

Presentación	P. 2
Investigación. Algunas aplicaciones:	
- Publicación en Chemical Reviews	P. 3
- Publicación en Nature Communications	P. 4
Conferencias y Tesis:	
- Investigación Biomedicina y Biotecnología	P. 5
- Aportaciones de la Química a la Alimentación	P. 7
- Tesis Manuel Honrado Diaz del Campo	P. 8
- Tesis Fernando León Cedeño	P. 9
- Tesis Leticia I. Cabezas Bermejo	P. 11
- Tesis José Ramón Ramírez Ruiz	P. 12
- Tesis Alberto Juan Ruiz del Valle	P. 14
- Tesis Dora Blanco Vega	P. 15
Actividades:	
- ¡ Estáis hechos unos elementos!	P. 16
- Los avances de la Química y su impacto en la sociedad	P. 17
Workshop en Ingeniería Química	P. 18
Entrevista a Carolina Gomez Turrillo	P. 22

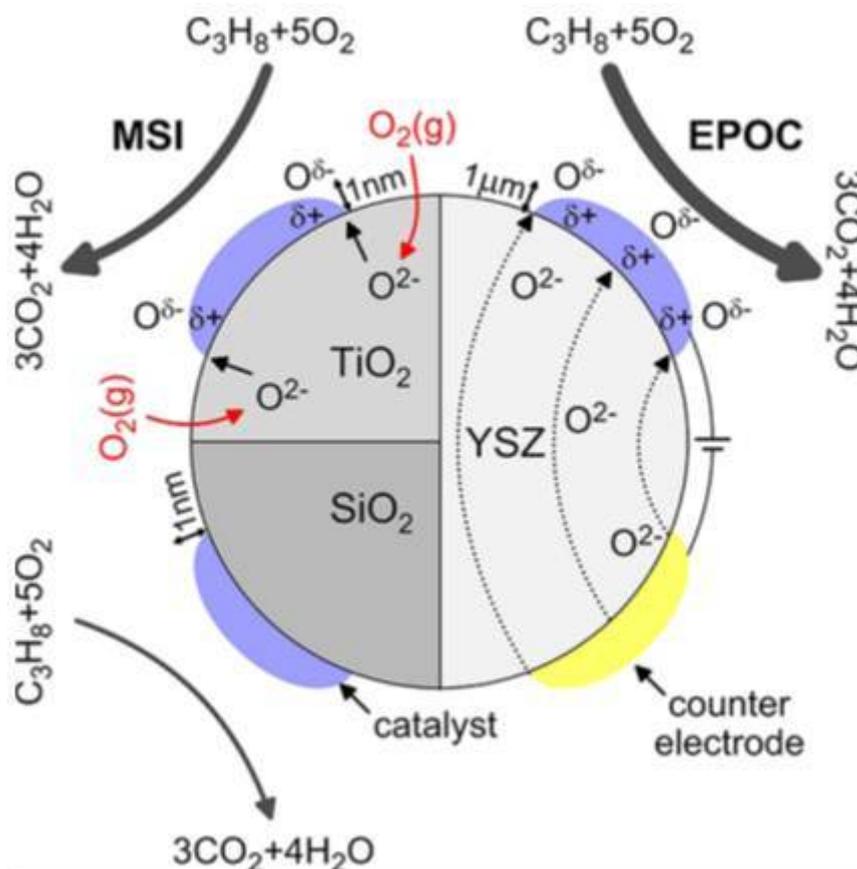
## PRESENTACIÓN

En el primer número de 2014 se ha producido la incorporación de Consuelo Díaz-Maroto al equipo editorial a la que damos la bienvenida así como agradecemos la participación de Ana Briones y María Arévalo durante 2013. En este número hemos recogido las Tesis defendidas en los últimos meses, un resumen del Workshop en Ingeniería Química celebrado en Noviembre y dos contribuciones importantes de investigadores de nuestro centro en Chemical Reviews y Nature Communications. También algunas informaciones que pueden ser de interés y en la sección de cafetería una entrevista a Carolina Gómez ejecutiva del IRICA.

Antonio de la Hoz Ayuso

# INVESTIGACIÓN

Dos profesores de la Facultad participan en la publicación de un artículo de investigación en la prestigiosa revista Chemical Reviews



Los profesores del Departamento de Ingeniería Química de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de la Universidad de Castilla La Mancha, Dr. José Luis Valverde Palomino y Dr. Antonio de Lucas Consuegra, han participado en la publicación del artículo "Ionically Conducting Ceramics as Active Catalyst Supports", Chem. Rev., 2013, 113 (10), pp 8192–8260.

La revista Chemical Reviews con un índice de impacto en 2012 de 41,298 es la revista internacional más importante en el campo de la Química y la cuarta revista con mejor índice de impacto de todas las revistas científicas existentes, estando por delante de revistas como Science y Nature.

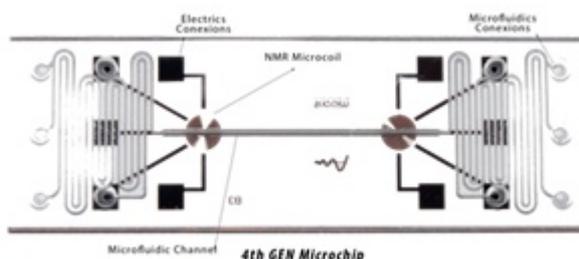
La publicación llevada a cabo en colaboración con investigadores de extraordinario prestigio a nivel internacional como los profesores Costas Vayenas de la Universidad de Patras en Grecia o el Dr. Philippe Vernoux de la Universidad de Lyon en Francia, recopila los resultados más relevantes sobre la utilización de conductores iónicos en catálisis heterogénea. De este modo la publicación científica recoge los últimos avances del fenómeno de promoción electroquímica de la catálisis, uno de los últimos descubrimientos que han tenido lugar en el campo de la Catálisis. Este fenómeno de extraordinario interés tanto desde un punto de vista científico como tecnológico permite llevar a cabo la activación de catalizadores heterogéneos por vía electroquímica, mejorando la actividad y la selectividad de los mismos. De este modo se puede mejorar de forma extraordinaria el comportamiento (la cinética) de una reacción química, facilitando sus condiciones de operación (consumiendo menos recursos energéticos).

