



REVISTA MOLÉCULA

Nº 171 Época III.
Octubre 2022

Premios Nobel
Estancias y Tesis Doctorales
Conferencias
Noticias

Presentación	P. 2
Premios Nobel	P. 3
Estancias	P. 9
Tesis Doctorales	P. 10
Congresos	P. 16
Noticias	P. 18
Artículo	P. 19
Próximo número de Molécula	P. 26

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

PRESENTACIÓN

La primera parte de este número recoge a los galardonados con el premio Nobel de este año. Además, se incluyen las diferentes actividades llevadas a cabo en la Facultad, así como estancias, tesis doctorales, y congresos. Finalmente, en la última sección nos podemos encontrar con diferentes noticias curiosas y de gran interés.

El comité editorial.

NOBEL DE MEDICINA PARA EL SUECO SVANTE PÄÄBO, PADRE DE LA PALEOGENÓMICA

El biólogo ha recibido el premio por sus investigaciones, en las que ha conseguido recuperar ADN de neandertales y compararlo con el genoma humano actual.



El biólogo sueco Svante Pääbo junto a un esqueleto de neandertal en el Instituto Max Planck de Antropología Evolutiva, Leipzig, Alemania, el 3 de octubre de 2022.—HANNIBAL HANSCHKE/EFE

El biólogo **Svante Pääbo** (Estocolmo, 1955) ha sido distinguido este lunes con el **Nobel de Medicina** por sus estudios sobre la evolución humana. La **Asamblea Nobel del Instituto Karolinska de Estocolmo**, institución que otorga cada año el galardón, destacó que los hallazgos del premiado han sido usados de forma extensiva por la comunidad científica para mejorar la comprensión sobre el ser humano. "Pääbo usó tecnología existente y aplicó sus propios métodos para extraer y analizar ADN antiguo, **cuando se consideraba imposible** poder recuperar ADN de hace 40.000 años", dijo en rueda de prensa el presidente de la Asamblea del Karolinska, **Nils-Göran Larsson**.

Sus estudios crean una nueva disciplina: la **paleogenómica**, la cual incluye la primera secuenciación del genoma de homínidos ya extintos y las transferencias genéticas entre subespecies. Su trabajo ha revelado que la psicología de los humanos actuales **o nuestra respuesta inmunológica** se ve influenciada por secuencias genéticas de homínidos extinguidos.

Gracias a que casi todo el genoma humano había sido secuenciado a finales de 1990, existían estudios sobre la relación genética entre poblaciones humanas, pero no **entre los hombres actuales y especies extintas**, por lo que el trabajo de Pääbo es "realmente un gran descubrimiento", según **Larsson**. "Establece las bases para tener un conocimiento más profundo sobre las características que son específicas de los humanos modernos" y en el futuro dará "**grandes conocimientos sobre la fisiología humana**".

El galardonado, que vive en **Alemania**, contó que cuando le llegó la llamada de teléfono para anunciarle la **concesión de un Nobel** y vio que era un número sueco, lo que pensó es que tenía que ver con la casa de verano que tiene en Suecia: "Pensé ¡oh, el cortacésped se ha estropeado!, o algo así". En referencia a sus estudios, declaró que "de alguna manera, **no pensé que esto pudiera ser realmente considerado para un Premio Nobel**".

Los pasos hasta llegar al Nobel

Pääbo, quien se había doctorado en la **Universidad sueca de Uppsala** en 1986 con un trabajo sobre inmunología molecular, se interesó pronto por la posibilidad de **aplicar la genética moderna al estudio del ADN de los neandertales**. Durante su doctorado en **Berkeley (Estados Unidos)** en el grupo de **Allan Wilson**, pionero en la biología evolutiva, empezó a desarrollar métodos en ese área para poder afrontar que, tras miles de años, solo quedan **pequeños fragmentos de ADN**, contaminados por material genético de bacterias y humanos contemporáneo.

Cuando le contrataron en la **Universidad de Múnich (Alemania)**, Pääbo decidió analizar **ADN de mitocondrias**, orgánulos de las células, las cuales contienen su propio ADN, presente en miles de copias, lo que le permitió **secuenciar por primera vez material de un hueso de 40.000 años de antigüedad**. El siguiente paso, desarrollado en el **Instituto Max Planck de Leipzig (Alemania)** fue secuenciar todo el genoma de un neandertal, algo que **logró en 2010** y que hizo posible "**lo que parecía imposible**", en palabras del Instituto Karolinska.

A partir de ese logro pudo empezar a investigar la **relación entre los neandertales y los humanos de hoy en día**, y descubriendo, por ejemplo, que el ADN de aquellos era más similar al de **los hombres originarios de Europa y Asia que al de los de África**.

Pääbo y su equipo *descubrieron también un homínido desconocido* hasta entonces, a partir de la secuenciación de una muestra de hueso de un dedo meñique encontrado en el **sur de Siberia (Rusia)**, y al cual bautizaron como **denisovano**.

Con sus estudios también demostró que había existido **flujo genético** entre denisovanos y *homo sapiens*, una relación comprobada en poblaciones de la **Melanesia** y otras partes del sureste asiático. "Revelando las diferencias genéticas que distinguen a todos los humanos vivientes de los homínidos desaparecidos, sus descubrimientos proporcionan la base para explorar **qué es lo que nos hace singularmente humanos**", se destaca.

Aportaciones de científicos españoles

El paleogenetista **Carles Lalueza Fox**, quien ha compartido investigaciones con el nuevo nobel, destaca que es "un pionero", un hombre que "**vive para la ciencia**" y ha destacado su satisfacción porque "es la primera vez que se da un Nobel a un investigador de la evolución humana, a la medicina evolutiva". Lalueza, director del **Museo Nacional de Ciencias Naturales de Cataluña**, ha destacado a *Efe* el papel que el yacimiento español de **El Sidrón (Asturias)** ha tenido en los descubrimientos **sobre el genoma de homínidos extintos** y la evolución humana **que le han dado el Nobel** al investigador sueco.

Uno de los codirectores de *Atapuerca*, **Juan Luis Arsuaga**, ha afirmado que el equipo de Atapuerca colabora desde hace años con el biólogo premiado, y que este se siente "partícipe" del Nobel. Además, ha recordado que fue otra colaboración con el Max Planck lo que permitió hace unos años **secuenciar el ADN nuclear más antiguo de un homínido**, concretamente de un fósil de la Sima de los Huesos, también de Atapuerca, de hace unos 400.000 años.

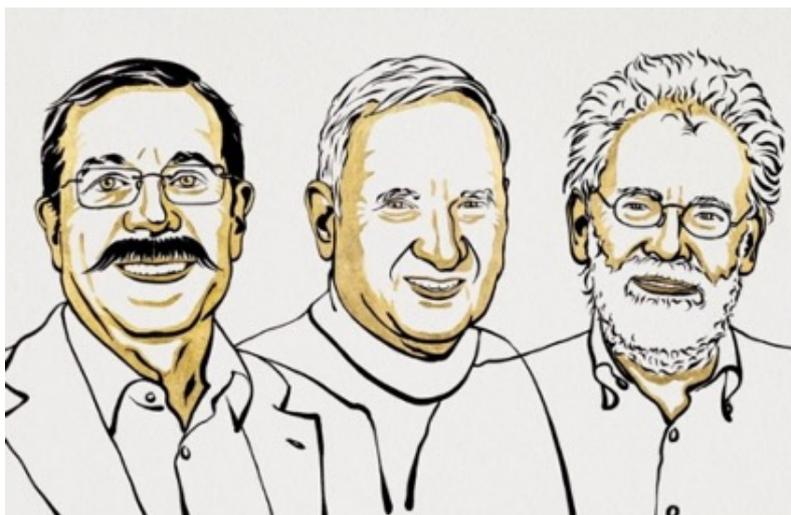
Familia de Nobel

Svante Pääbo, es hijo del bioquímico sueco **Sune Bergström**, quien a su vez ganó el **Nobel de Medicina en 1982**, compartido con otros dos investigadores, por sus trabajos sobre las prostaglandinas. Aun así, el biólogo considera que la "**mayor influencia**" en su vida fue su madre, la química estonia **Karin Pääbo**, con quién creció.

