía de fluorescencia súper resuelta”**

### Superando las limitaciones del microscopio óptico

Durante mucho tiempo el desarrollo de la microscopía óptica tenía una supuesta limitación: que nunca se obtendría una resolución mejor que la media longitud de onda de la luz. Ayudado por las moléculas fluorescentes los premiados con el Premio Nobel de química 2014 han eludido ingeniosamente esta limitación. Su trabajo innovador ha traído microscopía óptica en la nanodimensión.

Es lo que se conoce como Nanoscopia, los científicos visualizan las vías de las moléculas individuales dentro de las células vivas. Pueden ver cómo las moléculas crean sinapsis entre las células nerviosas en el cerebro; pueden rastrear las proteínas implicadas en las enfermedades de Parkinson, Alzheimer y en la enfermedad de Huntington cuando se agregan; pueden seguir las proteínas individuales en huevos fertilizados y como estos se dividen en embriones.

Era casi obvio que los científicos debían ser capaces de estudiar las células vivas en el más mínimo detalle molecular. En 1873, el microscopista Ernst Abbe estipuló un límite físico para la máxima resolución de microscopía óptica tradicional: no podría nunca llegar a ser mejor que 0,2 micrómetros. Eric Betzig, Stefan W. Hell y William E. Moerner han conseguido el Premio Nobel en química 2014 para haber evitado este límite. Debido a sus logros el microscopio óptico puede ahora mirar en el nanomundo.

Se han recompensado dos principios separados. Uno permite el método stimulated emission depletion microscopy (STED) que fue desarrollado por Stefan Hell en el año 2000. Se utilizan dos rayos láser; uno estimula las moléculas fluorescentes y otro anula fluorescencia de todos excepto en un volumen determinado de tamaño del nm. La exploración sobre la muestra, nanómetro a nanómetro, produce una imagen con una resolución mejor que el límite estipulado de Abbe.

Eric Betzig y William Moerner, trabajando por separado, sentaron las bases para el segundo método, la microscopía de una única molécula. El método se basa en la posibilidad de encender y apagar la fluorescencia de moléculas individuales. Los científicos toman la imagen de la misma área varias veces, dejando sólo unas moléculas entremezcladas que brillen cada vez. La superposición de estas imágenes proporciona una imagen súper densa que se resuelve a nivel nanométrico. En 2006, Eric Betzig utilizó este método por primera vez.

Hoy en día, la Nanoscopia se utiliza por todo el mundo y se producen nuevos conocimientos diariamente para beneficio de la humanidad.

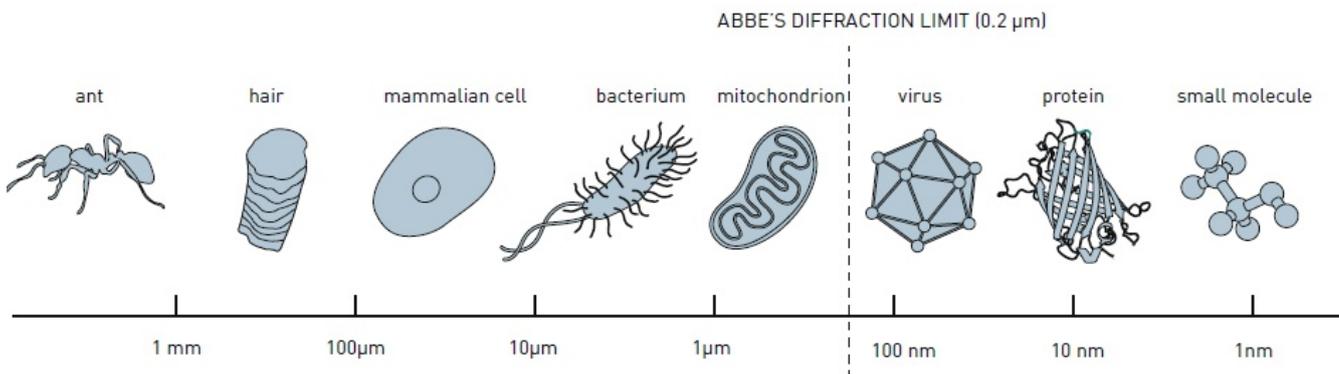


Figura 1. Límite de detección de Abbe

## The principle of STED microscopy

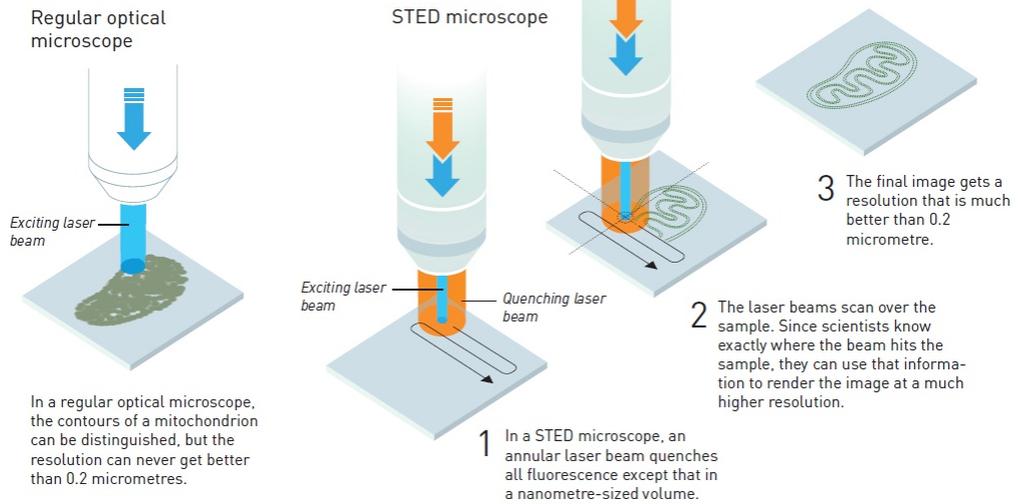


Figura 2

E.coli

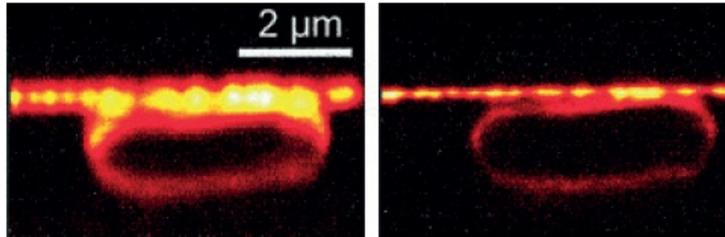


Figura 3. Una de las primeras imágenes obtenidas por Stefan Hell utilizando el microscopio STED.

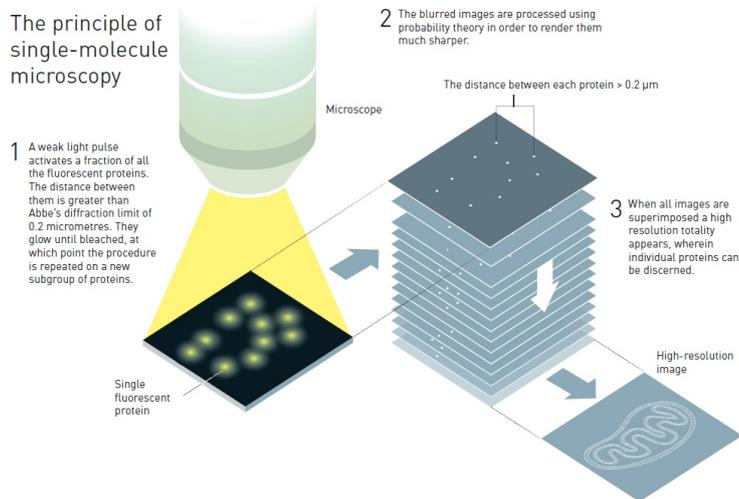


Figura 4.

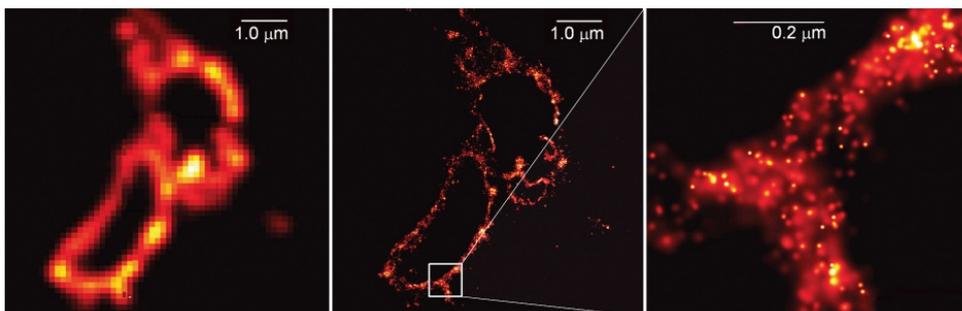


Figura 5. Membranas de Lisozoma tomadas por Bezig

## PREMIO NOBEL DE FÍSICA



**Isamu Akasaki, Hiroshi Amano y Shuji Nakamura “ por la invención de diodos emisores de luz azul eficientes que ha permitido diseñar fuentes de luz blanca eficientes y co ahorro de energía”**

### **Nueva luz para iluminar el mundo**

Los premios Nobel de Física de este año se han adjudicado a los Prof. Akasaki, Amano y Nakamura por haber inventado una nueva fuente de luz eficiente y respetuosa con el medio ambiente, el diodo emisor de luz azul (LED). Siguiendo el espíritu de Alfred Nobel el premio recompensa a una invención que aporta un gran beneficio a la humanidad; utilizando LEDs azules, puede crearse luz blanca de una nueva manera. Con el advenimiento de las lámparas LED ahora tenemos alternativas más duraderas y más eficientes que las antiguas.