## Espectroscopia de RMN multinuclear en una (1D) y dos dimensiones (2D) con tan sólo una bobina de radiofrecuencia.

Un equipo de investigadores, donde uno de sus integrantes es M. Victoria Gómez Almagro del grupo de Microondas en Química Orgánica Sostenible de esta Facultad, ha publicado recientemente un artículo en la revista Nature Communications, sobre un avance importante en el mundo de la espectroscopia de Resonancia Magnética Nuclear (RMN). En este trabajo se describe la detección de una gran variedad de núcleos atómicos y la realización de una gran selección de experimentos, homo- y heteronucleares, en una (1D), y en dos dimensiones (2D), con tan solo una bobina o “antena” de radiofrecuencia, en comparación con los aparatos de RMN convencionales, donde son necesarias varias bobinas para detectar una variedad de núcleos distintos, además de circuitos muy sofisticados y costosos. El fundamento de la espectroscopia de RMN se puede relacionar con lo que ocurre en la radio, donde se necesitan sintonizar las distintas frecuencias para poder escuchar las distintas emisoras. Pues bien, con esta “mini-antena” o microbobina (con una reducción en tamaño de 20.000 veces con respecto a las bobinas convencionales) es posible escuchar todas las emisoras a la vez, sin necesidad de sintonizar ninguna frecuencia. Aunque escuchar todas las frecuencias de forma simultánea no tiene importancia en la radio, este resultado científico abre un gran campo de aplicación para los aparatos de RMN.

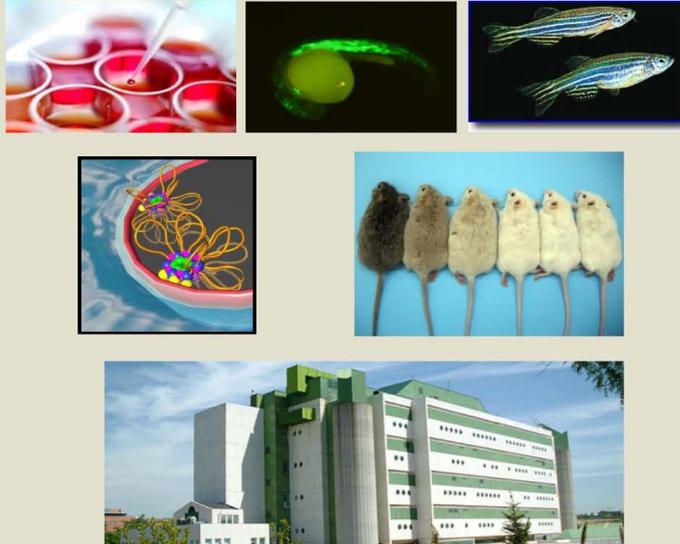
Este hecho es debido a que se ha observado que estas mini antenas desarrolladas por un equipo de investigadores de la Universidad de Castilla-La Mancha, Universidad de Wageningen (Holanda), Universidad de Twente (Holanda) y la empresa Extra Byte (Italia), tienen comportamiento de banda ancha, y pueden funcionar en un amplio rango de frecuencias con características similares, permitiendo trabajar a diferentes frecuencias de forma simultánea, lo que en la práctica supone reducir enormemente la complejidad de los aparatos de RMN comerciales, o lo que es lo mismo, reducir enormemente el coste de uno de los componentes principales de un espectrómetro de RMN, la parte que recibe y transmite la señal de RMN. Además, para llevar a cabo toda la variedad de experimentos, solo ha sido necesaria una pequeña cantidad de muestra, en el orden de 25 nanolitros, y en el orden de nanomoles, lo que lo hace aún más interesante para estudiar una variedad distinta de aplicaciones.

Estas “mini-antenas” o microbobinas se pueden usar en los equipos de RMN actuales, y también tienen un amplio campo de futuro en el desarrollo de equipos de RMN miniaturizados.



[Raluca M. Fratila, M. Victoria Gomez, Stanislav Sykora & Aldrik H. Velders. Multinuclear nanoliter one-dimensional and two-dimensional NMR spectroscopy with a single non-resonant microcoil. Nature Communications, January 2014. DOI: 10.1038/ncomms4025](#)

## Investigación en Biomedicina y Biotecnología



### **Explorando las regiones no codificantes del genoma: los aisladores genómicos**

Dr. Eduardo Moltó Pérez.

Profesor Área Bioquímica. Facultad de Ciencias  
Ambientales y Bioquímica de Toledo

**FECHA: JUEVES 12 DICIEMBRE 2013**

**HORA: 12:30 pm**

**LUGAR: SALÓN ACTOS FAC. DE CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS  
QUÍMICAS. UCLM (Ciudad Real).**

Cartel donado por la Facultad de Ciencias Ambientales y  
Bioquímica de Toledo. UCLM

El área de Bioquímica de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de la UCLM, ha invitado al profesor de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) Eduardo Moltó, a impartir, en Ciudad Real, la conferencia sobre el genoma que dictó en el II Ciclo de Seminarios en Investigación en Biomedicina y Biotecnología de la Facultad de Ciencias Ambientales y Bioquímica de Toledo.

El profesor Moltó desarrolló y defendió su tesis doctoral en el área de Bioquímica de la Facultad de Químicas de la UCLM y posteriormente realizó una estancia posdoctoral en el Centro Nacional de Biotecnología del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CNB-CSIC) antes de incorporarse como profesor a la UCLM.

En esta conferencia el Dr. Eduardo Moltó abordó un tema apasionante: la genómica funcional aplicada a la identificación y caracterización de unas secuencias reguladoras del genoma que se denominan aisladores genómicos o fronteras (del inglés, boundaries o insulators).

Estas secuencias tienen un gran potencial biotecnológico en la generación de organismos transgénicos para el estudio de diferentes enfermedades, “ya que su utilización garantiza una expresión constante del transgén, independiente del lugar donde se inserte en el genoma, mejorando la eficiencia del proceso de transferencia génica”, según ha señalado con anterioridad.

En el seminario se mencionaron los diferentes métodos que se han utilizado en el laboratorio de Modelos Animales por Manipulación Genética del CNB-CSIC para la evaluación de estas actividades. Estos experimentos, realizados tanto in vitro como in vivo, fueron llevados a cabo por el profesor Moltó bajo la dirección del investigador principal de este laboratorio y presidente de la Sociedad Internacional para las Tecnologías Transgénicas, Lluís Montoliu, durante su estancia en el CSIC.

FECHA SEMINARIO: JUEVES 12 DICIEMBRE 2013

HORA: 12:30 pm

LUGAR: SALÓN ACTOS FACULTAD DE CIENCIAS Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS (Ciudad Real).

## Aportaciones de la Química a la Alimentación

El pasado día 11 de diciembre de 2013, José Antonio Murillo Pulgarín impartió una conferencia sobre “Aportaciones de la Química a la Alimentación” en el Aula Enrique Rodríguez de la Rubia de la Escuela de Ingenieros Agrónomos de Ciudad Real. La conferencia estuvo organizada por Andrés Moreno Moreno, Coordinador del Programa Universitario para Mayores “José Saramago” de nuestra Universidad.