Además del premio recibido hoy, Pääbo ha sido dotado con otros importantes galardones como el **Gottfried Leibniz de la Sociedad de Investigadores Alemanes (1992)**, la medalla **Darwin-Wallace** y el **Princesa de Asturias de Investigación Científica y Técnica 2018**.

NOBEL DE FÍSICA PARA TRES PIONEROS DE LA INFORMACIÓN CUÁNTICA

El premio lo reciben el francés Alain Aspect, el estadounidense John F. Clauser y el austríaco Anton Zeilinger.



Los ganadores del Premio Nobel de Física Alain Aspect, John F. Clauser y Anton Zeilinger. — Niklas Elmehed / NOBEL PRIZE OUTREACH 04/10/2022

La Real Academia Sueca **ha concedido el Premio Nobel de Física 2022** al francés Alain Aspect, el estadounidense John F. Clauser y el austríaco Anton Zeilinger.

Según el fallo, estos expertos en física **han llevado a cabo experimentos innovadores utilizando estados cuánticos entrelazados**, en los que dos partículas se comportan como una sola unidad incluso cuando están separadas. "Los resultados han despejado el camino para nuevas tecnologías basadas en información cuántica", ha explicado el jurado.

La mecánica cuántica y sus inefables efectos **empiezan a encontrar aplicaciones**, con un gran campo de investigación que incluye computadoras cuánticas, redes cuánticas y comunicación cifrada cuántica segura, informa la Academia Sueca en un comunicado.

Un factor clave en este desarrollo es cómo la mecánica cuántica **permite que dos o más partículas existan** en lo que se llama un estado entrelazado. Lo que le sucede a una de las partículas en un par entrelazado determina lo que le sucede a la otra partícula, incluso si están muy separadas.

Durante mucho tiempo, la pregunta fue si la correlación se debía a que las partículas en un par entrelazado **contenían variables ocultas**, instrucciones que les indican qué resultado deben dar en un experimento.

En los 60 John Stewart Bell desarrolló la desigualdad matemática que lleva su nombre y John Clauser desarrolló su idea que establece que si hay variables ocultas, la correlación entre los resultados de un gran número de mediciones **nunca excederá un cierto valor**. Sin embargo, la mecánica cuántica predice que cierto tipo de experimento violará la desigualdad de Bell, lo que dará como resultado una correlación más fuerte de lo que sería posible de otro modo.

Clauser lo llevó a un experimento práctico. Cuando tomó las medidas, **respaldaron la mecánica cuántica** al violar claramente una desigualdad de Bell. Esto significa que la mecánica cuántica no puede ser reemplazada por una teoría que utilice variables ocultas.

Algunas lagunas quedaron después del experimento de John Clauser. Alain Aspect, de la Universidad de Paris-Saclay, desarrolló la configuración, usándola de una manera que cerró una laguna importante. Pudo cambiar la configuración de medición después de que un par entrelazado había dejado su fuente, por lo que la configuración que existía cuando se emitieron **no podía afectar el resultado**.

Usando herramientas refinadas y una larga serie de experimentos, Anton Zeilinger, de la Universidad de Viena, **comenzó a usar estados cuánticos entrelazados**. Entre otras cosas, su grupo de investigación ha demostrado un fenómeno llamado teletransportación cuántica, que hace posible mover un estado cuántico de una partícula a otra a distancia.

"Se ha vuelto cada vez más claro que está surgiendo un nuevo tipo de tecnología cuántica. Podemos ver que **el trabajo de los laureados con estados entrelazados es de gran importancia**, incluso más allá de las cuestiones fundamentales sobre la interpretación de la mecánica cuántica", dice Anders Irbäck, presidente del Comité Nobel de Física.

NOBEL DE QUÍMICA POR EL DESARROLLO DE UNA HERRAMIENTA PARA CONSTRUIR MOLÉCULAS



Los científicos Carolyn Bertozzi, Morten Meldal y K. Barry Sharpless son los ganadores del Premio Nobel de Química por el desarrollo de la química click.

PREMIO NOBEL DE FÍSICA [EFE](#)

Los científicos **Carolyn Bertozzi, Morten Meldal y K. Barry Sharpless** son los ganadores del **Premio Nobel de Química** por el desarrollo de una **herramienta "ingeniosa"** para la construcción de moléculas, anunció la Academia Sueca de Ciencias en Estocolmo.

El Nobel de este año premia "el desarrollo de la química clic y la química bioortogonal", destacó la academia, que dijo que con su trabajo los premiados han contribuido a **mejorar los fármacos contra el cáncer**. El trabajo de los premiados de este año "amplía las fronteras [de la química] y tiene un gran impacto en la ciencia y en la sociedad".

"La química clic se utiliza en el desarrollo de productos farmacéuticos para **mapear el ADN** y crear materiales que sean más adecuados para su propósito. Usando reacciones bioortogonales, los investigadores han mejorado la orientación de los productos farmacéuticos contra el cáncer", precisó la Academia sueca. El galardón premia, agregó la Academia, trabajos que tratan "que los procesos difíciles sean más fáciles. La química clic y las reacciones bioortogonales han llevado a la química a **la era del funcionalismo**".

Los ganadores de este año "han sentado las bases para una forma funcional de química, la química clic, en la que los componentes básicos moleculares se unen de manera rápida y eficiente". Bertozzi, en concreto, "ha llevado la química clic a una nueva dimensión y comenzó a utilizarla en organismos vivos. Sus reacciones bioortogonales tienen lugar **sin alterar la química normal de la célula**".

La Academia sueca recordó que, "durante mucho tiempo, los químicos se han visto impulsados por **el deseo de construir moléculas cada vez más complicadas**. En la investigación farmacéutica, esto a menudo ha involucrado la recreación artificial de moléculas naturales con propiedades medicinales". Esto ha dado lugar a muchas construcciones moleculares admirables, pero generalmente consumen mucho tiempo y son muy caras de producir, agregó la Academia en el comunicado publicado al dar a conocer los nombres de los galardonados.

Sharpless, quien ahora recibe **su segundo Premio Nobel de Química**, comenzó "a hacer rodar la pelota", estimó gráficamente la Academia al recordar que en torno al año 2001 acuñó el concepto de química clic, que es una forma de química simple y confiable, donde las reacciones ocurren rápidamente y se evitan subproductos no deseados.

Poco después, Meldal y Sharpless, independientemente el uno del otro, presentaron lo que ahora es **la joya de la corona de la química clic**: la cicloadición de azida-alquino catalizada por cobre. "Esta es una reacción química elegante y eficiente que ahora es de uso generalizado. Entre muchos otros usos, se utiliza en el desarrollo de productos farmacéuticos, para mapear el ADN y crear materiales que sean más adecuados para su propósito", explicó la Academia.

Bertozzi llevó la química clic a un nuevo nivel. Para mapear biomoléculas importantes, pero esquivas en la superficie de las células (glicanos), desarrolló reacciones clic que **funcionan dentro de los organismos vivos**. Sus reacciones bioortogonales tienen lugar sin alterar la química normal de la célula, agregaron los responsables de la institución. "El Premio de Química de este año trata de no complicar demasiado las cosas, de trabajar con lo fácil y sencillo. Las moléculas funcionales se pueden construir incluso siguiendo una ruta directa", dijo por su parte Johan Åqvist, presidente del Comité Nobel de Química.

SERGIO BLÁZQUEZ GONZÁLEZ: ESTANCIA EN GRECIA

Mi nombre es Sergio Blázquez y me encuentro en la recta final de mi doctorado en el grupo FOTOAIR del Departamento de Química Física.