Cuando Isamu Akasaki, Hiroshi Amano y Shuji Nakamura produjeron rayos de luz azules brillantes a partir de semiconductores, en la década de 1990, desencadenaron una transformación fundamental de la tecnología de iluminación. Los diodos rojos y verdes existían desde hace bastante tiempo pero sin luz azul, no se puede crear lámparas emisoras de luz blanca. A pesar de los esfuerzos considerables, tanto en la comunidad científica y en la industria, el LED azul había seguido siendo un desafío durante tres décadas.

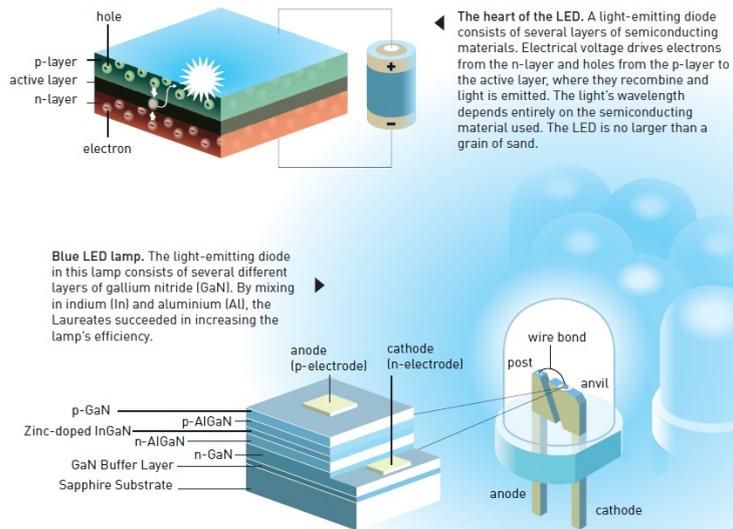
Sin embargo, ellos tuvieron éxito donde los demás habían fracasado. Akasaki trabajó junto con Amano en la Universidad de Nagoya, mientras que Nakamura fue empleado en Nichia Chemicals, una pequeña empresa de Tokushima. Sus inventos eran revolucionarios. Las bombillas incandescentes han iluminado el siglo XX; el siglo XXI se iluminará mediante lámparas LED.

Las lámparas LED blancas emiten una luz blanca brillante, son eficientes y duraderas. Constantemente se están mejorando, haciéndolas más eficientes, con mayor flujo luminoso (medido en lúmenes) por unidad entrada eléctrica (medido en vatios). El récord más reciente está justo por encima de los 300 lm/W, que solamente puede compararse con 16 bombillas incandescentes y cerca de 70 lámparas fluorescentes. Aproximadamente una cuarta parte del consumo mundial de electricidad se utiliza para iluminación. Los LEDs contribuyen al ahorro de recursos de la tierra. El consumo de materiales también disminuye ya que los LEDs duran hasta 100.000 horas, frente a 1.000 para las bombillas incandescentes y 10.000 horas de luces fluorescentes.

La lámpara LED es un invento muy prometedor para mejorar la calidad de vida de más de 1,5 billones de personas en el mundo que carecen de acceso a las redes eléctricas ya que debido al bajo consumo de energía puede ser alimentadas por energía solar local barata.

La invención del LED azul tiene sólo 20 años, pero ya ha contribuido para crear luz blanca de una manera totalmente nueva para el beneficio de todos nosotros.

# PREMIOS NOBEL



The principle for a light-emitting diode - LED (upper left) and an example of a blue LED lamp.

Figura 1

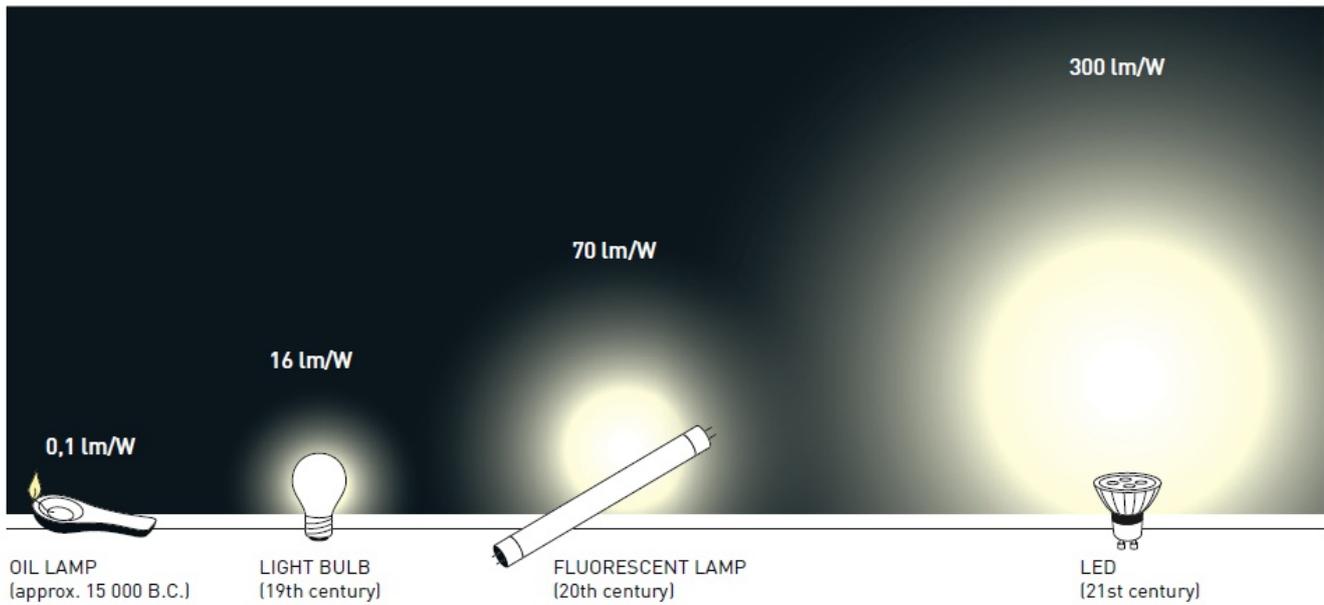


Figura 2. Desarrollo histórico de la iluminación.

Más información en:

<http://www.nobelprize.org/>

## PREMIO NOBEL DE FISIOLOGÍA Y MEDICINA

### **John O'Keefe May, Britt Moser y Edvard I. Moser "por sus descubrimientos de células que constituyen un sistema de posicionamiento en el cerebro"**

¿Cómo sabemos dónde estamos? ¿Cómo podemos encontrar el camino desde un lugar a otro? Y ¿cómo podemos almacenar esta información de tal manera que inmediatamente podemos encontrarla la próxima vez que sigamos el mismo camino? Los premiados con el Nobel de Medicina de este año han descubierto un sistema de posicionamiento, un "GPS interno" en el cerebro que hace posible orientarnos en el espacio, demostrando una base celular para la función cognitiva superior.

En 1971, John O'Keefe descubrió el primer componente de este sistema de posicionamiento. Encontró que un tipo de célula nerviosa en un área del cerebro llamada el hipocampo siempre se activaba cuando una rata estaba en un lugar determinado en una habitación. Otras neuronas se activaban en el cerebro de la rata cuando estaba en otros lugares. O'Keefe llegó a la conclusión que estas "células de lugar" formaban un mapa de la habitación.

Más de tres décadas más tarde, en 2005, O'Keefe, Britt y Moser descubrieron otro componente clave del cerebro del sistema de posicionamiento. Identificaron otro tipo de célula nerviosa, que llamaron "células red", que generaban un sistema de coordenadas y permitían tanto un posicionamiento preciso como encontrar el camino. Sus investigaciones posteriores demostraron cómo las células de lugar y de red permitían determinar la posición y navegar.

¿Los descubrimientos de O'Keefe, Moser y Moser han resuelto un problema que ha ocupado a los filósofos y científicos durante siglos – cómo el cerebro crea un mapa del espacio que nos rodea y cómo podemos navegar por nuestro camino a través de un entorno complejo?

#### **¿Cómo experimentamos nuestro entorno?**

El sentido del lugar y la capacidad de navegar son fundamentales para nuestra existencia. El sentido del lugar da una percepción de posición en el medio. Durante la navegación, está interconectado con un sentido de la distancia que se basa en el movimiento y el conocimiento de posiciones anteriores.

Las preguntas sobre el lugar y navegación han intrigado a filósofos y científicos durante mucho tiempo. Hace más de 200 años, el filósofo alemán Immanuel Kant sostuvo que algunas habilidades mentales existen a priori, como conocimiento, independientemente de la experiencia. Consideró el concepto de espacio como un principio incorporado de la mente, a través del cual el mundo es y debe ser percibido. Con el advenimiento de la psicología del comportamiento a mediados del siglo 20, estas cuestiones podrían comprobarse experimentalmente. Cuando Edward Tolman examinó las ratas moviéndose a través de laberintos, encontró que pudieron aprender a navegar y propuso que un "mapa cognitivo" formado en el cerebro es lo que permitía que encontrasen su camino. Pero algunas preguntas todavía permanecían, por ejemplo, cómo este mapa puede estar representado en el cerebro?

#### **John O'Keefe y el lugar en el espacio**

John O'Keefe estaba fascinado por el problema de cómo el cerebro controla el comportamiento y decidió, a finales de 1960, atacar esta pregunta con métodos neurofisiológicos. Al grabar las señales de las células nerviosas individuales en una parte del cerebro llamada el hipocampo, en ratas moviéndose libremente en una habitación, O'Keefe descubrió que ciertas células nerviosas se activan cuando el animal asume un lugar particular en el medio ambiente. Así pudo demostrar que en estas "células de posición" no solamente registraban las entradas visuales, sino que estaban construyendo un mapa interno del entorno. O'Keefe concluyó que el hipocampo genera numerosos mapas, representados por la actividad colectiva de las células de posición que se activan en diferentes ambientes.