La Química está presente en todos los procesos y las actividades humanas. Mientras respiramos, hacemos la digestión, crecemos, envejecemos e incluso pensamos, estamos realizando procesos químicos. Los alimentos no iban a ser menos y son “todo química”: proteínas, hidratos de carbono y grasas (lípidos), además del agua que bebemos y el oxígeno que respiramos.

Durante los próximos 30 años, la población mundial aumentará en unos 2.500 millones de personas que necesitarán alimento, proteger su salud y vivir en un entorno acogedor. Ya hoy día una gran parte de la humanidad no está suficientemente nutrida y en los países más pobres la esperanza de vida se encuentra entre los 40 y los 50 años, frente a los cerca de 75 en los países desarrollados. Más de 800 millones de personas no tienen ni siquiera acceso a agua potable. Para superar todas estas carencias, será la Química la Ciencia a la que tendremos que acudir durante el siglo XXI.

En palabras de Koïchiro Matsuura, anterior Director General de la UNESCO, “es indudable que la Química desempeñará un papel muy importante en el desarrollo de fuentes alternativas de energía y la alimentación de la creciente población mundial”.



Programa Universitario para Mayores  
José Saramago

### Conferencia

## APORTACIONES DE LA QUÍMICA A LA ALIMENTACIÓN

**José Antonio Murillo Pulgarín**  
Catedrático de Química Analítica

Miércoles, 11 de diciembre de 2013  
Escuela de Ingenieros Agrónomos  
Aula Enrique Rodríguez de la Rubia  
17:00 horas, Ciudad Real.

Departamento de Química Analítica y Tecnología de Alimentos.  
Universidad de Castilla-La Mancha

UCLM  
UNIVERSIDAD DE CASTILLA-LA MANCHA

Cartel del Evento



## INICIADORES DE MAGNESIO Y ZINC ESTABILIZADOS CON LIGANDOS ESCORPIONATO APLICADOS AL DISEÑO DE POLÍMEROS BIODEGRADABLES

DOCTORANDO: Manuel Honrado Díaz del Campo

DIRECTORES: Dr. Juan Fernández Baeza y Dr. Luis F. Sánchez-Barba Merlo

En este trabajo se han preparado diferentes entidades organometálicas quirales y enantioméricamente puras de Magnesio y Zinc, que contienen un ligando auxiliar alquilo, amido o fenóxido y se encuentran estabilizadas por la coordinación de ligandos polifuncionales heteroescorpionato de tipo NNO, NNCp y NNN basados en unidades bis(pirazol-1-il)metano. Estos compuestos han sido empleados como catalizadores en la polimerización por apertura de anillo de ésteres para la producción de materiales biodegradables y biocompatibles.

Inicialmente, se sintetizaron compuestos monómeros, dímeros y dinucleares de estequiometría  $[Zn(R)(^3\text{-NNO})]$ ,  $[Zn(R)(^2\text{-NN-}\mu\text{-O})_2]$  y  $[Zn(R)(^3\text{-NNO})Zn(R)_2]$  (R = alquilo o amido) mediante reacción de protonólisis de los ligandos heteroescorpionato tipo NNO y el correspondiente alquilo o amido de zinc en proporción molar 1:1 ó 1:2, respectivamente. Estos compuestos también se emplearon como productos de partida para la obtención de nuevos catalizadores con diferentes geometrías y ligandos auxiliares. Así, por reacción de éstos con fenoles o tiofenoles se obtuvieron complejos fenóxido y mixtos alquilo/fenóxido o tiofenóxido de estequiometría  $[Zn(OAr)(^2\text{-NN-}\mu\text{-O})_2]$  y  $[(ZnR)_2(^2\text{-NN-}\mu\text{-O})(\mu\text{-EAr})]$  (R = alquilo) (E = O, S), respectivamente. Todos ellos fueron activos en la polimerización de apertura de anillo de ésteres cíclicos, siendo los compuestos fenóxido y alquilo/fenóxido o tiofenóxido preparados más activos y selectivos que los correspondientes complejos de partida. En concreto, para el caso del monómero de rac-lactida, el compuesto enantioméricamente puro  $[(ZnCH_2SiMe_3)_2(R,R\text{-bpzmm})(\mu\text{-EAr})]$  fue moderadamente isoselectivo.

Con el objetivo de mejorar los resultados obtenidos en la catálisis, se preparó un nuevo ligando híbrido heteroescorpionato/ciclopentadienilo enantioméricamente puro de tipo NNCp, realizándose posteriormente su transferencia a Mg y Zn. De este modo, se obtuvieron compuestos de estequiometría  $[Mg(R)(^2\text{-}^5\text{-R,S-bpmycp})]$  y  $[Zn(R)(^2\text{-}^1\text{-R,S-bpmycp})]$  (R = alquilo). Estos complejos superaron la actividad catalítica mostrada por los derivados NNO descritos con anterioridad. De un modo interesante, en la polimerización de rac-lactida, el catalizador  $[(Zn(Et)(^2\text{-}^1\text{-R,S-bpmycp})]$  realizó el proceso de forma isoselectiva, ( $P_i = 0.77$ ), polimerizando preferentemente el monómero de L-LA frente al de D-LA. Cabe destacar, que este es el primer compuesto de zinc enantioméricamente puro descrito hasta la fecha capaz de aportar este valor de tacticidad.

Finalmente, se preparó una nueva familia de ligandos heteroescorpionato tipo NNN a partir de cetaniminas, con el propósito de incrementar la congestión estérica sobre el centro metálico y así, superar los resultados obtenidos en la catálisis. En su transferencia a Magnesio y Zinc se generaron complejos de geometría pseudotetraédrica de estequiometría  $[M(R)(^3\text{-NNN})]$  (M = Mg, Zn) (R = alquilo) y pseudooctaédrica de tipo  $[Mg(^3\text{-NNN})_2]$ . Comparativamente, el empleo de estos catalizadores en la polimerización de rac-lactida supuso un incremento sustancial de la actividad catalítica respecto a la mostrada por los compuestos evaluados anteriormente.



## SÍNTESIS DE BISTRIAZINAS CON APLICACIÓN EN QUÍMICA DE MATERIALES MEDIANTE METODOLOGÍAS DE QUÍMICA SOSTENIBLE.

DOCTORANDO: FERNANDO LEÓN CEDEÑO

DIRECTORES: Dr. Antonio de la Hoz Ayuso, Dra. Ana María Sánchez-Migallón Bermejo



La 1,3,5-triazina es un sistema interesante con aplicaciones en muchos campos. El interés por sintetizar este tipo de compuestos es por su posible utilidad en química supramolecular y de materiales porque puede presentar todas las posibles interacciones y su carácter depende fuertemente de la sustitución. Esta Tesis describe la síntesis de bis(1,3,5-triazinas) conectadas entre sí por una estreptocianina (un polimetino), el cual podría funcionar como un cable molecular, extendiendo las relaciones dador-aceptor que se presentan en las 1,3,5-triazinas sustituidas con grupos amino.