Al igual que a muchos otros estudiantes de doctorado, surgió la oportunidad de realizar una estancia predoctoral en el extranjero con el fin de optar a la mención internacional, así como de aprender a trabajar en un laboratorio diferente y en un idioma distinto al que estamos acostumbrados.

En mi caso, esta estancia predoctoral la realicé entre los meses de mayo y agosto de 2022 en el laboratorio LAPKIN del Departamento de Química de la Universidad de Creta, en la ciudad de Heraclión, Grecia. Mi supervisor fue el Dr. Vassileios C. Papadimitriou, que desde el primer momento en el que llegué allí me hizo sentir como en casa. El trabajo que allí desempeñé fue el estudio cinético de un hidrofluoroéter para evaluar su impacto ambiental y proponerse como un candidato para ser un potencial sustituto de algunos gases de efecto invernadero que se utilizan hoy en día en la industria. Gracias a la implicación de Vassileios, en pocos días dominé el sistema experimental y pude trabajar de forma autónoma. Además, salvo algún pequeño percance, todos los experimentos y resultados salieron reproducibles y coherentes, lo cual fue casi sorprendente.



Además, Heraclión y la Isla de Creta en general son lugares llenos de historia, donde tuve la oportunidad de visitar sitios emblemáticos como el Palacio de Cnosos y el Palacio de Festo, así como muchas playas y pueblos con un encanto único.

Si me sentí tan arropado fue gracias a que Vassileios, junto con mis compañeras del laboratorio Pantanassa Telliou y Giannis Flouris, me ayudaron en todo lo posible. Además, otras dos personas que trabajaban en ese mismo laboratorio, Maria-Areti Spanoudaki y Katerina Xezonaki, se encontraban de ese mismo periodo en el laboratorio FOTOAIR realizando una estancia, pero tuve la suerte de compartir también con ellas los últimos días de mi estancia allí.

En resumen, mi estancia en el laboratorio LAPKIN en el Departamento de Química de la Universidad de Creta en Heraclión, Grecia, ha sido muy positiva y provechosa tanto en resultados en el laboratorio como en conocer gente y lugares nuevos. Ha sido una experiencia que, sin duda, la recomiendo a toda aquella persona que tenga la oportunidad.

IN VIVO STUDY OF THE BIOACTIVITY OF GRAPE SEED FLAVANOLS IN A DIETARY RELEVANT DOSE IN YOUNG AND LEAN WISTAR RATS

Doctorando: Eduardo Guisantes Batán

Directores: Dr. Sergio Gómez Alonso, Dra. Nilda del Carmen Gallardo Alpizar y Dra. Margarita María Villar Rayo.

Departamento de Química Analítica y Tecnología de Alimentos.



Los compuestos fenólicos han sido objeto de estudio en el campo de la nutrición durante las últimas décadas. Numerosos estudios de intervención y epidemiológicos han observado como dietas ricas en alimentos con un alto contenido en compuestos fenólicos se correlacionan con una menor incidencia de enfermedades metabólicas, como la obesidad y la diabetes tipo 2, ambas causadas, entre otros factores, por una dieta desequilibrada.

El número de compuestos fenólicos presentes en la dieta es muy elevado, sin embargo, no todos presentan la misma estructura ni se consumen con la misma frecuencia, lo que condiciona los posibles efectos saludables derivados de su consumo. En particular, estudios sobre la dieta en población europea han dejado claro que los flavanoles están entre los compuestos fenólicos más consumidos gracias a su presencia en alimentos como el té, el chocolate, las uvas, los frutos rojos y diversas frutas de pomo, habitualmente consumidos por la población con unos hábitos alimenticios saludables.

No obstante, elaborar recomendaciones dietéticas sobre los efectos positivos en la salud que tiene el consumo de flavanoles requiere de un profundo conocimiento de su biodisponibilidad y de los mecanismos de acción asociados a estos compuestos en diferentes modelos de estudio *in vivo*. Así, en esta tesis doctoral hemos estudiado como el consumo de un extracto de semilla de uva (GSE), rico en flavanoles, a dosis equivalentes a las que se podrían encontrar en dietas sanas y equilibradas (25 mg/ kg peso/ día) produce cambios fisiológicos y moleculares en ratas Wistar jóvenes y sanas que podrían ayudar a prevenir el desarrollo de enfermedades metabólicas.

El metabolismo de los flavanoles y de los compuestos fenólicos en general está estrechamente influenciado por la actividad del intestino y el hígado, órganos clave en el metabolismo energético y la homeostasis corporal. En particular, el íleon, situado en la parte distal del intestino delgado, juega un papel fundamental en el funcionamiento de la barrera intestinal, la regulación de la respuesta inmunitaria y la captación de nutrientes, pero su implicación en los efectos derivados del consumo de flavanoles no está bien establecida. En este sentido, analizamos el proteoma del íleon de las ratas suplementadas con GSE y lo comparamos con las ratas control observando cambios en diferentes proteínas y procesos biológicos que sugieren una mayor eficiencia del metabolismo oxidativo, mejora de la motilidad intestinal y una prevención contra respuestas inflamatorias aberrantes y desarrollo de cáncer.

Por otro lado, el hígado juega un papel central en la regulación del metabolismo energético. En nuestro estudio, hemos determinado como el consumo de flavanoles del GSE a dosis bajas produce cambios a nivel molecular en genes y proteínas claves para el metabolismo de la glucosa, la sensibilidad a la insulina y el metabolismo lipídico.

Además, evaluamos la implicación global del receptor nuclear PPAR β/δ , isoforma de la familia de receptores nucleares activados por proliferadores de peroxisomas (PPAR) que actúa como factor de transcripción de genes implicados en la homeostasis de la glucosa y los lípidos, así como en la inflamación, con el objetivo de definir alguno de los posibles mecanismos de acción de los flavanoles. Para ello, inyectamos intraperitonealmente un potente antagonista específico de PPAR β/δ , denominado GSK0660, a las ratas suplementadas con GSE y ratas control. Nuestros resultados muestran como la activación de PPAR β/δ está involucrada en la reprogramación metabólica producida por el consumo de flavanoles presentes en el GSE, en particular, en el intestino e hígado de rata.

En general, esta tesis aporta nuevos avances en el conocimiento de los efectos positivos que tiene el consumo moderado de flavanoles en animales sanos, señalando posibles mecanismos moleculares que subyacen tras estos efectos. De forma notoria constatamos que los flavanoles ayudan a mantener la homeostasis intestinal y a modular el metabolismo energético, ambos factores decisivos para la prevención de enfermedades metabólicas.

SYNTHESIS OF BIO-BASED NON-ISOCYANATE POLYURETHANES (NIPUs) THROUGH SUPERCRITICAL CO₂ TECHNOLOGIES

Doctorando: Juan Catalá Camargo

Directores: Juan Francisco Rodríguez Romero y María Teresa García González

Departamento de Ingeniería Química



El 11 de octubre de 2022 tuvo lugar la lectura de la Tesis doctoral de D. Juan Catalá Camargo, del departamento de Ingeniería Química. El título de su tesis fue **“Synthesis of Bio-based Non-Isocyanate Polyurethanes (NIPUs) through supercritical CO₂ technologies”**. D. Juan obtuvo la máxima calificación por parte del tribunal, compuesto por: Presidente- Dr. Janusz Datta (Politechnika Gdańska); Secretario- Dr. Juan Carlos de Haro Sánchez (Repsol); y Vocal- Dra. Arantxa Eceiza Mendiguren (Universidad del País Vasco).

Su tesis se basó en el desarrollo de biomateriales de poliuretano sin isocianato (NIPU, por sus siglas en inglés), empleando aceites vegetales, como el de granilla de uva o soja. como materia de partida. Para conseguirlo, se utilizaron también tecnologías novedosas, como aquellas basadas en el CO₂ supercrítico como medio de reacción, reactivo e incluso agente espumante.

Los poliuretanos (PUs) constituyen un grupo de polímeros, que presentan una estructura modular unida por enlaces de uretano (-NH-CO-O), y tienen una amplia gama de aplicaciones y utilidades.