# PREMIOS NOBEL

Por lo tanto, la memoria de entorno puede almacenarse como una combinación específica de actividad de células de posición en el hipocampo.

## **Britt y Moser encuentran las coordenadas**

Britt y Moser fueron creando un mapa de las conexiones del hipocampo en ratas que se movían en una habitación cuando descubrieron un asombroso patrón de actividad en una parte del cerebro llamada la corteza entorrinal cercana. Algunas células se activaron cuando la rata había pasado varias ubicaciones dispuestas en una rejilla hexagonal. Cada una de estas células se activó en un único patrón espacial y colectivamente estas células "rejilla" constituyen un sistema de coordenadas que permite la navegación espacial. Junto con otras células de la corteza de la corteza entorrinal que reconocen la dirección del centro y los bordes de la sala, forman circuitos con las células de posición en el hipocampo. Este circuito constituye un sistema de posicionamiento global, un GPS interno, en el cerebro.

## **Un lugar para los mapas en el cerebro humano**

Investigaciones recientes con técnicas de imagen cerebral, así como estudios de pacientes sometidos a neurocirugía, han proporcionado evidencias de que estas células de posición y de red existen también en los seres humanos. En pacientes con enfermedad de Alzheimer, la corteza del hipocampo y entorrinal con frecuencia se ven afectados en una etapa temprana, y estos individuos a menudo pierden su camino y no pueden reconocer el entorno. El conocimiento acerca del sistema de posicionamiento cerebral puede ayudarnos a entender el mecanismo que sustenta la devastadora pérdida de memoria espacial que afecta a las personas con esta enfermedad.

El descubrimiento del sistema de posicionamiento cerebral representa un cambio de paradigma en nuestra comprensión de cómo los conjuntos de células especializadas trabajan juntos para ejecutar las funciones cognitivas superiores. Se han abierto nuevos caminos para la comprensión de otros procesos cognitivos, tales como memoria, pensamiento y planificación.

**The Nobel Prize in Physiology or Medicine 2014** 

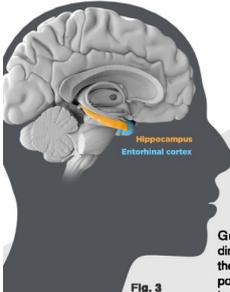
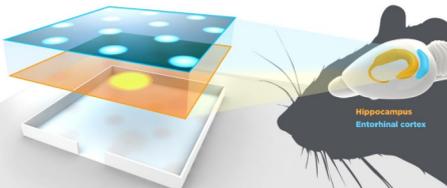
  **John O'Keefe**  
**John O'Keefe** discovered, in 1971, that certain nerve cells in the brain were activated when a rat assumed a particular place in the environment. Other nerve cells were activated at other places. He proposed that these "place cells" build up an inner map of the environment. Place cells are located in a part of the brain called the hippocampus.

**Fig. 1**

  **May-Britt Moser and Edvard I. Moser** 

**May-Britt och Edvard I. Moser** discovered in 2005 that other nerve cells in a nearby part of the brain, the entorhinal cortex, were activated when the rat passed certain locations. Together, these locations formed a hexagonal grid, each "grid cell" reacting in a unique spatial pattern. Collectively, these grid cells form a coordinate system that allows for spatial navigation.

**Fig. 2**

**Fig. 3**

Grid cells, together with other cells in the entorhinal cortex that recognize the direction of the head of the animal and the border of the room, form networks with the place cells in the hippocampus. This circuitry constitutes a comprehensive positioning system, an inner GPS, in the brain. The positioning system in the human brain appears to have similar components as those of the rat brain.

© 2014 The Nobel Committee for Physiology or Medicine  
The Nobel Prize® and the Nobel Prize® medal design mark are registered trademarks of the Nobel Foundation Illustration and layout: Mattias Karlén

## GRUPO DE INVESTIGACIÓN DE LUMINISCENCIA MOLECULAR ANALÍTICA

Aunque el nombre oficial de nuestro Grupo de Investigación es “Nuevas metodologías Analíticas para compuestos de interés farmacológico y ambiental”, solemos utilizar el nombre de “Luminiscencia Molecular Analítica” ya que trabajamos siempre con la emisión molecular para el desarrollo de nuevos métodos de análisis.

Actualmente el grupo está integrado por los profesores José María Lemus, Aurelia Alañón, Luisa Fernanda García, Pablo Fernández, Francisco Martín y, yo mismo, como investigador principal, aunque en algunos momentos el grupo ha llegado a tener simultáneamente dos becarios de investigación, tres investigadores contratados con cargo a proyectos e investigadores extranjeros, siendo un total de 15 investigadores.



Componentes del Grupo en los cursos 2009/10 y 2010/11.

Es importante también resaltar que han completado su formación incorporándose a nuestro Grupo investigadores de Méjico, Venezuela, Cuba y Marruecos.

Haciendo un poco de historia, fuimos el primer grupo de Investigación de Química Analítica de la UCLM, que se constituyó (en 1987), consiguiendo ya en 1989 el primer proyecto competitivo nacional de la entonces Dirección General de Investigación Científica y Técnica del Ministerio de Educación y Ciencia. También es importante resaltar que las dos primeras Tesis Doctorales de Química Analítica de la UCLM se dirigieron desde nuestro grupo.

Nuestro Grupo ha sido pionero en muchos aspectos y ha abierto una forma continua y dinámica de trabajo, que nos han llevado a que el primer investigador extranjero que se incorporó a Química Analítica lo hizo en nuestro Grupo, la primera colaboración con empresas y entidades públicas, hemos defendido la primera Tesina de Licenciatura y el primer DEA, desarrollado la primera Tesis con Mención Europea, obtener el primer Premio Extraordinario de Doctorado, todo ello referido, por supuesto, al Área de Química Analítica de la UCLM.



Aurelia Alañón y Luisa Fernanda García, las dos primeras Doctoras en Química Analítica de la UCLM.

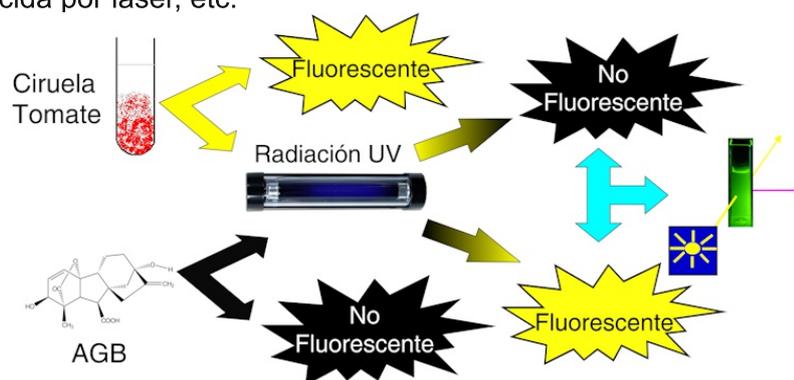
El objetivo principal es desarrollar nuevos métodos directos de determinación de analitos de interés farmacológico, medioambiental y alimentario que sean versátiles y puedan abarcar el mayor número de sustancias a analizar y en el mayor número de muestras posible. En este sentido, no nos centramos ni en único tipo de analito, ni en una sola clase de muestra, sino que aplicamos las metodologías propuestas por nosotros para demostrar la viabilidad en múltiples aplicaciones prácticas. Así hemos trabajado con fármacos (antibióticos beta-lactámicos, inhibidores de beta-lactamasas, vitaminas, ácido nalidíxico y fluoroquinolonas, antiinflamatorios, antitérmicos, analgésicos, diuréticos, beta-bloqueantes, antirreumáticos, antiinflamatorios, ...), metabolitos (estableciendo incluso la farmacocinética del propranolol), agentes dopantes, drogas y sus antagonistas, hormonas, herbicidas, insecticidas, rodenticidas, fitohormonas, hidrocarburos aromáticos policíclicos, antioxidantes en alimentos, etc. Por otra parte, las muestras naturales a las que hemos aplicado las metodologías propuestas son también muy variadas: productos farmacéuticos, fluidos biológicos humanos (suero sanguíneo, orina, líquido cefalorraquídeo y leche materna), diferentes tipos de suelos agrícolas y no cultivados, aguas potables, aguas naturales, bebidas, frutas, verduras, hortalizas, productos lácteos de vaca, cabra y oveja, aceites, productos para infusiones, etc.

Una de las problemáticas que estamos resolviendo últimamente es la determinación de analitos fluorescentes en matrices naturales que también lo son y que, por tanto, hasta ahora no podían abordarse de forma directa mediante métodos luminiscentes, desaprovechándose la excelente sensibilidad y selectividad de este tipo de metodologías.