En la Tesis se describen las síntesis de dos series de bistriazinas.

En la primera serie, los dos sistemas de triazinas no están totalmente conjugadas. Los compuestos se obtuvieron en tres etapas. La primera etapa consistió en reacciones de sustitución nucleofílica aromática sobre cloruro de cianurilo, empleando diferentes aminas para obtener 1,3,5-triazinas disustituidas. En una segunda etapa, se introdujo un grupo para-feniléndiamino para obtener 1,3,5-triazinas trisustituidas.. En la tercera etapa se hicieron reaccionar las 1,3,5-triazinas trisustituidas con 1,5-diazapentadienos para obtener los dímeros finales. De esta serie de compuestos se describen cuatro productos finales.

En la segunda serie de compuestos, la síntesis de los mismos implicó la formación del anillo de la 1,3,5-triazina por reacción de N-cianoguanidina con los tres isómeros de aminobenzonitrilo. De esta manera se obtuvieron derivados de 2,4-diamino-6-amilaminotriazinas, que se hicieron reaccionar nuevamente con 1,5-diazapentadienos y con derivados del malonodialdehído. Al final obtuvieron un total de cinco compuestos diméricos finales, en este caso con una elevada conjugación.

Todos los compuestos se caracterizaron por espectroscopia de RMN mono y bidimensional ( $^1\text{H}$  y  $^{13}\text{C}$ ), IR y MALDI.

Los compuestos obtenidos presentan múltiples posibilidades conformacionales y configuracionales. Se llevaron a cabo cálculos de química computacional que sirvieron para determinar la estructura más estable de cada compuesto y corroborar los resultados obtenidos por RMN. También se realizaron estudios de UV-Visible y fluorescencia para determinar las propiedades optoelectrónicas de los compuestos finales, y se determinó el rendimiento cuántico de dos de los productos obtenidos. Se estudiaron el efecto de numerosos

## SÍNTESIS DE BISTRIAZINAS CON APLICACIÓN EN QUÍMICA DE MATERIALES MEDIANTE METODOLOGÍAS DE QUÍMICA SOSTENIBLE.

DOCTORANDO: FERNANDO LEÓN CEDEÑO

DIRECTORES: Dr. Antonio de la Hoz Ayuso, Dra. Ana María Sánchez-Migallón Bermejo

parámetros en los espectros de absorción y de emisión, tales como el disolvente, la concentración, la temperatura o el pH. De esta manera se pudo determinar la influencia que tiene la agregación de los compuestos sobre las propiedades ópticas. Por otra parte, es destacable el aumento de la fluorescencia que se produce en medio básico, en el isómero p-disustituido, el cual se atribuye a un aumento de la conjugación y la transformación del compuesto en un sistema Dador-Aceptor. Los cálculos computacionales de los orbitales HOMO-LUMO están de acuerdo con lo observado en los espectros de UV-vis. Finalmente se realizaron estudios del grado de agregación de dos productos, representando a cada una de las dos series de los compuestos obtenidos, por estudios de UV-Visible en función de la temperatura, así como por RMN, mediante experimentos DOSY.

Se sintetizaron un total de nueve compuestos no descritos en la literatura, estudiando su estructura, su grado de agregación y especialmente sus propiedades optoelectrónicas. Consideramos que este trabajo es una aportación novedosa sobre los compuestos derivados de s-triazina conectados entre sí por una cadena de polimetino (estreptocianina). Se abordaron con éxito la realización de cálculos computacionales tanto de la estructura de los compuestos sintetizados, como de los orbitales frontera y del tipo de agregación que pueden presentar este tipo de compuestos.

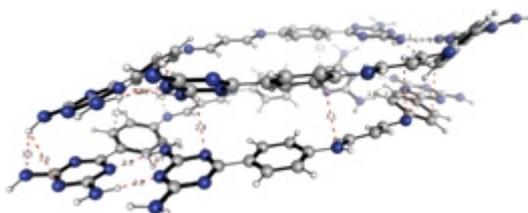


Figura 1 Estructura supramolecular de una bistriazina

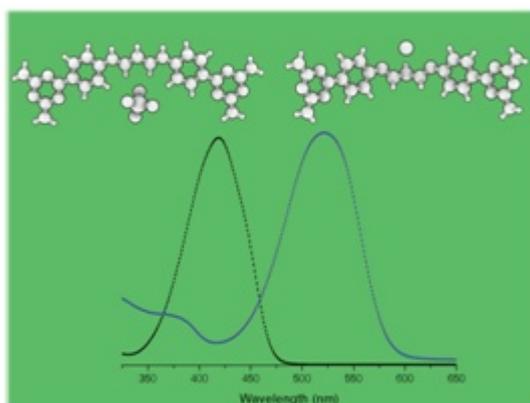


Figura 2 Variación de los espectros de emisión en medio básico

## “SYNTHESIS OF IMPREGNATED BIODEGRADABLE SCAFFOLDS IN SUPERCRITICAL CARBON DIOXIDE”

DOCTORANDO: Leticia Isabel Cabezas Bermejo

DIRECTORES: Dr. Juan Francisco Rodríguez Romero y Dr. Ignacio Gracia Fernández

Durante los últimos años, la medicina regenerativa está experimentando notables cambios debido, en parte, a los avances actuales en ingeniería biomédica y biotecnología. Particularmente, la reconstrucción de tejidos “a la carta” asistida por células madre se ha convertido en uno de los más prometedores campos de estudio. A este respecto se ha reconocido que los materiales porosos biodegradables tienen un potencial significativo, actuando como soporte, en la dirección del proceso de reconstrucción tisular. Estos andamiajes celulares temporales permiten el sembrado y crecimiento celulares, tanto *in vitro* como *in vivo*, y dan como resultado un tejido regenerado o un sustituto apto para trasplantes. Además son susceptibles de incorporar otras sustancias que promuevan dicho desarrollo tisular, como factores de crecimiento, o incluso principios activos que permitan tratamientos paralelos a través de su liberación controlada, como antibióticos, antiinflamatorios o antineoplásicos.

Teniendo en cuenta estas premisas, se decidió explorar la posibilidad de crear andamiajes porosos biodegradables e impregnarlos con varios fármacos, utilizando el dióxido de carbono supercrítico (scCO<sub>2</sub>) como tecnología limpia en el proceso de espumación e impregnación de los monolitos. Así, se combinaron las ventajas de un proceso eficiente con la obtención de muestras totalmente libres de disolventes orgánicos o trazas de monómero que deberían ser exhaustivamente eliminados en etapas posteriores, con el considerable incremento en los costes del proceso.