Sin embargo, los poliuretanos convencionales presentan algunos inconvenientes importantes, y la mayoría de ellos están relacionados con problemas medioambientales tanto durante el proceso de síntesis como en la eliminación de los residuos de poliuretano al final de su ciclo de vida.

La consideración de estos inconvenientes insta a buscar nuevas alternativas como los Poliuretanos sin Isocianato (NIPUs), que además de eliminar la necesidad de utilizar isocianatos, permiten el uso de materias primas renovables de base biológica, como los aceites vegetales. También surge la posibilidad de compatibilizarlos con el uso de tecnologías supercríticas de forma que aumenta la efectividad de los procesos de transformación, elimina la necesidad de disolventes orgánicos y ayuda a reducir el balance de carbono atmosférico, mediante procedimientos que permiten su captura, fijación y/o utilización. El primer paso consiste en la epoxidación de los aceites vegetales, generalmente a través de la transformación de los dobles enlaces presentes en las cadenas triglicéricas en epóxidos por la acción del perácido generado del CO₂ supercrítico y el peróxido de hidrógeno (H₂O₂).

Se evaluó también en detalle la cinética del proceso, la naturaleza y el alcance de las reacciones laterales y los productos secundarios obtenidos, siendo los productos de hidrólisis y sus derivados de oligomerización los principales subproductos.

Posteriormente se obtienen carbonatos cíclicos a partir del producto epoxidado introduciendo CO_2 en la estructura molecular del aceite. Para ello, se emplearon una nueva clase de catalizadores bifuncionales basados en imidazoles y sales de amonio cuaternarias, realizando un estudio cinético completo sobre la carbonatación de triglicéridos en scCO_2 , así como la optimización de las condiciones de operación y estudios comparativos sobre las mejoras que suponen trabajar en condiciones supercríticas.

Finalmente, se logra la síntesis de NIPUs a partir de aceite de soja carbonatado (CSBO) y diferentes diaminas como alternativa a los poliuretanos convencionales permiten mantener propiedades y aplicaciones similares. A lo largo de esta parte del proyecto se estandarizan unas condiciones de síntesis y curado de los materiales, y se propone un método de modificación química que permite manipular las materias primas para obtener elastómeros de NIPU con unas propiedades fisicoquímicas y mecánicas a medida del uso final al que se deseen destinar. Además, se consiguen obtener a partir de materias primas 100% renovables y reprocesarlos con objeto de darle una segunda vida útil como espumas de poliuretano.

La última parte de la tesis se centra en un análisis de viabilidad de la producción industrial desde el punto de vista económico y medioambiental. Para ello se proyecta una planta de producción continua de NIPU de base biológica a escala industrial. Tras el dimensionamiento de los equipos de operación y la estimación del capital necesario, y valorando las posibilidades de financiación público/privada, así como los costes y la capacidad de venta anual, se aplicaron métodos de evaluación económica de la rentabilidad del proyecto, que ponen de manifiesto la idoneidad de la puesta en marcha del proyecto. Este supondría un impacto muy positivo en la sociedad, generando nuevas oportunidades de empleo y reduciendo el impacto ambiental de este proceso productivo mediante la captura de cientos de toneladas de CO_2 al año y la utilización de materias primas totalmente renovables.

Esta tesis doctoral se enmarca en la línea de investigación de Tecnologías Químicas y Polímeros, desarrollada en el Laboratorio de Tecnologías Químicas del grupo TEQUIMA de la Universidad de Castilla-La Mancha.

Cabe destacar que como fruto de dicho trabajo se ha contribuido con 3 publicaciones en revistas de alto impacto y otras 3 que se encuentran actualmente en preparación, así como contribuciones en congresos de ámbito nacional e internacional. Años de intensa dedicación, crecimiento y agradecimiento por participar en equipos de alta calidad profesional y humana.



MULTIFUNCTIONAL SOFT MATERIALS: SYNTHESIS AND APPLICATIONS

Doctorando: Josué Muñoz Galindo

Directores: Sonia Merino Guijarro y María Antonia Herrero Chamorro

Departamento de Química Inorgánica, Orgánica y Bioquímica. Área de Química Orgánica



El desarrollo de nuevos materiales en el campo de la medicina para generar órganos artificiales ha experimentado un elevado crecimiento en los últimos años con el fin de resolver problemas relacionados con los trasplantes o la regeneración de tejidos. Esta tesis pretende profundizar en el campo de los materiales como soportes para cultivos celulares y en ingeniería de tejidos.

Así, los hidrogeles se presentan como candidatos prometedores en aplicaciones en la ingeniería de tejidos y la medicina regenerativa. Su flexibilidad y biocompatibilidad los hacen ideales para este propósito, pues imitan las características de la matriz extracelular y proporcionan un ambiente adecuado para el crecimiento y la proliferación celular. Por otro lado, nanomateriales, como el grafeno, en pequeñas cantidades, facilitan el crecimiento de neuronas gracias a sus propiedades eléctricas, mientras que las nanopartículas metálicas permiten preparar hidrogeles magnéticos capaces de responder a estímulos magnéticos. Por tanto, la combinación de los hidrogeles con estos nanomateriales dará lugar a soportes adecuados para la ingeniería de tejidos y aplicaciones de cultivos celulares.

Sin embargo, en algunas ocasiones, los sistemas tridimensionales tienen problemas relacionados con la adhesión celular, ya que las células no tienen receptores específicos para los componentes químicos presentes en la matriz del hidrogel. Por tanto, para resolver este problema, los soportes se diseñan con diferentes enfoques para lograr el anclaje de moléculas biológicas o factores de crecimiento a la matriz del polímero.

Teniendo esto en cuenta, se prepararon nuevos hidrogeles con un monómero basado en un derivado de sulfonato, capaz de interactuar con proteínas y factores de crecimiento. Además, se analizó el papel que juegan los nanomateriales (grafeno y nanopartículas metálicas) en el hidrogel. Estudios celulares confirmaron el efecto positivo del grupo sulfonato en la viabilidad celular.

Otra forma de incorporar el grupo sulfónico/sulfonato a los hidrogeles es a través de la modificación de las láminas de grafeno, aprovechando las buenas propiedades del grafeno y la capacidad del mencionado grupo para coordinar factores de crecimiento.

Por otra parte, se ha observado que diferentes tipos de células tienen capacidad para unirse a secuencias peptídicas ancladas, de manera covalente, a la red del hidrogel, como puede ser la secuencia RGD. En este sentido, se llevó a cabo la funcionalización del péptido RGD con un resto de acrilato para su inclusión en la matriz de los hidrogeles. Estudios de viabilidad celular confirmaron el efecto positivo de la incorporación de este péptido.

Otra molécula muy interesante es el anillo 1,3,5-triazina, muy utilizada en la estructura de los hidrogeles, pues es capaz de formar enlaces de hidrógeno que dan consistencia a la red. Por tanto, se preparó un nuevo hidrogel físico utilizando un derivado de triazina nunca antes descrito para este fin. Estos hidrogeles resultaron tener propiedades fluorescentes debido a un fenómeno denominado emisión inducida por agregación. La formación del polímero y los enlaces de hidrógeno entre las moléculas de triazina son los responsables de este fenómeno. La combinación de estos materiales blandos con estas propiedades luminiscentes expande su campo de aplicación. Prueba de ello es que se incorporaron dos moléculas luminiscentes en el hidrogel consiguiendo emisión de luz blanca.

Es importante resaltar que, en todos los casos, se llevó a cabo un estudio exhaustivo de la capacidad de grado de hinchamiento y propiedades mecánicas de los hidrogeles con el fin de adecuarlos a su aplicación final. En este sentido, se analizó el Módulo de Young para estudiar la elasticidad de los materiales, así como su comportamiento viscoelástico. Estos parámetros son cruciales para el desarrollo y crecimiento celular, además de un tamaño adecuado de la red del polímero, el cual se analizó mediante microscopía electrónica de barrido. Asimismo, estudios de infrarrojo o de análisis termogravimétrico confirmaron la inclusión de moléculas en la red del hidrogel, así como el comportamiento de estos sistemas. También se analizó la magnetización de los hidrogeles con nanopartículas mediante SQUID.