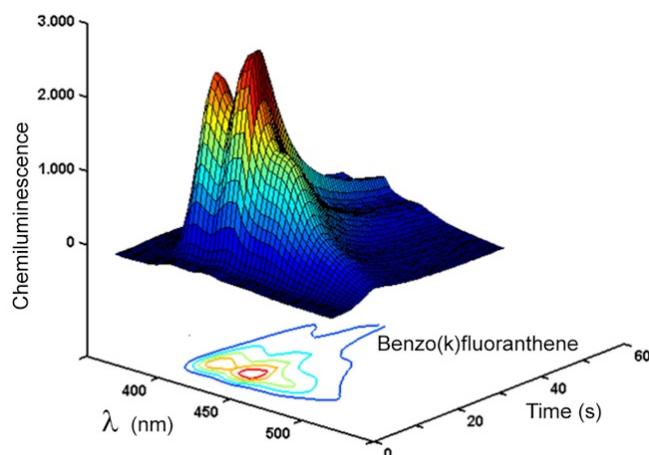
Podría pensarse que después de casi treinta años trabajando en el campo de la luminiscencia, los trabajos publicados podrían ser una mera reproducción unos de otros. Nada más lejos de la realidad. Se han desarrollado metodologías de fluorescencia multidimensional, hemos propuesto las dos últimas metodologías de fluorescencia sincrónica, se ha iniciado la investigación con fluorescencia en cuatro dimensiones (tres dimensiones espectrométricas y la cuarta de cinética de desactivación), se ha descrito por vez primera la quimioluminiscencia espectro-cinética en tres dimensiones, se ha trabajado con fotoluminiscencia sensibilizada por lantánidos y se ha propuesto la quimioluminiscencia sensibilizada por lantánidos, se han propuesto métodos basados en luminiscencia fotoinducida, se ha conseguido la desaparición por irradiación selectiva de la fluorescencia de matrices como sandías, naranjas y otros alimentos pudiendo determinar algunos productos fitosanitarios y fitohormonas directamente, se ha acoplado detectores de quimioluminiscencia en dos y tres dimensiones a cromatografía iónica, sistemas de flujo detenido, cinéticas de desactivación espectroscópicas (fluorescencia y quimioluminiscencia

# INVESTIGACIÓN

resueltas en el tiempo), metodologías fosforescentes, como fosforescencia en medios protegidos, fosforescencia inducida por átomo pesado, cinética de desarrollo fosforescente, fluorescencia y fosforescencia inducida por láser, etc.



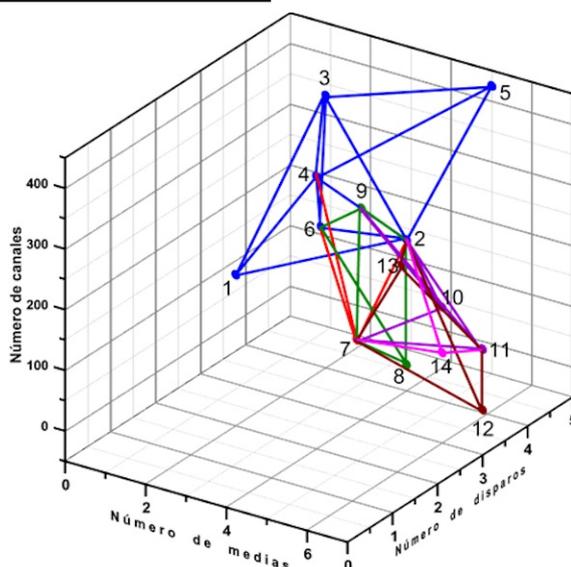
Estrategia de trabajo para abordar la determinación de ácido giberélico en productos vegetales. Mediante la irradiación a 253.7 nm se destruye la fluorescencia de la ciruela y el tomate y se genera la fluorescencia fotoinducida del analito, lo que permite su determinación directa en estas muestras naturales.



Espectro por quimioluminiscencia espectro-cinética (metodología descrita por nuestro Grupo) para la determinación de PAH en aguas naturales.

Por otra parte, para el desarrollo de las metodologías multidimensionales, donde se trabaja con matrices de datos que para cada muestra pueden consistir en casi 30.000 puntos experimentales, ha sido necesario desarrollar nuestro propio "software" de investigación publicándose en revistas de quimiometría como *Computer & Chemistry*. Por otra parte, para el acoplamiento y desarrollo instrumental, se han diseñado los correspondientes convertidores analógico/digital que permiten no sólo la captación de los datos experimentales y su tratamiento, sino también el control programable de los diferentes componentes instrumentales que permiten la automatización.

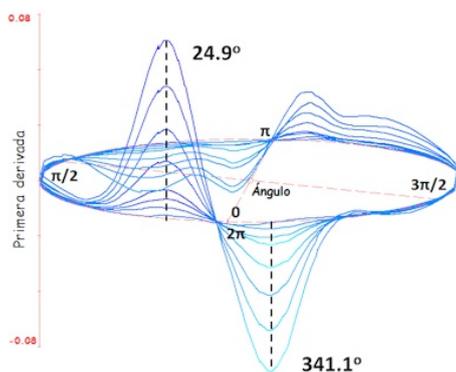
También puede entenderse que, dentro de nuestra línea de trabajo en Quimiometría, no siempre nos podía servir la calibración clásica sino que algunos problemas han tenido que ser abordados mediante diferentes tipos de calibración multivariante. Por otra parte, para mejorar el diseño de experimentos, hemos diseñado un "software" de optimización multiparamétrica de variables, combinando diferentes modalidades del método simplex modificado y ponderado.



Diseño de experimentos. Optimización de variables en fluorescencia inducida por láser, mediante el “software” desarrollado en nuestro Grupo, con la colaboración de José Miguel Murillo Gómez, Ingeniero Superior en Informática.

Por último comentar que nuestra labor ha trascendido del ámbito de la Universidad habiéndose firmado contratos con la Confederación Hidrográfica del Guadiana, laboratorios farmacéuticos Reig-Jofre, Silicio Solar, anteproyecto de balneario en Villanueva de la Fuente, etc.

Como puede comprobarse, es una trayectoria investigadora muy dinámica. Hemos sabido adaptarnos a los nuevos problemas que han ido surgiendo y hemos ido innovando, mejorando e incorporando nuevos diseños químicos, espectrométricos, quimiométricos e instrumentales para superar día a día los inconvenientes de las metodologías que ya existían, las que íbamos proponiendo nosotros y algunas que se describían por vez primera en la bibliografía.



Espectros del insecticida carbaryl (de la familia de los carbamatos) en leche de vaca, obtenidos por “FLUORESCENCE IN ANGULAR PROJECTION AND TOTAL TRAJECTORIES (resultados obtenidos muy recientemente y aún sin publicar).

Por último, decir que aunque nos caracteriza nuestra investigación, más aún nos caracteriza el término GRUPO, ya que siempre hemos aplicado como estrategia el trabajo colaborativo, y es por ello por lo que me honra representarlo.

José Antonio Murillo Pulgarín.  
Catedrático de Química Analítica.

## BIOQUÍMICA

**MODULACIÓN DE LAS VÍAS DE SEÑALIZACIÓN DE ADENOSINA, GLUTAMATO Y DOPAMINA EN ESQUIZOFRENIA Y ALZHEIMER. POSIBLES INTERACCIONES.**

**Doctoranda:** Sara Díaz Sánchez

**Directores:** Dres. Mairena Martín López y José Luis Albasanz Herrero

**Área:** Bioquímica y Biología Molecular

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

La enfermedad de Alzheimer (AD) es la enfermedad neurodegenerativa más común y con más impacto entre todas las demencias que se conocen, con una prevalencia de 26,6 millones de afectados en todo el mundo. Por ello, la investigación sobre AD se ha convertido en uno de los objetivos prioritarios en proyectos de I+D+i. Por otro lado, la Esquizofrenia (SZ) es un desorden psicótico que afecta alrededor del 1% de la población a nivel mundial. Desde una perspectiva biológica, tanto AD como SZ, son consideradas patologías en las que se ven alteradas las redes cerebrales y que tienen como consecuencia una formación anormal de los circuitos y una alteración de la neurotransmisión y de la función sináptica. Los síntomas de deterioro cognitivo y las alteraciones de comportamiento en AD y SZ son atribuidos, entre otras causas, a una alteración en la transmisión sináptica glutamatérgica y dopaminérgica, respectivamente. Estos sistemas de neurotransmisión pueden estar modulados por el sistema purinérgico de adenosina, que juega un papel fundamental en procesos de aprendizaje y memoria, procesos muy afectados en estas patologías estudiadas.

Por todo ello, el trabajo realizado en esta tesis doctoral se basó en dilucidar el papel que juegan los Sistemas de Neurotransmisión de Adenosina, Dopamina y Glutamato y como se ven alteradas las vías de señalización mediadas por los receptores de adenosina  $A_{2A}$  y  $A_1$ , los de dopamina  $D_2$ -like y  $D_2$ , así como el receptor de glutamato  $mGlu_5$  en Corteza Temporal (CT) y Parietal (CP) de muestras post-mortem de cerebro humano. Los resultados obtenidos y recogidos en la memoria muestran que tanto los niveles de los receptores como la funcionalidad de sus vías de señalización, se encuentran alterados en SZ y AD. En concreto, las muestras que presentan únicamente AD manifiestan, en términos generales, una pérdida progresiva según el avance de la enfermedad, del número de receptores de glutamato  $mGlu_5$  y de la funcionalidad de sus vías en las dos áreas estudiadas, no observándose tan clara esta disminución en los casos en los que se asocia con SZ o aparece únicamente SZ. Esta pérdida progresiva no se observa en los receptores de adenosina  $A_1$ , implicados en procesos de neuroprotección, ya que se pierden prácticamente desde los primeros estadios de AD e incluso en los casos en los que se asocia con SZ. Por el contrario, los receptores de adenosina  $A_{2A}$ , implicados en procesos de citotoxicidad, se encuentran aumentados gradualmente según progresa la enfermedad en las muestras que presentan AD, mientras que en SZ se ha detectado una población de pacientes en los que se detecta una fuerte disminución de estos receptores en correlación con una alteración motora observada en escalas de diagnóstico clínico. El sistema dopaminérgico mediado por los receptores  $D_2$  se encuentra modulado en CP donde los receptores  $D_2$  están incrementados en todas las patologías estudiadas, mientras que su nivel se preserva en CT. Sin embargo, la funcionalidad de la vía se ve comprometida en muestras que presentan AD y SZ.