Para ello, en primer lugar se sintetizó el copolímero poli(D,L-lactida-co-glicolida) (PLGA) mediante polimerización en masa, proceso que fue optimizado usando la metodología de superficie de respuesta para obtener un modelo de caja negra que lo describa y prediga las mejores condiciones experimentales para la obtención del copolímero (y también del homopolímero) como materia prima en la siguiente etapa de la investigación.

Seguidamente, se investigó la etapa de procesado e impregnación para dos fármacos diferentes, el antineoplásico 5-fluorouracilo y el antiinflamatorio indometacina, valorándose parámetros como la velocidad de agitación, el venteo o el tipo de polímero utilizado. La impregnación tuvo lugar siempre de manera homogénea y no se apreciaron diferencias evidentes entre el uso de un principio activo u otro.

Finalmente, se evaluó la liberación de los fármacos impregnados en estos dispositivos mediante ensayos *in vitro* de 24 h de duración. Los perfiles de liberación revelaron que la naturaleza hidrófoba o hidrófila del fármaco impregnado ejerce una enorme influencia en la cinética del proceso. Además, se propuso un modelo matemático, no descrito previamente en bibliografía, válido en general para los todos los procesos descritos en la literatura. Este modelo ajustó adecuadamente ambos tipos de perfiles pese a sus formas tan diferenciadas y proporcionó el valor de parámetros físicos como el de transferencia de materia, las constantes de difusión y las constantes cinéticas de degradación del polímero.



## SÍNTESIS SOSTENIBLE DE NUEVOS DERIVADOS DE TRIAZINA. ESTUDIO DE SUS PROPIEDADES ÓPTICAS.

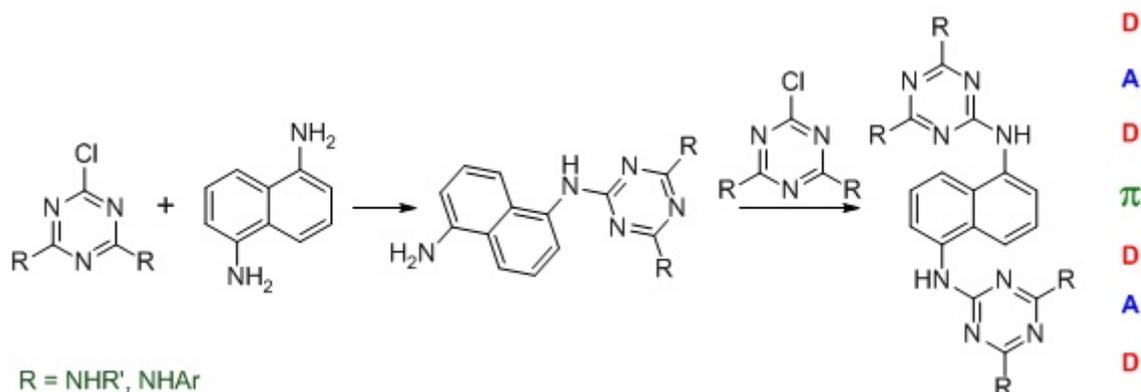
DOCTORANDO: José Ramón Ramírez Ruiz

DIRECTORES: Dra. Ana M<sup>a</sup> Sánchez Migallón Bermejo, Dr. Antonio de la Hoz Ayuso

El anillo de 1,3,5-triazina es un heterociclo electroattractor que sirve de base para numerosos compuestos orgánicos. Este tipo de compuestos presenta propiedades interesantes en campos tan diversos como los fármacos, herbicidas, química supramolecular, dispositivos optoelectrónicos o ciencia de materiales.

Empleando la radiación microondas como fuente de energía, hemos logrado sintetizar nuevos derivados de 1,3,5-triazina, siguiendo una metodología medioambientalmente benigna, con tiempos cortos de reacción, sin disolvente y con una etapa de purificación simple.

Dado que el anillo heteroaromático de 1,3,5-triazina es electroattractor se han incorporado sustituyentes dadores, que darían sistemas dador-aceptor, como los que se muestran en el esquema 1.



Esquema 1. Síntesis de mono y bistriazinas con 1,5-diaminonaftaleno.

Se han estudiado las propiedades ópticas de estos sistemas de bistriazina, obteniendo en algunos casos rendimientos cuánticos excelentes, llegando hasta un valor de 0,87 en el caso de la bistriazina que se muestra en la figura 2. Este hecho es importante de cara a una posible aplicación en la fabricación de dispositivos optoelectrónicos, como OLEDs.

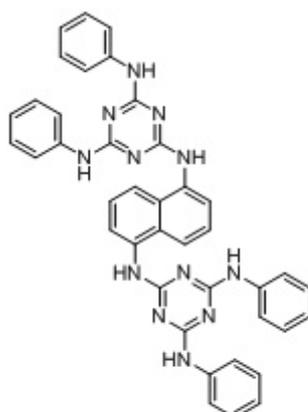


Figura 2. Bistriazina con un rendimiento cuántico de 0,87.

## SÍNTESIS SOSTENIBLE DE NUEVOS DERIVADOS DE TRIAZINA. ESTUDIO DE SUS PROPIEDADES ÓPTICAS.

DOCTORANDO: José Ramón Ramírez Ruiz

DIRECTORES: Dra. Ana M<sup>a</sup> Sánchez Migallón Bermejo, Dr. Antonio de la Hoz Ayuso

Se han acoplado sustituyentes con buenas propiedades supramoleculares y de coordinación, como el aminoácido glicina (figura 3).

El derivado de fenilo se muestra como un sensor específico para el  $Zn^{2+}$ , mientras que el derivado de naftilo hace lo propio para el catión  $Hg^{2+}$  (figura 3). En este último caso, como valor añadido, se ha determinado un límite de detección de 1,2 nM, por debajo de la concentración que considera la EPA (Agencia de Protección Ambiental de Estados Unidos) como tóxica en aguas potables.

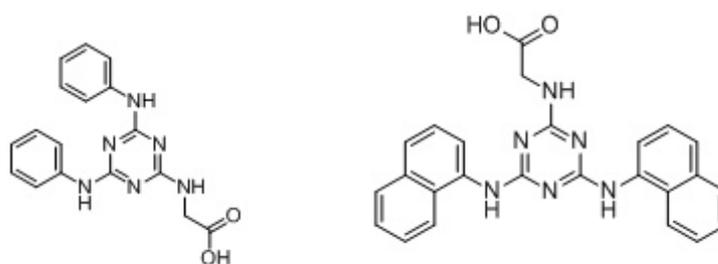


Figura 3. Estructuras de la sonda selectiva para  $Zn(II)$  –izquierda- y para  $Hg(II)$  –derecha-.

## MONITORIZACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE REACCIONES FOTOQUÍMICAS EN FLUJO CONTINUO MEDIANTE MICROBOBINAS DE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR

DOCTORANDO: Alberto Juan Ruiz del Valle

DIRECTORES: Dra. M<sup>a</sup> Victoria Gómez Almagro

Ha sido desarrollada en el grupo de *Microondas y Química Orgánica Sostenible* (MSOC) de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas, dentro del programa de doctorado de “Química Sostenible” y bajo la dirección de la Dra. M<sup>a</sup> Victoria Gómez Almagro. Debido a la importancia de la optimización de un proceso como por ejemplo, en el estudio cinético de una reacción, en la síntesis de un producto de interés, o en el escalado de una reacción, el objetivo de este trabajo es el desarrollo de dispositivos para la **monitorización en línea o “in-situ”** de reacciones químicas a *microescala* asistidas por luz *UV-visible* o *microondas*, y su optimización de forma rápida y eficaz mediante el uso de microbobinas de RMN.

En primer lugar se ha optimizado una **sonda de RMN**, basada en un microchip que contiene *microbobinas de RMN*, y se sitúa dentro de un imán superconductor de 9,4 T (400 MHz). Esta sonda presenta las ventajas de analizar pequeños volúmenes de muestra, detectar pequeñas cantidades de masa, aumentar la sensibilidad de RMN (principal limitación de esta técnica), y permitir el acoplamiento a otros sistemas de activación de reacciones químicas en flujo continuo. Esta sonda se conecta mediante capilares para que el sistema funcione en **flujo continuo** con: 1) Un dispositivo para activar reacciones por *microondas*, novedad con respecto a los hornos microondas convencionales, ya que implica una nueva forma de irradiación **microondas sin horno**. La detección en línea con microbobinas de RMN, a priori, debe ofrecer ventajas hasta ahora no descritas, debido a la proximidad entre la zona de reacción y detección. 2) Un dispositivo para activar reacciones fotoquímicas mediante luz *UV-visible* (reacción y detección también están muy próximas), usado para monitorizar diferentes reacciones fotoquímicas consiguiendo una optimización en línea en intervalos de tiempo cortos y la mínima cantidad de reactivo. Para llevar a cabo estas reacciones se desarrollaron microreactores de pequeño volumen (integrados en estos dispositivos), que reducen las cantidades de reactivo y disolvente, ofrecen una gran relación superficie-volumen, y disminuyen los tiempos de reacción. 3) Un dispositivo para monitorizar reacciones en tiempo real, para obtener información detallada del proceso fotoquímico y detectar intermedios de vida relativamente corta (que suelen ser detectados con técnicas fotoquímicas muy sofisticadas). Mediante el uso de la fuente de irradiación de este dispositivo, se ha optimizado la reacción de fotocicloaddición (2+2) de una familia de complejos ortopaladados derivados de oxazolonas en *flujo continuo* y en “*batch*”. Estos derivados son intermedios muy útiles en la síntesis enantioselectiva de aminoácidos cuaternarios y a partir de los derivados ciclobutano obtenidos, se pueden obtener derivados del ácido -truxílico, potentes antiinflamatorios y antinociceptivos.

Por otro lado, en este trabajo se han aplicado otras técnicas novedosas de RMN (difusión de RMN (PFGSE)) y cálculos computacionales (DFT B3LYP y PM6), para abordar el estudio de agregación en disolución de una familia de complejos heteroescorpionato de aluminio con quiralidad helicoidal.

Esta memoria puede enmarcarse dentro de la Química Sostenible, por el uso de nuevas fuentes de luz como fuentes de activación renovables que reducen la generación de productos secundarios, la realización de reacciones a microescala y el análisis de cantidades de muestra en el rango de microlitros a nanolitros, mediante técnicas de detección basadas en **microbobinas de RMN**.



## FORMACIÓN Y EVOLUCIÓN DE PIGMENTOS DE TIPO PIRANOANTOCIANO EN LA ELABORACIÓN DE VINOS TINTOS Y ROSADOS

DOCTORANDO: Dora Blanco Vega

DIRECTORES: Dr. Isidro Hermosín Gutiérrez

En esta tesis se ha profundizado en el conocimiento de los pigmentos antocianicos de bajo peso molecular formados en el vino tinto, sobre todo los del tipo piranoantociano (vitisinas e hidroxifenil-piranoantocianos). Para ello, se ha recurrido a: análisis cromatográfico por HPLC-DAD-ESI-MS/MS de vinos comerciales y experimentales; hemisíntesis y aislamiento de nuevos pigmentos; elucidación estructural de nuevos pigmentos por Espectroscopía de RMN.

En los vinos rosados (130 muestras), los principales pigmentos encontrados fueron los originales de la uva (antocianos), en particular malvidina 3-glucósido, independientemente del origen varietal. Los pigmentos poliméricos apenas contribuyeron al color y, entre los pigmentos antocianicos, la vitisina A fue la más importante, mientras que los hidroxifenil-piranoantocianos sólo comenzaron a cobrar relevancia en vinos rosados algo envejecidos. Para una amplia gama de vinos tintos (283 muestras), los contenidos y proporciones de los distintos tipos de pigmentos fueron muy variables, con escasa relación respecto al origen varietal y la edad del vino. No obstante, los vinos de Garnacha se caracterizaron por concentraciones altas de hidroxifenil-piranoantocianos, mientras que el envejecimiento tendió a uniformizar los vinos, por la disminución generalizada del contenido en todos los tipos de pigmentos: especialmente, aductos flavanol-etiliden-antociano y, en menor medida, hidroxifenil-piranoantocianos, que aumentaron su proporción entre los pigmentos residuales. Se ha podido demostrar cómo la práctica enológica de refrescar vinos tintos envejecidos con vino joven, altera la composición de pigmentos del vino y, de forma sustancial, se reactiva la formación de hidroxifenil-piranoantocianos con un aumento significativo de su contenido.

La cinética de formación de los piranoantocianos en vino modelo fue diferente según el precursor: entre las vitisinas, las de tipo A (a partir de ácido pirúvico) fueron las únicas que se formaron rápidamente y con rendimientos elevados, mientras que la formación de hidroxifenil-piranoantocianos tuvo un periodo de latencia, tras lo cual se formaron progresivamente y llegaron a alcanzar rendimientos elevados. Todos estos piranoantocianos fueron caracterizados cromatográfica y espectroscópicamente (UV-vis, MS y MS/MS) para facilitar su identificación y cuantificación en análisis de muestras reales de vinos. Por último, la presencia de los nuevos pigmentos 10-acetil-piranoantocianos (a partir de diacetilo, nunca antes considerado) se ha podido detectar en muestras reales de vinos, presentando unas características espectrales y de color muy singulares: gran tendencia a formar hemiacetales incoloros y bases quinoidales azules, junto con las formas piranoflavilio rojas, en condiciones habituales del vino tinto (medio acuoso, pH 3-4), por lo que el color mostrado no es el esperable rojo-anaranjado del resto de piranoantocianos conocidos, sino rojo-púrpura similar al de los antocianos de los que se forman; el bisulfito no los decoloró e hizo que aumentara su intensidad de color ocurriendo paralelamente un viraje hacia tonalidades anaranjadas.