Por tanto, se presentan una gran cantidad de hidrogeles con propiedades modulables, los cuales no fueron citotóxicos y mostraron un potencial prometedor en el campo de la ingeniería de tejidos.

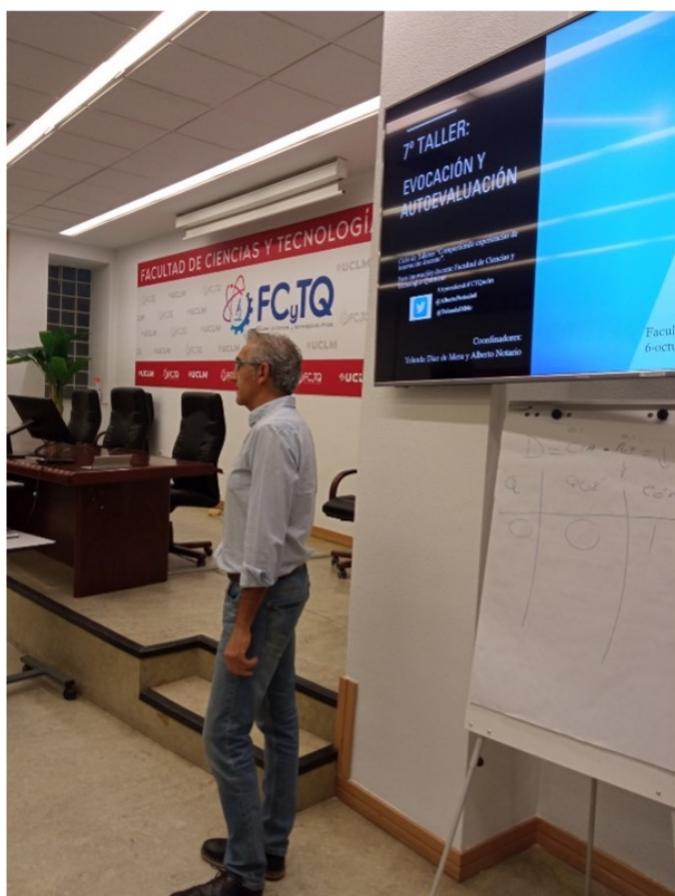
Finalmente, se prepararon otro tipo de soportes tridimensionales, en este caso a partir de cristales líquidos, durante una estancia internacional en la Universidad Tecnológica de Eindhoven. El desarrollo de polímeros basados en cristales líquidos ha atraído la atención de numerosos investigadores debido al gran potencial de las moléculas ópticas para el control de procesos físicos, químicos y mecánicos. En este campo, el azobenceno se presenta como la molécula más prometedora, ya que puede utilizarse para el control topográfico de superficies. Por tanto, el trabajo consistió en la preparación de una película de polímero basada en cristal líquido con capacidad para controlar las topografías de su superficie por iluminación y/o temperatura y con posible aplicación en el campo de la ingeniería de tejidos.

7º TALLER DE INNOVACIÓN DOCENTE

El pasado 6 de octubre de 2022 se llevó a cabo el séptimo taller de innovación docente dentro del ciclo de talleres “*Compartiendo experiencias de innovación docente*” de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas y coordinado por el grupo de innovación docente ‘*Aprendiendo*’. En este caso, el tema tratado fue ‘*Evocación y Autoevaluación*’, y al mismo asistieron tanto profesores de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas como de otras facultades, de forma presencial y por videoconferencia.

Durante el taller se expusieron distintas ideas, herramientas y estrategias para ayudar a nuestros estudiantes con la gestión de su aprendizaje. Un pilar muy importante es la práctica regulada de la evocación (traer a la memoria de trabajo algo almacenado en la memoria a largo plazo) y la autoevaluación. De esta manera, los estudiantes son más conscientes de lo que saben, sus fortalezas, y también de sus debilidades, de modo que pueden cambiar sus estrategias de aprendizaje. En este punto, la tarea del profesorado es muy importante, ya que podemos ayudar a que los estudiantes aprendan del modo más eficaz posible.

Además de las exposiciones, durante el taller tuvo lugar un debate con todos los asistentes.

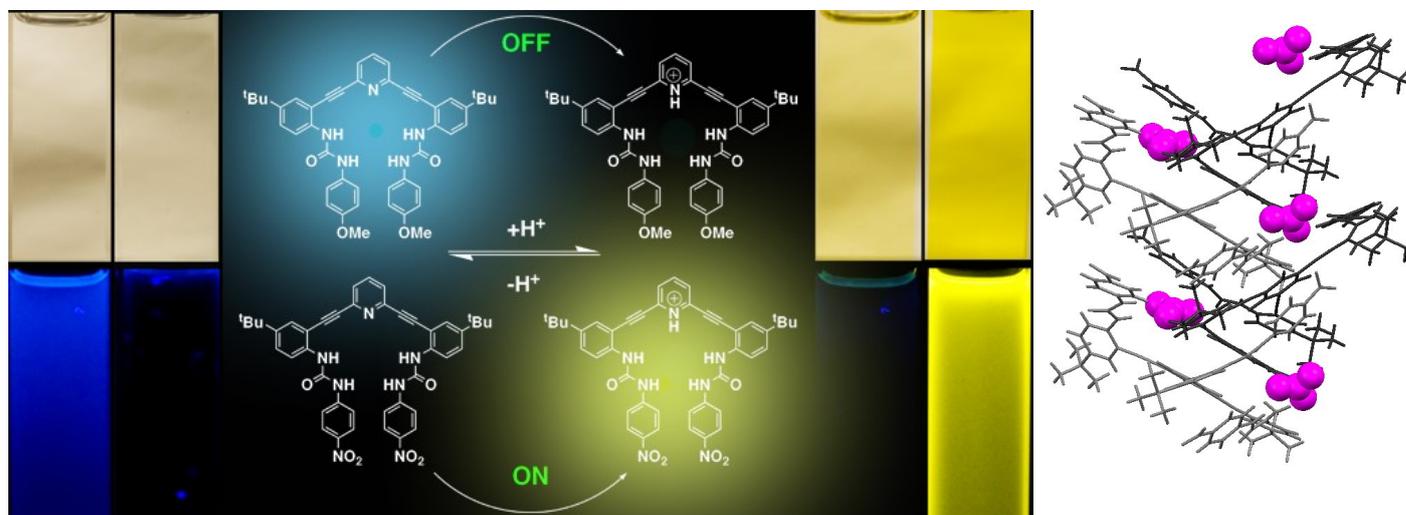


VIERNES EN EL IRICA

PHENYL-ACETYLENE SCAFFOLDING AS RECEPTORS FOR ANIONS: SYNTHESIS, SUPRAMOLECULAR CHEMISTRY AND EMERGING APPLICATIONS

Prof. Michael M. Haley
Department of Chemistry & Biochemistry
University of Oregon

Functionalized phenylacetylenes show broad applicability as rigid, linear subunits in the synthesis of shape-persistent supramolecular complexes.^[1] Their pi-conjugation and molecular planarity allow observation of the electronic perturbation upon formation of host-guest complexes through simple spectroscopic methods (e.g., absorption, emission). Easily substituted arenes lend tunability to the host system via bite angle, cavity size or available hydrogen/halogen bonding sites, while donor-acceptor modification enables tunability in the electronic response within each receptor class. This presentation will describe the synthesis and binding studies of urea receptor complexes with a series of anionic guests, and the effect of donor-acceptor modification on their emission spectra. Emphasis will be placed on utilizing these molecules as sensors for a variety of applications such as detection of environmentally relevant oxoanions (e.g., NO_3^- , H_2PO_4^- , HSO_4^-)^[2] as well as biologically relevant anions (e.g., Cl^- , HS^- , HSe^-).^[3]