Todos estos receptores estudiados pertenecen al grupo de receptores acoplados a proteínas G o GPCRs. En este trabajo también se estudiaron diferentes formas de regulación de estos receptores ya que recientemente se ha comprobado que los GPCRs son capaces de interactuar entre sí, formando dímeros o heterodímeros. Así se estudiaron las interacciones entre los receptores  $A_{2A}$ - $D_2$ ,  $A_{2A}$ -mGlu<sub>5</sub> y  $D_2$ -mGlu<sub>5</sub> tanto a nivel funcional como estructural. Los resultados obtenidos confirman la existencia de interacciones funcionales y estructurales en CP y CT de cerebro humano, siendo antagónicas entre los receptores  $A_{2A}$ - $D_2$  y entre  $A_{2A}$ -mGlu<sub>5</sub> en CT y CP de SZ y AD. Sin embargo, no parecen estar tan claras las que se producen entre  $D_2$ -mGlu<sub>5</sub>. Además, también se detectaron interacciones estructurales heterodiméricas entre receptores  $A_{2A}$ - $D_2$ ,  $A_{2A}$ -mGlu<sub>5</sub> y  $D_2$ -mGlu<sub>5</sub> en muestras de CP y CT que pueden modular la funcionalidad de las diferentes vías de señalización. Estas interacciones se pueden ver disminuidas en función de las patologías y áreas analizadas, siendo  $A_{2A}$ - $D_2$  la más susceptible de sufrir modificación pues se altera en CT y CP mientras que las otras dos solo se ven afectadas en CP y generalmente cuando existen rasgos de AD.

Todos los resultados obtenidos y el hecho de que los receptores de adenosina, glutamato y dopamina se encuentran modulados en Alzheimer y Esquizofrenia, unido a que existen diferentes interacciones estructurales y funcionales entre ellos, sugiere a estos receptores como una importante diana diagnóstica y/o terapéutica para estas patologías.



## QUÍMICA ORGÁNICA

**MICROCHIPS IN ORGANIC CHEMISTRY: NMR MICROCOILS FOR REACTION MONITORIZATION AND COMPUTATIONAL CHEMISTRY FOR MICROWAVE-ASSISTED REACTIONS.****Doctorando: Antonio M. Rodríguez García****Directoras: Dra. Victoria Gómez Almagro y Dra. Pilar Prieto Núñez-Polo**

Durante los últimos cuatro años, he estado trabajando en el desarrollo de mi tesis doctoral titulada *Microchip in Organic Chemistry: NMR Microcoils for Reaction Monitorization and Computational Chemistry for Microwave-Assisted reactions*, realizada bajo la supervisión de la Dra. Victoria Gómez Almagro y la Dra. Pilar Prieto Núñez-Polo en el área de Química Orgánica en esta facultad. La novedad principal de esta tesis se recoge en un enfoque de resolución de los problemas mediante una perspectiva combinada de la aproximación experimental y teórica, llegando a un balance adecuado, variable en cada caso, para resolver los problemas químicos que nos encontrábamos.

El primer proyecto consistía en la monitorización de diferentes reacciones, realizadas bajo diferentes modos de activación de las reacciones químicas, química en flujo, microondas o fotoquímica. El proceso de monitorización en el que este proyecto se ha basado en la integración de la técnica analítica como es la RMN, con microbobinas o microchips de RMN, que se encuentran especialmente diseñados en la manipulación de muestras de masa y volumen limitada. Todo ello, unido al trabajo en flujo continuo e integrado todo ello en una sonda convencional de RMN modificada a conveniencia, nos ha permitido mejorar la sensibilidad de, por otra parte, una técnica con limitaciones de sensibilidad con respecto a las demás, y la determinación experimental de las constantes cinéticas de una pequeña librería de compuestos heterocíclicos. También nos ha permitido la determinación de la energía de activación para cada uno de los substratos en condiciones de flujo continuo, y llegando a estudiar las mejoras introducidas mediante la irradiación microondas.

Por otra parte también se ha desarrollado una estancia internacional en la Universidad de Durham, en Reino Unido, donde se trabajó en la mejora de mis habilidades químicas en el campo de la Síntesis Orgánica, también haciendo uso de técnicas en flujo continuo en la obtención de substratos con interesantes aplicaciones biológicas como marcadores epigenéticos en la expresión génica. Por otra parte, también se ha abierto una nueva metodología en la obtención de substratos como son las pirrolo[1,2-c]pirimidinas, en cantidades relativamente superiores a las obtenidas mediante aproximaciones convencionales.

El otro proyecto corresponde en la aplicación de los principios teóricos en la síntesis de reacciones asistidas por microondas, *Microwave Assisted Organic Synthesis, MAOS*. En ese sentido, la irradiación microondas es una fuente de energía no convencional que posee importantes ventajas en la mejora de reacciones químicas. Sin embargo, los orígenes de las mejoras de las reacciones bajo irradiación microondas se podía considerar un misterio químico. La conjunción sinérgica de la Química Microondas y la Química Computacional ha ayudado anteriormente en iluminar el mecanismo o papeles de las especies involucradas dentro del desarrollo de estas reacciones. Es por ello, que en nuestro estudio predictivo, seleccionamos reacciones que se conocía que mejoraban bajo irradiación microondas. .

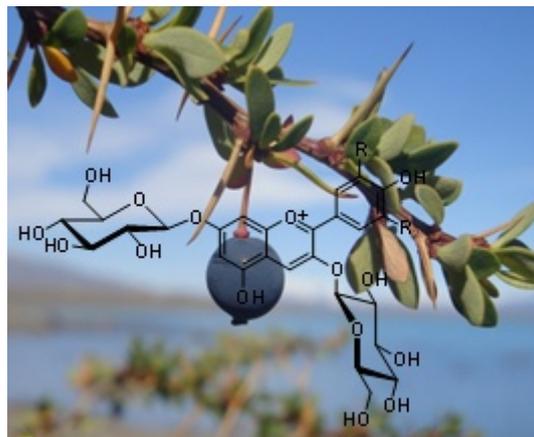
Los resultados computacionales obtenidos han permitido determinar que son aquellas reacciones más lentas, aquellas con un medio polar (a través del disolvente, sustratos o soportes), o la presencia de pequeñas cantidades de especies que adsorban fuertemente la irradiación microondas en papel de agentes dopantes o susceptores como podrían ser los líquidos iónicos. Estos resultados nos han permitido desarrollar además un modelo predictivo en la interpretación de las diferentes reacciones mejoradas bajo irradiación microondas.

En otro aspecto, se ha realizado una colaboración interuniversitaria con la Universidad de Zaragoza en el estudio computacional de las reacciones enantioselectivas de ciclopropanación mediante complejos de cobre y 4,4'-BOX como ligandos quirales. En estos sistemas se han podido describir el comportamiento de estos sistemas y la importancia de valorar las diferentes conformaciones en la descripción de los sistemas esteroquímicos, un aspecto que a veces se encuentra sobre-simplificado en los sistemas mencionados.

Finalmente, se han combinado ambas aproximaciones teórica y experimental en el estudio de un problema químico, las reacciones [2+2] inducidas fotoquímicamente. Así se han utilizado diferentes metodologías presentadas anteriormente: la química en flujo, fotoquímica y la RMN conjunto con la química computacional. Estas reacciones [2+2] se han estudiado sobre los núcleos de (Z)-4-aryliden-5(4H)-oxazolonas en la obtención de derivados de ciclobutanos tipo, de ácidos 1,3-diaminotrujilico y 1,2-diaminotrujilicos. El problema correspondía en la elucidación de los isómeros mayoritarios en la mezcla de las 15 posibles combinaciones posibles. Todo esto ha sido posible mediante la combinación de la parte experimental y los cálculos computacionales, dado que ambas aproximaciones en su aproximación individual no conseguía su resolución.



## SERGIO GÓMEZ ALONSO



Sergio Gómez Alonso se incorporó al programa INCRECYT en diciembre de 2009, estando desde entonces adscrito al Área de Tecnología de los Alimentos y al Instituto Regional de Investigación Científica Aplicada (IRICA). Antes de incorporarse al programa INCRECYT y una vez obtenido el doctorado, desarrolló su actividad científica durante cinco años como investigador del sistema INIA-CCAA en el Instituto de la Vid y el Vino de Castilla-La Mancha (IVICAM).

Desde el comienzo su actividad investigadora ha estado relacionada con los compuestos fenólicos presentes de forma natural en los alimentos de origen vegetal y su relación con la calidad. Inicialmente, durante el desarrollo de su tesis doctoral, trabajó en los compuestos fenólicos presentes en el aceite de oliva virgen, su relación con la estabilidad oxidativa y su aplicación como marcadores varietales. Tras su incorporación al IVICAM, continuó trabajando en el campo de los compuestos fenólicos, pero en este caso de la uva y el vino, producto este último en el que estos compuestos tienen una enorme importancia por su relación con diversos atributos sensoriales como son el color, el amargor y la astringencia. Además, durante su estancia postdoctoral en el grupo "Molecular Nutrition" de la School of Chemistry, Food & Pharmacy (University of Reading) estudió, mediante modelos celulares, algunos efectos sobre la salud humana de los compuestos fenólicos presentes en la dieta. Desde su incorporación al IRICA a través del programa INCRECYT su actividad sigue muy relacionada con los compuestos bioactivos y se enmarca fundamentalmente en las siguientes líneas de investigación:

- Estudio de los compuestos fenólicos en alimentos de origen vegetal y su relación con la calidad. Dentro de esta línea participa actualmente en proyectos sobre el estudio de la relación entre los compuestos fenólicos y el amargor y la astringencia del vino, la caracterización del potencial enológico de nuevas variedades de vid del Banco de Germoplasma de Vid de Castilla-La Mancha, y la elaboración de aceites vírgenes a partir semillas y frutos secos.
- Aprovechamiento de subproductos de la industria alimentaria como fuente de extractos y compuestos bioactivos, para su uso como ingredientes tecnológicos y/o funcionales. En concreto se ha desarrollado un proyecto sobre la obtención de extractos a partir de subproductos de la industria enológica y su aplicación como antioxidantes y colorantes en la industria alimentaria. Además, en colaboración con la Unidad de Investigación Traslacional del Hospital General Universitario de Ciudad Real, se estudia la actividad antiproliferativa de los extractos obtenidos en diferentes líneas celulares tumorales.