**IV Edición del Curso de Divulgación**  
**“Los Avances de la Química y su Impacto en la Sociedad”**  
**Curso interuniversitario**



Coordinador:

**Bernardo Herradón**

Patrocinan:

**Asociación de Químicos de Madrid**

**Sección Territorial de Madrid de la Real Sociedad Española de Química**

Organización:

**Universidad de Alcalá (UAH)**

**Universidad Autónoma de Madrid (UAM)**

**Universidad Complutense de Madrid (UCM)**

**Universidad Rey Juan Carlos (URJC)**



<http://www.losavancesdelaquimica.com/> 1

Durante dos días, el 7 y 8 de noviembre, las nuevas promociones de ingenieros químicos españoles se reunieron en Ciudad Real para hacer valer su condición de piezas fundamentales en el desarrollo empresarial español. Dos días en los que las nuevas generaciones definieron el futuro de una profesión, en muchos aspectos, todavía por definir.

Convocados por la Federación Española de Ingenieros (FEIQ), en colaboración con los colegios oficiales de ingenieros químicos de Castilla-La Mancha, Comunidad Valenciana y Galicia, la facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de la Universidad de Castilla-La Mancha acogió esta primera iniciativa de Workshop en ingeniería química, que sirvió como punto de partida a una iniciativa que intenta implicar a los nuevos ingenieros en la realidad profesional y laboral del sector.



*Figura 1. Junta Directiva de la Federación Española de Ingenieros Químicos (FEIQ). De izquierda a derecha, M<sup>a</sup> José Martín de Vidales (vocal), Jesús González Cobos (vocal), Ángela Alcázar Román (secretaria), Ángel Caravaca Huertas (presidente), José Antonio Díaz López (vicepresidente), Jesús Manuel García Vargas (tesorero), Diego Simón Herrero (vocal) y María Martínez Velencoso (vocal).*

Para ello, el encuentro se estructuró a partir de un grupo de ponencias técnicas, en las que se repasó desde el propio desarrollo histórico de la profesión, con las ponencias presentadas por José Costa López, decano del Colegio Oficial de Químicos de Cataluña, que analizó los orígenes y evolución de la profesión de ingeniero químico, desde sus orígenes a principios del siglo XX hasta la actualidad, o la de José Luis Sotelo, representante de SEQUI, que trasladó esta evolución del sector al contexto español, con el paso desde los primitivos centros instalados en España de química fina, hasta la creación de los polos industrial de Tarragona, Puertollano o Huelva. También analizó la difícil coyuntura de empleo del sector, que ha pasado desde los aproximadamente 240.000 empleos existentes en 1986 a los 170.000 actuales.

Por su parte, Agustín Escardino analizó la, según el ponente, imprescindible relación entre el mundo académico y las empresas dentro del sector de la ingeniería química, hasta lograrse lo que Escardino consideró como necesidad de “mejorar la conversión de los conocimientos en beneficios económicos”. Para el ponente, en la actualidad todavía pervive un cierto distanciamiento entre las universidades y la empresa privada, un recorrido que debería ya estar resuelto pues desde 1983 se permite la colaboración con la empresa privada. Fundamental es también el papel que juega la investigación universitaria en la vitalidad de las pymes del sector. Según Escardino, “el mejor procedimiento para las relaciones con las pymes es a través de un instituto universitario de investigación. El papel jugado por la Administración es también fundamental, primando para ello el modelo de triple hélice propuesto desde años por Etzkowitz y Leydesdorff.

Jaime Lora García, representante de CODDIQ, repasó la evolución del título de ingeniero químico desde su implantación en 1992, así como la posición de la Conferencia de Directores y Decanos de Ingeniería Química en estos estudios superiores, que Lora García detalló a partir de la estructura doble existente, Grado y Máster, que responde a los dos niveles formativos: el perfil más dirigido a la industria (Grado) y un segundo más orientado a la investigación, desarrollo y dirección (Máster).

Vicente Vert Beleguer, representante de los colegios profesionales de ingeniería química, se detuvo a analizar el anteproyecto de Ley de Servicios Profesionales, aprobado en el consejo de ministros el pasado mes de agosto. Abogó Vert por la defensa del reconocimiento profesional de los ingenieros químicos, dentro de un contexto de desconocimiento social de la profesión y de la deslocalización territorial a la que se está asistiendo en este momento. La necesidad de potenciar la imagen de la ingeniería química, a la vez que asistir a un nuevo panorama de la profesión a tenor de las sentencias que se esperan favorables ante la nueva Ley, definirían este futuro del ingeniero químico, aseguró.

La importancia cada día mayor que mantiene la catálisis en el juego de competencias del ingeniero químico fue expuesto por Juan Ramón González Velasco, expresidente de la Sociedad Española de Catálisis (SECAT). Además de repasar la evolución del sistema catalítico, González reclamó una mayor colaboración empresa-investigación, además de dibujar un panorama de progreso en base a los nuevos sistemas de automoción.



*Figura 2. Inauguración de las Jornadas del Workshop.*

La segunda jornada del Workshop permitió a los asistentes conocer de viva voz la experiencia que jóvenes ingenieros químicos mantienen en sus diferentes puestos de trabajo, en empresas que para todos son un referente dentro de la profesión.

Así, por ejemplo, Jesús García Gómez, expuso su experiencia de diez años en Repsol, en donde detalló las capacidades de los ingenieros químicos en el organigrama de la multinacional. La seguridad, el medio ambiente y la eficiencia se postulan, según García Gómez, como los grandes puntales de la compañía en este momento. Especificó también el ponente las peculiaridades de la profesión dentro de un complejo industrial, especialmente en el área técnica.

Cristina Maroto, representante de CT Ingenieros, detalló el trabajo que desempeña el ingeniero químico en esta compañía, en especial dentro de su trabajo en el complejo de Puertollano, en donde actúan en este momento. La especificación y respuesta a problemáticas concretas quedó definido por Maroto como uno de los mayores requerimientos que una empresa como la suya realiza ante los nuevos trabajadores y, en especial, ante las solicitudes de empleo existentes.