References

- [1] L. M. Eytel, H. A. Fargher, M. M. Haley and D. W. Johnson, *Chem. Commun.* 2019, 55, 5195.
 [2] (a) L. M. Eytel, A. C. Brueckner, J. A. Lohrman, M. M. Haley, P. H.-Y. Cheong and D. W. Johnson, *Chem. Commun.* 2018, 54, 13208. (b) C.-L. Deng, J. P. Bard, J. A. Lohrman, J. E. Barker, L. N. Zakharov, D. W. Johnson and M. M. Haley, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2019, 58, 3934.
 [3] (a) M. D. Hartle, R. J. Hansen, B. W. Tresca, S. S. Praker, L. N. Zakharov, M. M. Haley, M. D. Pluth and D. W. Johnson, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2016, 55, 11480. (b) C. L. Vonnegut, A. M. Shonkwiler, L. N. Zakharov, M. M. Haley and D. W. Johnson, *Chem. Commun.* 2016, 52, 9506. (c) H. A. Fargher, N. Lau, L. N. Zakharov, M. M. Haley, D. W. Johnson and M. D. Pluth, *Chem. Sci.* 2019, 10, 67. (d) H. A. Fargher, N. Lau, H. C. Richardson, P. H.-Y. Cheong, M. M. Haley, M. D. Pluth and D. W. Johnson, *J. Am. Chem. Soc.* 2020, 142, 8243.

LA UCLM PARTICIPA EN UN PROYECTO EUROPEO DE DESARROLLO DE UNA TECNOLOGÍA SOSTENIBLE PARA LA PRODUCCIÓN DE HIDROGENO VERDE

La Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas, anfitriona de la reunión de lanzamiento del estudio

La Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas del Campus de Ciudad Real ha acogido la reunión de lanzamiento del proyecto europeo MacGhyver, financiado con 3,9 millones de euros y en el que participa la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) a través del Laboratorio de Ingeniería Electroquímica y Ambiental del grupo TEQUIMA. Este proyecto tiene por objetivo principal el desarrollo de una tecnología sostenible para la producción de hidrógeno verde a partir de aguas residuales industriales.



Participantes en la reunión de lanzamiento del proyecto MacGhyver

El Laboratorio de Ingeniería Electroquímica y Ambiental del grupo de investigación TEQUIMA de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) participa en el proyecto europeo MacGhyver, el cual tiene como objetivo principal el desarrollo de una tecnología sostenible para la producción de hidrógeno verde a partir de aguas residuales industriales.

Financiado con 3,9 millones de euros, de los que casi 300 000 euros serán gestionados por el grupo de la Universidad regional, y tras haber obtenido la mejor valoración en la pasada convocatoria Horizon Green Hydrogen Pathfinder, estará coordinado por la empresa francesa Eden Microfluidics. Además de la UCLM, del consorcio de la investigación forman parte las universidades Clausthal University of Technology (TUC) y Leibniz University Hannover (LUH), ambas de Alemania; la Poznan University of Technology (PUT) de Polonia y la Delft University of Technology (TuDelft) de Holanda.

El proyecto, que tendrá una duración de cuatro años, ha reunido en la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de la UCLM en el Campus de Ciudad Real a los representantes de las diferentes partes implicadas para celebrar su reunión de lanzamiento.

Para el desarrollo de una tecnología sostenible para la producción de hidrógeno verde a partir de aguas residuales industriales, las partes implicadas desarrollarán un stack de electrolizadores basado en tecnología microfluídica y un sistema de separación y compresión electroquímica que puede ser operado con energía renovable. También desarrollarán catalizadores con metales no nobles que presenten una elevada actividad catalítica. Finalmente, el impacto ambiental, económico y social de la tecnología desarrollada será evaluada en este proyecto y será llevada a cabo por el grupo de la UCLM.

ALGUNOS TRABAJOS OLVIDADOS

J. Elguero Bertolini

Instituto de Química Médica (CSIC)

C-e: iqmbe17@iqm.csic.es

En Marcos 10:23 (Mateo 19:23, Lucas 18:24), al concluir la historia del joven rico, Jesús dice: "¡Cuán difícilmente entrarán en el reino de Dios los que tienen riquezas!". Entonces añade: "Más fácil es pasar un camello por el ojo de una aguja, que entrar un rico en el reino de Dios".

Uno siente más afecto por aquellas publicaciones que han caído en el olvido o han sido injustamente tratadas que por aquellas que han tenido éxito. Yo, gracias a Ibon Alkorta, tengo un par de artículos, como él dice, mileuristas. Los miro con admiración, respeto y sorpresa. Pero hoy quisiera hablar de los otros, de los pobres, de los olvidados, de los despreciados.

1. ¿Injusticias?

En 1984, Breitmaier y sus colaboradores publicaron un trabajo que se ha hecho tristemente célebre: "Enantioselective Reactions in a Static Magnetic Field".^[1] Su lectura nos indujo a realizar un experimento que nos parecía más apropiado que el del autor para poner en evidencia el efecto enantioselectivo propuesto por Breitmaier. En vez de la reducción de un compuesto carbonílico, usamos la reacción de cloroformo con 2-metil-1H-bencimidazol, que da una mezcla racémica de tris-(2-metil-1H-bencimidazol-1-il)metano (porcentajes determinables usando el alcohol de Pirkle). Hicimos los experimentos fuera y dentro de un aparato de 300 MHz y en ambos casos obtuvimos una mezcla 50/50. Lo escribimos, lo mandamos a *Angewandte* y el editor lo rechazó diciendo que *Angewandte* no publica resultados negativos (!). Conscientes del peligro, lo mandamos a una revista de la India que acababa de aparecer (Figura 1). Fue publicado en *Heterocyclic Communications*, **1994**, 1, 101–102 (recibido el 30 de junio de 1994). Poco después, *Angewandte* publicó los artículos de Feringa (recibido el 3 de junio)^[2] y de Kaupp (recibido el 12 de junio).^[3] Se puede leer sobre este tema con más detalle en la "review" hecha por Cintas y colaboradores.^[4]

Para más *inri*, el primer número de *Heterocyclic Communications* no figura en ninguna base bibliográfica aunque está en la página de la revista, así que se ha perdido. En lugar de ser publicado en *Angewandte* junto con Feringa y Kaupp está en el limbo.

FAILED ATTEMPT TO INDUCE CHIRALITY USING A MAGNETIC FIELD: THE CASE OF CHIRAL HELICITY OF TRIS-(2-METHYLBENZIMIDAZOL-1-YL)METHANE

JOSÉ ELGUERO,* NADINE JAGEROVIC, ANDREAS WERNER, AND M.ª LUISA JIMENO

Instituto de Química Médica, CSIC, Juan de la Cierva, 3, 28006 Madrid, Spain.

ABSTRACT

Using PTC conditions, the title compound was prepared outside and inside the probe of an NMR spectrometer (7.05 T). In both cases, the racemic mixture was obtained: no enantioselectivity was found.

Recently, Breitmaier and coworkers described enantioselective reactions in a static magnetic field (1). They use, as a model, the transformation of carbonyl compounds (aldehydes and ketones) into carbinols using Grignard reagents and complex metal hydrides. We decided to test this method in a quite different reaction. For this purpose, we selected the synthesis of tris-(2-methylbenzimidazol-1-yl)methane **3** from 2-methylbenzimidazole (2MeBz) **1** and chloroform **2** under PTC conditions (2).