## SERGIO GÓMEZ ALONSO

- Aislamiento y caracterización de compuestos fenólicos de distintos frutos mediante técnicas espectroscópicas. En este campo se han desarrollado diversos trabajos, muchos de ellos en colaboración con universidades latinoamericanas como la Universidad de Concepción (Chile), la Universidade Estadual Paulista (Brasil), la Universidade Federal de Viçosa (Brasil) y la Universidade Estadual de Campinas (Brasil) para la caracterización de los compuestos fenólicos de frutos como el Calafate (*Berberis microphylla*), el Jambolan (*Syzygium cumini*) o la Jaboticaba (*Plinia cauliflora*).

Desde el año 2000 ha participado en 10 proyectos de investigación financiados en convocatorias competitivas, siendo investigador principal en uno de ellos. Además, desde el año 2009 ha participado en cuatro contratos con empresas. La actividad investigadora desarrollada se refleja en 36 artículos publicados hasta la fecha (todos ellos SCI), con un índice H = 18. Otras contribuciones importantes son tres capítulos de libro, dos artículos divulgativos y más de 50 comunicaciones a congresos, entre ellas varias ponencias. Por otra parte, como profesor asociado del Área de Nutrición y Bromatología, imparte docencia en el Grado en Ciencia y Tecnología de los Alimentos.

## EL PROFESOR MANUEL RODRIGO EVALÚA EL IMPACTO DE LA TECNOLOGÍA ELECTROQUÍMICA EN LA ELIMINACIÓN DE PESTICIDAS

En el marco del Campus Científico y Tecnológico de la Energía y el Medio Ambiente (CyTEMA) de la Universidad de Castilla-La Mancha, el profesor de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas Manuel Andrés Rodrigo ha publicado el artículo 'Electrochemically Assisted Remediation of Pesticides in Soils and Water: A Review' en Chemical Reviews (Factor de Impacto 45,661), la revista no médica con mayor índice de impacto en la actualidad. El trabajo ha sido publicado junto a otros dos investigadores de la Universidad Paris Est, adscrita al CyTEMA.

El catedrático de Ingeniería Química de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) Manuel Andrés Rodrigo ha publicado en la prestigiosa revista Chemical Reviews un artículo de investigación en el que evalúa el estado actual de conocimientos en tecnología electroquímica para la eliminación de pesticidas en suelos y aguas y el potencial impacto de las tecnologías que actualmente están en desarrollo en la solución de este importante problema ambiental.

El artículo de Manuel Rodrigo es fruto de su estancia como profesor invitado en la Universidad Paris Est, universidad adscrita al Campus de Excelencia Internacional CyTEMA –Campus Científico y Tecnológico de la Energía y el Medio Ambiente– de la Universidad regional, programa que tiene por objetivo posicionar a esta institución como referente europeo en materia de investigación en dicho ámbito. Durante su estancia en la Universidad Paris Est, el profesor Rodrigo trabajó junto al investigador Mehmet Oturan, director del laboratorio de Geomateriales y Medioambiente, uno de los referentes internacionales en la eliminación de pesticidas por procesos de oxidación avanzados, y dio lugar a una colaboración fructífera entre ambas instituciones que conllevó a la publicación de otros artículos de investigación.

Asimismo, el trabajo del profesor Rodrigo ha supuesto la puesta en marcha del proyecto de investigación Tecnología electroquímica para la eliminación de pesticidas en aguas y suelos, conseguido por el Grupo de Tecnología Química y Medioambiental (Tequima) en la convocatoria competitiva del programa de Investigación Orientada a los Retos de la Sociedad del Ministerio de Economía y Competitividad y financiado con casi 500.000 euros.

El proyecto está codirigido por los catedráticos de Ingeniería Química Pablo Cañizares y Manuel Andrés Rodrigo. Cuenta con la participación del grupo de Ingeniería Geoambiental de la Escuela de Caminos, Canales y Puertos que dirige el catedrático de Ingeniería del Terreno Vicente Navarro, con la colaboración de varias universidades y engloba a 15 investigadores doctores. El mismo tiene por objetivo el desarrollo de tecnologías electroquímicas que posibiliten la remediación de suelos de baja permeabilidad, de aguas subterráneas contaminadas con pesticidas y el tratamiento de efluentes industriales procedentes de procesos de fabricación o de gestión de dichos compuestos. Este proyecto se basa en la utilización de dos infraestructuras singulares adquiridas gracias al programa INNOCAMPUS.

La actividad de CyTEMA se centra principalmente en tres ejes principales de actuación: mejora de la docencia y adaptación al Espacio Europeo de Educación Superior, mejora científica y de transferencia del conocimiento, y adaptación de los campus de la universidad para hacerlos más sostenibles.

Gabinete de Comunicación UCLM. Ciudad Real, 13 de octubre de 2014



## Reconocimiento al Profesor Antonio Antiñolo

El Consejo Social de la UCLM ha aprobado un reconocimiento al Profesor Antonio Antiñolo por su trayectoria y su labor en la UCLM. Desde la Facultad y la revista queremos sumarnos a este reconocimiento tan merecido a nuestro compañero.

PRESIDENTE  
DEL  
CONSEJO SOCIAL

MIGUEL PANADERO MOYA

Albacete, 13 de octubre de 2014

Universidad de Castilla-La Mancha  
Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas  
D. Antonio F. Antiñolo García  
Avenida de Camilo José Cela, 10  
13071 Ciudad Real

Estimado Profesor,

Me complace comunicarte que el Consejo Social de la Universidad de Castilla-La Mancha, reunido el pasado treinta de julio en sesión plenaria, acordó concederte el "Reconocimiento del Consejo Social 2014" en consideración a tu amplia y meritoria trayectoria como decano de tu Facultad y coordinador del Máster Universitario en Profesor de Educación Secundaria Obligatoria y Bachillerato, Formación Profesional y Enseñanza de Idiomas en nuestra Universidad.

Me satisface mucho poder transmitirte mi más sincera felicitación por la obtención de este galardón.

En breve nos pondremos en contacto contigo, ya que se está preparando un acto oficial para la entrega de estos Reconocimientos, en el que espero poder saludarte personalmente.

Recibe un cordial saludo.



## La UCLM reúne en un congreso internacional a 138 investigadores sobre energía y medio ambiente

La Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) acoge desde hoy la segunda edición del Congreso Internacional Energy and Environment Knowledge Week (E2KW), promovido por Campus de Excelencia Internacional CYTEMA (Campus Científico y Tecnológico de la Energía y el Medio Ambiente). La iniciativa, que se celebra en la Facultad de Ciencias Jurídicas y Sociales de Toledo, congrega 138 investigadores y especialistas de una decena de países.

La vicerrectora de Relaciones Internacionales y Formación Permanente, Fátima Guadamillas, que presidió el acto de apertura, subrayó la "gran actividad" del CYTEMA desde la obtención del distintivo Campus de Excelencia Internacional en 2011 y señaló la concesión de la calificación A, la máxima posible, tras haber sido evaluado en 2013 por una comisión internacional de expertos nombrada por el Ministerio de Educación, Cultura y Deporte. La profesora Guadamillas señaló también la importancia de la investigación básica "para hacer rentables las energías alternativas de las que empezaremos a depender en el futuro".

A lo largo de las dos jornadas que incluye el Congreso se darán a conocer trabajos de profesores universitarios e investigadores procedentes de una decena de países. Este evento multidisciplinar de carácter internacional permitirá discutir y presentar la investigación de vanguardia en materia de energía y medio ambiente en todos los posibles campos de estudio, al tiempo que dará a conocer en el panorama internacional la labor realizada por los grupos e investigadores de la UCLM. Así lo manifestó el coordinador del CYTEMA, Francisco Saez, quien señaló como leitmotiv del encuentro "el análisis de las distintas maneras de desarrollar energías sostenibles desde el punto de vista medioambiental, económico y social". El programa se desarrollará a través de veinte sesiones de presentaciones orales, para las que han remitido trabajos más de 140 autores de 33 universidades y centros públicos de investigación de todo el mundo, y una exhibición de 75 pósteres en torno a asuntos como las energías renovables, la eficiencia energética o la economía del medio ambiente, entre otros. Las sesiones plenarias y ponencias invitadas correrán a cargo de los investigadores de prestigio internacional Adisa Azapagic (University of Manchester), Chris Kummerow (Colorado State University) o James Clark (University of York).

En la inauguración del congreso, patrocinado por la Cátedra ENRESA-UCLM, ELCOGAS, INDRA, SOLARIA, ISFOC, la Fundación Repsol, el Parque Científico y Tecnológico de Albacete, el Centro Nacional del Hidrógeno (CNH2) y La Mancha D.O., participó también el director general de Universidades, Investigación e Innovación de la Junta de Comunidades, José Manuel Velasco, quien señaló que uno de los objetivos de la región es "seguir trabajando por la investigación en energía y medio ambiente", materias incluidas en el Programa Operativo FEDER Castilla-La Mancha 2014-2020.