También ubicada en Puertollano, José Ramón Serrano Felipe comentó ante los asistentes su experiencia en la planta que Fertiberia mantiene en este complejo. A partir de las diferentes áreas de producto existentes en la planta, Serrano repasó la peculiaridades y misiones del ingeniero químico en cada una de estas secciones, o bien otros diferentes cometidos en distintas áreas de la planta.

Jimmy Faria, representante de Abengoa, profundizó en su presentación sobre los mecanismos de actuación de la compañía en las responsabilidades de los ingenieros químicos. Para ello, hizo un repaso por las prioridades estratégicas de la empresa en estos últimos años, con atención en el desarrollo termosolar, hidrólisis o remineralización de aguas. A su vez, fijó las líneas maestras de los centros de investigación que mantiene la compañía.

Tras esta visión práctica del entramado laboral de algunas de las principales compañías que operan en la zona, el Workshop permitió conocer la situación actual del sector químico, en boca del representante de la patronal Feique, Juan Antonio Labat. En su presentación, Labat apostó por el futuro del sector, para el que se mantienen cifras de crecimiento en perspectiva del 2030 del 4,5%. Además, definió los nuevos campos de desarrollo del sector en España, como es el caso de la exportación en áreas geográficas como el norte de África, Latinoamérica, entre otros, así como la promoción de nuevas explotaciones de hidrocarburos no convencionales, caso del gas esquisto, sobre el que defendió su desarrollo en nuestro país.

Finalmente, la visión exterior vino de la mano del representante de la Ordem dos engenheiros, de Portugal, Eugénio Campos Ferreria, quien, junto con la presentación de los contenidos y programas de los estudios superiores que competen a los ingenieros químicos en Portugal, trazó en grandes líneas la estructura de los dos grandes complejos petroquímicos en territorio luso: Sines y Matosinhos.

Cada una de las sesiones cerraron con sendas mesas redondas. En la primera de las cuales el tema a debate fue el de las actuales posibilidades que la industria española ofrece a los nuevos ingenieros químicos, mientras que la segunda planteó el papel que cabe jugar en este sector a los nuevos emprendedores. Al respecto, junto con las apuestas ya organizadas de cara a plataformas de desarrollo de emprendedores, como es el caso del Foro de Emprendedores de Fundación Repsol, o el Foro de Inversores que patrocina Feique, se conminó a los asistentes a tener muy en cuenta las distintos spin-off o empresas de base tecnológicas, creadas a partir de los centros de investigación universitarios o tecnológicos.



*Figura 3. Mesa redonda celebrada el día 7 de Noviembre sobre “Salidas profesionales del Ingeniero Químico en la crisis actual”. De izquierda a derecha, José Luis Sotelo (representante de la Sociedad Española de Química Industrial e Ingeniería Química), José Fernando Pérez (representante del Consejo Estatal de Estudiantes de Ingeniería Química), Ángel Caravaca (representante de la FEIQUE), Antonio Nieto (representante de los Colegios) y Jaime Lora (representante de la Conferencia de Directores y Decanos de Ingeniería Química).*

## Entrevista a Carolina Gómez Turrillo

En el número de este mes entrevistamos a Carolina Gómez Turrillo, Secretaria del Instituto Regional de Investigación Científica Aplicada (IRICA).



Buenos días Carolina. ¿Cuéntame tu trayectoria personal?

Buenos días José Luis, mi trayectoria personal está limitada a Ciudad Real, puede decirse que soy una culiparda de pura cepa, cualquier paso andado en mi vida personal y profesional ha sido sin salir de aquí.

Empecé trabajando en el Ministerio de Educación y Ciencia en el año 1987 con un contrato de prácticas de 6 meses, luego tuve un pequeño parón en mi vida laboral y fue cuando tuve a mis dos hijos y en el año 1991 empecé a trabajar en la Universidad, fueron unos años de continuos cambios, haciendo suplencias donde tocara y por el tiempo que hiciera falta, fueron años duros a la vez que interesantes y lucrativos, tanto trasiego de una Unidad a otra me hizo conocer más a fondo la Universidad, la variedad en el trabajo y sobre todo a su gente.

En el año 2000 pase a ser funcionaria y ya para entonces estaba más asentada en la que ahora es la Unidad de Recursos Humanos y es en el año 2012 cuando concurso a una plaza como secretaria en el IRICA y aquí estoy al día de hoy.

¿Cómo conoces y empezas tú relación en UCLM?

Conocía la Universidad pero no tenía ninguna conexión hasta que empecé a trabajar en ella en el año 1991, como al principio hacia pequeñas suplencias y tenía temporadas que pasaba en el paro, nunca podría pensar que se convertiría en mi lugar de trabajo definitivo.

En cuanto a tu labor en la UCLM. ¿Cómo la definirías?

Creo que la Universidad es una larga cadena y yo formo parte de ella, soy un eslabón más y soy tan importante como cualquier otro. Intento hacer mi trabajo lo mejor y lo más agradable posible, al fin y al cabo dedicamos "cada vez más horas" a estar aquí ¿no?

¿Cómo has visto la evolución de la UCLM en estos años?

Es curioso, no te das cuenta de la evolución hasta que das marcha atrás a los recuerdos y ha sido asombroso, como ejemplos te diré que siempre recordare cuando poníamos las notas de selectividad a mano o cuando hacia cientos de escritos a máquina y ya ni te cuento si hablamos de la evolución en cuanto a cantidad de personal que se ha incorporado, las infraestructuras y las nuevas carreras, esperemos que los momentos que vivimos no echen abajo todo lo ganado.

¿Qué momentos recuerdas de manera más especial?

Ha habido muchos momentos, buenos y malos, es toda una vida aquí, pero el que tengo más reciente ha sido mi último traslado de RRHH al IRICA, hace ya 2 años. El cambio fue para mí como empezar de cero, todo era completamente distinto, llevaba muchos años en el mismo sitio con la misma gente y el mismo trabajo, pero pasado el rodaje de los primeros meses todo sobre ruedas.

Por último, ¿nos cuentas tus aficiones?

Muchas, tantas que me falta tiempo para realizarlas, me gusta hacer deporte (pádel, bicicleta, natación, pilates, yoga, taichí....), me encanta escuchar música, bailar, ir de senderismo con los amigos, ir al cine, hacer puzles, hacer punto de cruz, leer, jugar a las cartas, viajar.....

Muchas gracias Carolina, por tú colaboración.

En el próximo número de Molécula...

En el número de febrero incluiremos información sobre las Olimpiadas Científicas y de Química y nuestras habituales secciones de investigación, legados, conferencias, así como una artículo sobre Breaking Bad y la Química ....



**REVISTA**  
**MOLÉCULA**  
Revista de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas  
Universidad de Castilla La Mancha