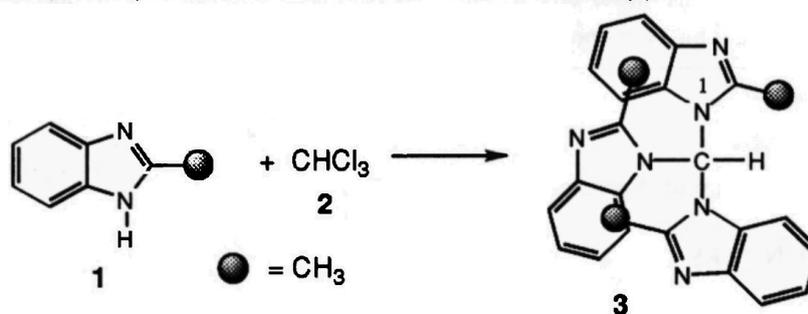


Figura 1. Nuestro trabajo de 1984 (*Heterocyclic Communications*, 1994, 1, 101–102).

Veintisiete años después volví a cometer el mismo error (ya se sabe que el hombre es el único animal que tropieza dos veces en la misma piedra). Mandé a *Angewandte* un artículo de revisión que nos parecía digno de ella (Figura 2); el editor nos contestó que tenían muchos “reviews” en espera y que lo mandáramos a *Chemistry – A European Journal*. Así lo hicimos y su editor lo rechazó porque ya habían firmado un contrato con otro grupo para un revisión similar que estaba a punto de aparecer. Rápidamente lo mandamos a *Crystals*, donde fue publicado (2020, 10, 180-1/180-27), habiendo sido citado 190 veces a fecha de hoy (4 de octubre de 2022).

Pero esto no es lo que la hace digna de haber estado allí: ni en *Angewandte* ni en *Chemistry* han publicado una revisión sobre interacciones no covalentes y ya van casi tres años.

Not only hydrogen bonds: other non-covalent interactions

Ibon Alkorta,* José Elguero,* and Antonio Frontera*

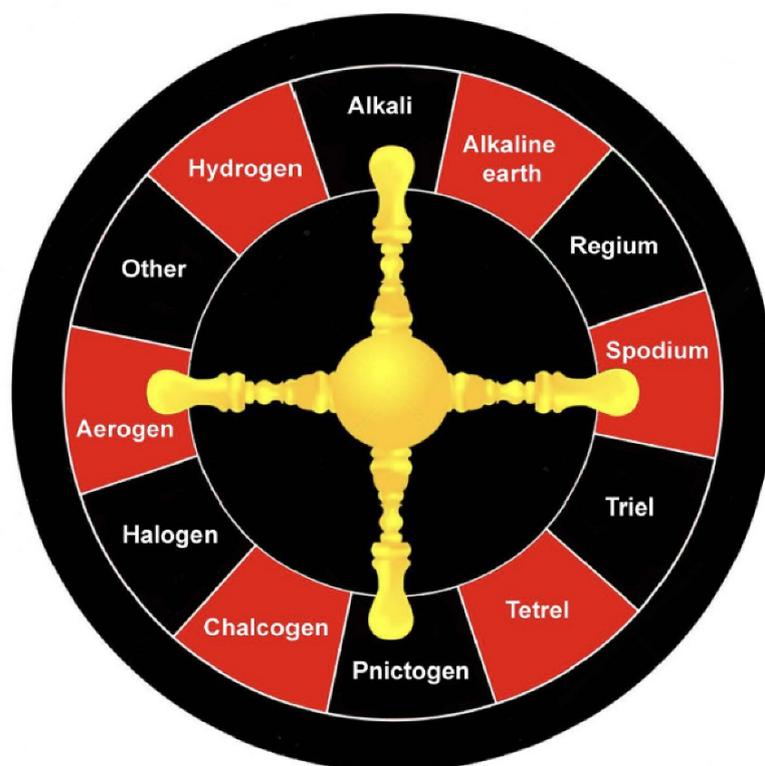


Figura 2. El manuscrito enviado a *Angew. Chem. Int. Ed.*, finalmente publicado en *Crystals* **2020**, 10, 180-1/180-27.

2. Nomenclatura

2a. *Desmotropía y polimorfismo*. Como sucede frecuentemente en química, hay definiciones borrosas cuando estas dependen de un fenómeno dinámico dependiente de la temperatura. Por ejemplo, un polimorfismo se da cuando una misma molécula cristaliza en dos o más estructuras diferentes. ¿Está claro? Pues no, para algunos eso incluye rotaciones alrededor de enlaces sencillos (conformaciones) pero no alrededor de enlaces dobles (configuraciones).^[5] Pero es bien sabido que las barreras alrededor de enlaces sencillos pueden ser superiores a las de enlaces dobles, como ocurre por ejemplo con los atropoisómeros.

Hay un caso de polimorfismo llamado incorrectamente polimorfismo tautomérico en el que dos tautómeros cristalizan en dos cristales diferentes. Es obvio que los tautómeros no son compuestos idénticos y por lo tanto sus cristales no son polimorfos; el origen de la confusión es que, en general, los tautómeros se equilibran cuando se disuelven, como los polimorfos. Desde 1887 existe un término para designar los cristales de dos tautómeros, **desmótopos**, siendo un término bien aceptado en países de cultura alemana. Cuando publiqué un artículo sobre este tema (Figura 3) se lo mandé a un grupo de cristalógrafos con los que había tenido relación.

Polymorphism and Desmotropy in Heterocyclic Crystal Structures

José Elguero*

Instituto de Química Médica, Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), Juan de la Cierva, 3, E-28006 Madrid, Spain

ABSTRACT: There is some confusion about concepts such as polymorphism, tautomerism, tautomeric polymorphism, and desmotropy. This perspective review tries to clarify them by defining their boundaries. Most examples are from heterocyclic compounds and differentiate between NH/OH tautomers (fast prototropy) and CH ones (slow prototropy). In the case of "tautomeric polymorphism" and "desmotropy" it is strongly recommended to use desmotropy. The different possibilities of crystallization of tautomers are examined in the conclusion.



Figura 3. Polimorfismo y desmotropía.^[6]

Varios me contestaron, entre ellos el gran Jack Dunitz, quien me escribió: *tiene razón pero los cristalógrafos estamos acostumbrados a "tautomeric polymorph", así que lo seguiremos usando.*

Eso me recuerda a una frase de "El hombre que mató a Liberty Valence" (John Ford, 1962): Esto es el Oeste, señor. Cuando la leyenda se convierte en realidad, hay que publicar la leyenda (*This is the West, sir. When the legend becomes fact, print the legend*).

En este tema la batalla entre la verdad y la tradición no está perdida.

2b. Extensión de las reglas de *Cahn-Ingold-Prelog* a estructuras supramoleculares. Con Pedro Cintas publicamos en 2015 un trabajo (Figura 4)^[7] donde se proponía una extensión de las reglas de prioridad dentro de las reglas de Cahn-Ingold-Prelog a estructuras supramoleculares (no basta con los pares libres, piensen en alcoholes y éteres). Fracasamos. Solo 6 citas y 4 de ellas nuestras. Y eso que el trabajo fue recogido en la revista de la IUPAC, *Chemistry International* (2016, 30) y por *Chemistry World*, el periódico de la Royal Society of Chemistry (2017, 27 de febrero).

Adding Only One Priority Rule Allows Extending CIP Rules to Supramolecular Systems

IBON ALKORTA,^{1*} JOSÉ ELGUERO,¹ AND PEDRO CINTAS²

¹*Instituto de Química Médica (CSIC), Madrid, Spain*

²*Departamento de Química Orgánica e Inorgánica, Facultad de Ciencias-UEX, Badajoz, Spain*

ABSTRACT There are frequent situations both in supramolecular chemistry and in crystallography that result in stereogenic centers, whose absolute configuration needs to be specified. With this aim we propose the inclusion of one simple additional rule to the Cahn-Ingold-Prelog (CIP) system of priority rules stating that noncovalent interactions have a fictitious number between 0 and 1. *Chirality* 27:339–343, 2015. © 2015 Wiley Periodicals, Inc.

Figura 4. Reglas de prioridad para estructuras supramoleculares publicadas en *Chirality* 2015, 27, 339-343.