Gabinete de Comunicación.  
Toledo, 30 de octubre de 2014



Alrededor de 400 doctorandos participan en las IV Jornadas Doctorales de la Universidad de Castilla-La Mancha que acoge la Facultad de Bellas Artes de Cuenca. Inauguradas por el rector de la Universidad regional, Miguel Ángel Collado, esta iniciativa busca reforzar la capacidad creativa y de estudio de los investigadores. Federico Mayor Zaragoza, catedrático de la Universidad Autónoma y presidente de la Fundación Cultura de Paz, ha impartido la primera ponencia de estas Jornadas.

La Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) acoge, en la Facultad de Bellas Artes de Cuenca, las IV Jornadas Doctorales de la Universidad de Castilla-La Mancha con el objetivo de contribuir a la formación y desarrollo de los doctorandos, y que han sido un éxito de participación y de resultados.

Inauguradas por el rector de la Universidad regional, Miguel Ángel Collado, y por el director de la Escuela Internacional de Doctorado, Ramón Varón, estas Jornadas son una ocasión para que entre los participantes fluyan sugerencias, formas de trabajar, críticas y cualquier otra aportación que pueda conducir a mejorar los estudios de doctorado. Dirigidas a toda la comunidad universitaria y a miembros de centros de investigación, públicos o privados, servirán para intercambiar ideas y experiencias entre doctorandos de las diferentes ramas de conocimiento y para poner de manifiesto los problemas actuales con los que se encuentran los estudiantes de doctorado.

Durante este encuentro, al que también ha asistido los vicerrectores de Cultura y Extensión Universitaria y de Investigación, María Ángeles Zurilla y Julián Garde, respectivamente, Miguel Ángel Collado ha señalado que esta cuarta edición impulsará las capacidades creativas de estudio e investigación entre los estudiantes de las diferentes titulaciones y promoverá nuevas ideas para la investigación en las diversas disciplinas. En ellas, además, los doctorandos inscritos podrán presentar un resumen y un póster que sirva para la difusión de la labor que están llevando a cabo. De entre ellos, se concederán premios a los dos mejores por cada una de las ramas de conocimiento –Artes y Humanidades, Ciencias, Ciencias de la Salud, Ingeniería y Arquitectura y Ciencias Sociales y Jurídicas-. A su vez, los diez seleccionados concurrirán a los premios convocados con motivo de las III Jornadas Doctorales del G9 que se celebrarán en Almagro, el 5 y 6 de noviembre. Federico Mayor Zaragoza, catedrático de la Universidad Autónoma de Madrid y presidente de la Fundación Cultura de Paz, ha sido el encargado de impartir la primera ponencia, Una nueva era: La sociedad del conocimiento. En ella ha resaltado la excelente iniciativa llevado a cabo por la Universidad de Castilla-La Mancha, que ha sido capaz de reunir en este encuentro a cerca de 400 doctorandos.

Ésta es una de las dos ponencias programadas en estas Jornadas. A ella le seguirá un debate relacionado con el tema de las Jornadas y una mesa redonda sobre el presente investigador y el futuro profesional de los doctorandos en las que intervendrán doctorandos y doctores, de manera que estén representadas las cinco ramas de conocimiento.

Gabinete de Comunicación UCLM.  
Cuenca, 7 de octubre de 2014





## Nuevos estudios acerca de la reactividad de Cisplatino: costes energéticos y selectividad en reacciones de sustitución

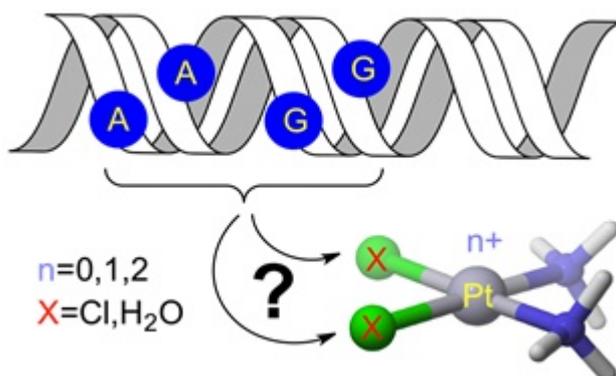
**Abel de Cózar**

**Departamento de Química Orgánica I UPVI**

Cisplatino es un compuesto inorgánico ampliamente usado en quimioterapia debido a su habilidad de unirse covalentemente al ADN, interfiriendo en el proceso de crecimiento de células cancerosas. A pesar de ser un fármaco conocido desde hace varias décadas, uno de los primeros pasos a la hora de estudiar su mecanismo de acción, consiste en establecer con qué componentes celulares puede reaccionar y porqué.

En esa dirección, la reactividad de cisplatino y sus derivados hidratados frente a diversos nucleófilos ha sido estudiado dentro del marco de la teoría de funcional de densidad (DFT).

Inicialmente se consideró al agua como nucleófilo, analizando los factores que afectan en la transformación de cisplatino en sus derivados hidratados, mucho más electrofílicos que el cisplatino. Para ello, se empleó la metodología desarrollada por Bickelhaupt et al. denominada 'activation strain model'. Además se consideraron otras especies nucleófilas como imidazol, guanina y adenina utilizadas como modelo para describir proteínas y ADN respectivamente.





### **Heterogeneous materials for energy conversion: what can we learn from quantum mechanics?**

**Prof. Ana Belén Muñoz-García**

**Departamento de Ciencias Químicas, área de Química Física. Universidad de Nápoles Federico II**

El crecimiento de la población mundial y el rápido desarrollo tecnológico que caracterizan nuestra época plantean serios problemas globales de índole ecológica, económica y social. Entre ellos, el inminente agotamiento de recursos energéticos fósiles y el aumento de CO<sub>2</sub> atmosférico son amenazas que deben ser atajadas urgentemente desde diversos frentes, entre ellos el de la comunidad científica.

La obtención de energía de fuentes renovables, su almacenamiento y posterior utilización limpia (bajo en emisiones de CO<sub>2</sub>) requiere el desarrollo y optimización de nuevas generaciones de materiales altamente eficaces y con funciones específicas. Esta ciencia de “materiales para la energía” es un campo multidisciplinar que abarca desde la comprensión fundamental de las relaciones entre la estructura (físico-química) de los materiales y sus propiedades macroscópicas hasta la síntesis y la implementación práctica en los dispositivos.

Cada vez más, los métodos computacionales se integran a los métodos experimentales en el proceso de caracterización y desarrollo de estos materiales. En particular, los métodos ab-initio (que no se basan en ningún dato experimental sino en las leyes de la mecánica cuántica) presentan la doble capacidad de ayudar a una interpretación detallada de los resultados experimentales y de servir como herramienta predictiva con la que diseñar a medida nuevos experimentos.

En la charla se analizaron los resultados de nuestros estudios ab-initio basado en la teoría del funcional de la densidad (DFT) de tres sistemas emergentes en el ámbito de la conversión de energía: pilas de combustible de sólido óxido (SOFCs), fotoelectrocatalizadores para el reciclaje de CO<sub>2</sub> en combustible y células solares sensibilizadas con colorante (DSSCs).

Del estudio sistemático de dos familias de materiales utilizados como cátodos en SOFCs (La<sub>1-x</sub>Sr<sub>x</sub>MO<sub>3</sub>; M=Mn, Fe, Co, Ni y Sr<sub>2</sub>Fe<sub>2-x</sub>MoO<sub>6</sub>). Se muestra como la estructura electrónica de los metales de transición condiciona la difusión de los iones óxido al interior del material, así como su capacidad catalítica. Buscando pistas sobre el mecanismo de reducción de CO<sub>2</sub> a CH<sub>3</sub>OH en electrodos de GaP, se analizaron las (inesperadas) características de la interfase GaP/H<sub>2</sub>O. Finalmente, se mostró como no solo el grupo de anclaje de los colorantes en la superficie de NiO sino también el modo de anclaje tienen una gran influencia en la eficiencia fotocatódica de las nuevas DSSCs de tipo tándem.

En todos los casos, se pone de manifiesto la capacidad de los métodos ab-initio de factorizar diversos aspectos de materiales heterogéneos y no uniformes y de ofrecer una descripción sea cualitativa que cuantitativa de los mismos.

# APERTURA DE CURSO

Hemos recibido algunas fotografías de la apertura de curso donde algunos profesores de la Facultad aparecen con el actual rey. Hemos querido contrastarlas con las que se hicieron durante la visita del "en su momento" príncipe de Asturias, para comprobar como pasa el tiempo.



## SCIFEST. NOVIEMBRE 2014. CUENÇA JORNADAS DE DIVULGACIÓN CIENTÍFICA

VIERNES 14NOVIEMBRE2014

19:00-  
19:30

**PRESENTACIÓN DE LAS JORNADAS**  
PRESENTACIÓN POR PARTE DEL COMITÉ ORGANIZADOR

19:30-  
20:30

**CHARLA INAUGURAL & MESA REDONDA**

TEMA: CLAVES Y ENIGMAS DE LA DIVULGACIÓN CIENTÍFICA

PONENTES: José Ramón Alonso, Bernardo Herradón, Jose Antonio López Guerrero y José Manuel López Nicolás.

MODERADOR: José Ramón Alonso

15:15-  
16:15

**ACTIVIDAD EN EL PLANETARIO**

16:15-  
18:00

**CICLO II: LA CIENCIA EN LA SOCIEDAD**  
MODERADOR: Bernardo Herradón

**CHARLA V: EL DR. FRANKENSTEIN Y LOS TRASPLANTES DE CEREBRO**  
PONENTE: JOSÉ RAMÓN ALONSO

Catedrático de Biología Celular y Director del Laboratorio de Plasticidad neuronal y Neuroreparación del Instituto de Neurociencias de Castilla y León.