Me parece que sigue siendo útil, supongo que será descubierta.

4. Comportamiento extraño.

El desdoblamiento espontáneo es un fenómeno muy conocido que ocupa un lugar privilegiado en química. Cuando en una solución coexisten dos enantiómeros en idénticas proporciones (mezcla racémica), al cristalizar, bien por evaporación bien por enfriamiento, el cristal puede contener ambos enantiómeros o bien solo uno de ellos; en este último caso se produce el fenómeno de desdoblamiento espontáneo. Si la barrera que los separa es muy alta, por ejemplo con un carbono sp^3 estereogénico, entonces se forma la misma cantidad de ambos enantiómeros; no es mismo número de cristales porque los hay pequeños y grandes (maduración de Ostwald). Si la barrera es baja, por ejemplo en caso de inversión del nitrógeno, los dos enantiómeros están en equilibrio y es probable que cristalice uno más que el otro, incluso que se forme solo uno (maduración de Viedma).

Pero como los dos procesos son equiprobables, si se repite la cristalización varias veces se aislarán ambos enantiómeros puros o mezclas donde cada uno de ellos predomine. Hay que usar una técnica de determinación del exceso enantiomérico en estado sólido, como el dicroísmo vibracional circular (VCD).^[8] En dos casos, ambos con el 2-propil-1H-bencimidazol,^[9, 10] producto que presenta quiralidad conformacional alrededor de un enlace Csp^2-Csp^3 , solo se forma un enantiómero o una mezcla rica en él. Esto es imposible porque viola la segunda ley de la termodinámica.

Resulta que varios autores han observado el mismo comportamiento y lo han "cripto-publicado", es decir, escondido en el manuscrito. Así que decidimos publicarlo de una manera escandalosa, como se muestra en la Figura 5,^[11] con la esperanza de suscitar una discusión, pero, ay qué dolor, este trabajo solo ha sido citado dos veces y ambas por nosotros.

Probablemente la gente sabe que va a dar mucho trabajo y que la explicación va a ser trivial. Recuerda al caso de los polimorfos que se desvanecen.



The strange case of achiral compounds which were reported to always crystallize in the same chiral group

Ibon Alkorta¹ • José Elguero¹Received: 7 November 2018 / Accepted: 26 December 2018 / Published online: 18 January 2019
© Springer Science+Business Media, LLC, part of Springer Nature 2019

Abstract

In the present review, one of the mysteries of chemistry, the non-stochastic preference for one enantiomer during crystallization processes, is discussed with some examples of the literature and one published by our own group.

Figura 5. Un extraño caso.^[11]

En resumen, temas abiertos que para mí ya no se cerrarán.

Bibliografía

- [1] G. Zadel, C. Eisenbraun, G.-J. Wolff y E. Breitmaier, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1994**, 33, 454-456.
- [2] B. L. Feringa, R. M. Kellog, R. Hulst, C. Zondervan y W. H. Kruizinga, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1994**, 33, 1458-1459.
- [3] G. Kaupp y T. Marquardt, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1994**, 33, 1459-1461.
- [4] M. Avalos, R. Babiano, P. Cintas, J. L. Jiménez, J. C. Palacios y L. D. Barron, *Chem. Rev.* **1998**, 98, 2391–2404.
- [5] El polimorfismo según Gavezzotti fue definido mediante tres puntos en 2007: Polymorphs are a set of crystals (a) *with identical chemical composition*; (b) *made of molecules with same molecular connectivity, but allowing for different conformations by rotation about single bonds*, (c) *with distinctly different three-dimensional translationally periodic symmetry operations*, y por Purojit y Venugoplan en 2009: *thus it is defined as the ability of a substance to exist as two or more crystalline phases that have different arrangements or conformations of the molecules in the crystal lattice*.
- [6] J. Elguero, *Cryst. Growth Des.* **2011**, 11, 4731–4738.
- [7] I. Alkorta, J. Elguero, P. Cintas, *Chirality* **2015**, 27, 339–343.
- [8] VCD: P. J. Stephens, *J. Phys. Chem.* **1985**, 89, 748–752. F Portal Ureña, J. R. Avilés, J.J. López González, *J. Phys. Chem. A* **2008**, 112, 7887–7893. P. G. Rodríguez Ortega, M. Montejo, J. J. López González, *ChemPhysChem* **2015**, 16, 342–352.
- [9] M. M. Quesada Moreno, A. J. Cruz-Cabeza, J. R. Avilés-Moreno, P. Cabildo, R. M. Claramunt, I. Alkorta, J. Elguero, F. J. Zúñiga, J. J. López-González, *J. Phys. Chem. A* **2017**, 121, 5665–5674.
- [10] F. J. Zúñiga, A. J. Cruz-Cabeza, X. M. Aretxabaleta, N. de la Pinta, T. Breczewski, M. M. Quesada Moreno, J. R. Avilés-Moreno, J. J. López-González, R. M. Claramunt, J. Elguero, *IUCrJ.* **2018**, 5, 706–715.
- [11] I. Alkorta, J. Elguero, *Struct. Chem.* **2019**, 20, 633–636.

QUÍMICA ORGÁNICA

S. Sierra, M. V. Gomez, A. I. Jiménez, A. Pop, C. Silvestru, M. L. Marín, F. Boscá, G. Sastre, E. Gómez-Bengoa, E. P. Urriolabeitia, Stereoselective, Ruthenium-Photocatalyzed Synthesis of 1,2- Diaminotruxinic Bis-amino Acids from 4Arylidene-5(4H)oxazolones, *J. Org. Chem.* 2022, 87, 3529–3545.

<https://doi.org/10.1021/acs.joc.1c03092>

S. López, I. Gracia, R. Plaza-Pedroche, J. F. Rodríguez, J. M. Pérez-Ortiz, J. Rodríguez-López, M. J. Ramos, In Vitro Antioxidant and Pancreatic Anticancer Activity of Novel 5-Fluorouracil-Coumarin Conjugates. *Pharmaceutics* 2022, 14, 2152.

<https://doi.org/10.3390/pharmaceutics14102152>

TECNOLOGÍA DE ALIMENTOS

J. Gombau, P. Cabanillas, A. Mena, J. Pérez-Navarro, J. Ramos, A. Torner, F. Fort, S. Gómez-Alonso, E. García-Romero, J. M. Canals, F. Zamora. Comparative study of volatile substances and ellagitannins released into wine by *Quercus pyrenaica*, *Quercus petraea* and *Quercus alba* barrels. *OENO One* 2022, 56(3), 243–255.

<https://doi.org/10.20870/oeno-one.2022.56.3.5551>

A. Valdebenito, J. Nahuelcura, C. Santander, P. Cornejo, B. Contreras, S. Gómez-Alonso, A. Ruiz. Physiological and Metabolic Effects of the Inoculation of Arbuscular Mycorrhizal Fungi in *Solanum tuberosum* Crops under Water Stress. *Plants* 2022, 11, 2539.

<https://doi.org/10.3390/plants11192539>

INGENIERÍA QUÍMICA

A. Alcazar-Ruiz, F. Dorado, L. Sánchez-Silva. Influence of Temperature and Residence Time on Torrefaction Coupled to Fast Pyrolysis for Valorizing Agricultural Waste. *Energies* 2022, 15, 7914.

<https://doi.org/10.3390/en15217914>

H. L. Medina-Díaz, I. Acosta, M. Muñoz, F. J. López-Bellido, J. Villaseñor, J. Llanos, L. Rodríguez, F. J. Fernández-Morales. A classical modelling of abandoned mine tailings' bioleaching by an autochthonous microbial culture. *Journal of Environmental Management* 2022, 323, 116251.

<https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2022.116251>

En el próximo número de Molécula...

El próximo número de MOLÉCULA incluirá información sobre actividades realizadas durante el mes de noviembre, dando especial relevancia a las actividades que se realizarán durante la festividad de San Alberto Magno, patrón de esta nuestra Facultad.

#DivulgaUCLM

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