SÁBADO 15NOVIEMBRE2014

10:00-  
11:30

**CICLO I: LA CIENCIA EN LA FICCIÓN**  
MODERADOR: Daniel Torregrosa

**CHARLA I: UN ANILLO PARA GOBERNARLOS A TODOS: DE LAS ENFERMEDADES RARAS AL VIRUS DEL EBOLA**

PONENTE: JOSÉ MANUEL LÓPEZ NICOLÁS

Profesor Titular de Bioquímica y Biología Molecular de la Universidad de Murcia. Director de la Diplomatura de Nutrición Humana y Dietética, Vicedecano de la Licenciatura de Ciencia y Tecnología de los Alimentos. Presidente de ADC Murcia

**CHARLA II: PEPI, LUCI, BOM Y OTROS VIRUS DEL MONTÓN**

PONENTE: ENRIQUE ROYUELA

Doctor en Virología. Editor de Principia.

**CHARLA VI: LOS VENENOS A TRAVÉS DE LA HISTORIA**  
PONENTE: DANIEL TORREGROSA

Químico y autor del blog de divulgación científica "Ese Punto Azul Pálido"

**CHARLA VII: LA DIVULGACIÓN CIENTÍFICA EN LA EDUCACIÓN SECUNDARIA**  
PONENTE: MARTA PÉREZ FOLGADO

Geóloga, redactora de Jof y profesora de enseñanza secundaria

**CHARLA VIII: BUSCO DIVULGADOR PARA RELACIÓN ESTABLE**  
PONENTE: ANA RIBERA "MOLINOS"

Autora del blog Cosas que (me) pasan, redactora en Jof. También ha escrito un libro: "Una madre SIN superpoderes"

**CHARLA XI: ¿SOLO LOS CIENTÍFICOS MEDIOGRES PODEMOS SER DIVULGADORES?**

PONENTE: JOSÉ ANTONIO LÓPEZ GUERRERO

Profesor Titular de Microbiología y Director del grupo de investigación sobre la neuropatología asociada a herpes simplex | Director del Departamento de Cultura Científica del Centro de Biología Molecular Severo Ochoa (UAM-CSIC)

20:00-

**CLAUSURA DE LAS JORNADAS**

11:45-  
12:45

**CHARLA PALEOGEOLÓGICA: DE "LAS HOYAS" A "LO HUECO"**

PONENTE: NAHÚM MÉNDEZ CHAZARRA

Geólogo y autor del blog de divulgación científica "Un geólogo en apuros"

13:00-  
15:00

**DESCANSO - COMIDA**

15:00-  
15:15

**ENTREGA DE LOS PREMIOS DEL II CONCURSO DE DISEÑO: SISTEMA PERIÓDICO DE ELEMENTOS**

Julián Rodríguez

Presidente de la Sección Territorial de Castilla La Mancha de la Real Sociedad Española de Química

18:00-  
18:15

**DESCANSO**

**CHARLA IX: TECNOLOGÍA SANITARIA**  
PONENTE: CÉSAR SANCHEZ

Director de la Escuela Politécnica de Cuenca

**CHARLA X: LA DIVULGACIÓN EN LOS MEDIOS DE COMUNICACIÓN**  
PONENTE: MANUEL SEARA

Biólogo, Director y presentador de del programa de divulgación científica "A HOMBROS DE GIGANTES" en Radio 5 TODO NOTICIAS (RNE)

## Miércoles, 12 de Noviembre de 2014

9:00 h: Comienzo de la 3ª “Olimpiada Científico-Técnica” de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas para alumnos de enseñanza secundaria.

9:30 h: Simposio Regional Educativo “San Alberto Magno”, inaugurado por las autoridades académicas.

10:15 h: Conferencia “San Alberto Magno”.

14:00 h: Finalización de la 3ª “Olimpiada Científico-Técnica” de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas para alumnos de enseñanza secundaria.

14:00 h: Toma fotográfica en la puerta de la Facultad.

14:30 h: Confraternización gastronómica y entrega de premios de la 3ª Olimpiada Científico-Tecnológica.

## Jueves, 13 de Noviembre de 2014

12:30 h: Acto de entrega de premios:

- XXIV Certamen Fotográfico “San Alberto Magno”.
- V Concurso Gastronómico “San Alberto Magno”.
- Premios de las competiciones deportivas.
- XIV PREMIO REPSOL al mejor proyecto relacionado con la Ingeniería de Procesos.
- XVI PREMIO AQUAGEST al mejor proyecto relacionado con el Tratamiento de Aguas.

## Viernes, 21 de Noviembre de 2014

19:00 h: Acto Académico de Graduación de las promociones 2013-2014.

## FESTIVIDAD DE SAN ALBERTO MAGNO - 2014 FACULTAD DE CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS

UNIVERSIDAD DE CASTILLA-LA MANCHA

*El Decano de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de la Universidad de Castilla-La Mancha tiene el honor de invitarle a los actos que con motivo de la festividad de San Alberto Magno tendrán lugar en nuestra Facultad.*

### PROGRAMA

#### Lunes, 10 de Noviembre de 2014

10:00 h: Rueda de prensa del Decano sobre la festividad de San Alberto Magno, patrón de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de la UCLM.

- Las obras del XXIV Certamen Fotográfico “San Alberto Magno” quedarán expuestas a partir de este día en el Hall de la Facultad.
- Los pósters de los profesores de la Facultad quedarán expuestos a partir de este día en los edificios de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas.
- Presentación de las actividades deportivas

#### Martes, 11 de Noviembre de 2014

8:30 h: Actividades deportivas “Torneo Fútbol-Sala”.

9:00 h: Actividades deportivas: “Torneo Pádel”.

12:00 h: Presentación de platos y evaluación del jurado del IV Concurso Gastronómico.

13:30 h: Degustación de los platos del V Concurso Gastronómico “San Alberto Magno” en el Hall de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas.

## SIMPÓSIO REGIONAL EDUCACIONAL "SAN ALBERTO MAGNO"

### ORGANIZA:

FACULTAD DE CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS  
Universidad de Castilla-La Mancha

### INFORMACIÓN:

Decanato de la Facultad  
Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas  
Avda. Camilo José Cela, 10  
Campus Universitario de Ciudad Real  
13004 Ciudad Real

FAX 926295318

☎ 926295319

e-Mail: [Carmen.mconsuegra@uclm.es](mailto:Carmen.mconsuegra@uclm.es)

<http://www.uclm.es/cr/fquimicas>

## SIMPÓSIO REGIONAL EDUCACIONAL "SAN ALBERTO MAGNO"

Este Simposio es una de las actividades que, bajo diferentes denominaciones, se han venido celebrando tradicionalmente en nuestra Facultad en los últimos años. El objetivo es continuar estrechando la relación entre los docentes universitarios y los profesores de los IES y de Formación Profesional de Castilla-La Mancha implicados en enseñanzas que tienen relación con la Química, Ingeniería Química y Ciencia y Tecnología de los Alimentos. Es un marco donde compartir experiencia y conocimientos mejor, para facilitar la conexión entre enseñanza secundaria, la formación profesional y universidad.

### LUGAR Y FECHA DE CELEBRACIÓN

Las actividades se celebrarán en el Salón de Actos de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de la UCLM, el día 12 de Noviembre de 2014.

### INSCRIPCIÓN

La inscripción puede hacerse on-line en la página Web de la Facultad, por correo electrónico o por teléfono. La cuota de inscripción es de 15,00 €, se abonará el mismo día 12 al comienzo del Simposio. Esta cuota incluye la documentación, comida y fotografía.

## XIV Simpósio Regional Educacional "San Alberto Magno"

*La Educación en Química, Ingeniería Química, y  
Ciencia y Tecnología de los Alimentos*

FACULTAD DE CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS  
QUÍMICAS DE LA UCLM



Ciudad Real  
12 de noviembre de 2014



### PROGRAMA

- 9:30 h: Recepción de participantes.
- 9:45 h: Acto de Apertura del Simposio, presidido por las Autoridades Académicas de la Universidad y del Centro.
- 10:00 h: Presentación de la 3ª Olimpiada Científico-Técnica de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas.
- 10:15 h: Conferencia San Alberto Magno: "Enseñanzas relacionadas con la Química: Fomento del aprendizaje por indagación y del pensamiento crítico". Prof. Gabriel Pinto Cañón. Departamento de Ingeniería Química. Universidad Complutense de Madrid.
- 11:00 h: Receso.
- 11:30-12:15 h: Sesión sobre el futuro de las enseñanzas universitarias (4+1; 3+2; 4+1+1 ?)
- 12:15-13:00 h: Mesa redonda "Las nuevas pruebas de acceso a la Universidad". Preside: Doña Beatriz Cabañas Galán, Vicerrectora de Estudiantes. UCLM.
- 13:00-14:00 h: Actividades de la Facultad en relación a enseñanza secundaria.
- Coordinador: Don Ángel Ríos Castro. Decano de la Facultad.
- Intervienen:**
- Doña Sonia Merino Guijarro, Coordinadora Olimpiada Científico-Técnica.
  - Don Agustín Lara, Coordinador del Campus Científico de Verano.
  - Don Manolo Rodrigo, Coordinador de las Actividades de iniciación a la Investigación.
- 14:00 h: Toma fotográfica
- 14:30 h: Comida
- 16:00 h: Acto de entrega de premios de la Olimpiada Científico-Técnica de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas.

## En el próximo número de Molécula...

Como es habitual, el próximo número de MOLÉCULA será monográfico y dedicado a las celebraciones de San Alberto Magno.

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