



REVISTA

MOLÉCULA

Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas

<https://moleculauclm.wordpress.com>

Nº192 Época III  
Octubre 2024

Noticias destacadas

Conferencias

Próximas actividades con motivo de San Alberto Magno

Tesis doctorales

Artículo PROMOLS

<b>Noticias destacadas</b>	<b>P. 3</b>
Llega "ARGACIENCIA" a Argamasilla de Calatrava	
La UCLM lanza un proyecto piloto de noticias en lectura fácil para acercar la ciencia a todos los públicos	
Residuos agrícolas como solución verde: cáscaras de pistacho, almendra y nuez para capturar CO <sub>2</sub>	
<b>Premios Nobel</b>	<b>P. 11</b>
John Hopfield y Geoffrey Hinton ganan el Premio Nobel de Física 2024 por hacer que "las máquinas aprendan" y sentar las bases de la inteligencia artificial	
Qué son los microARN por los que Victor Ambros y Gary Ruvkun ganaron el Premio Nobel de Medicina	
Premio Nobel de Química a David Baker por el diseño computacional de proteínas, y a Demis Hassabis y John M. Jumper por la predicción de estructuras proteicas.	
Nobel de Química a la estructura de las proteínas una vez más... ¿la última?	
<b>Conferencias</b>	<b>P. 22</b>
Why you should care about exponential smoothing?	
VIERNES EN EL IRICA. Gestión de la investigación. Otra mirada de la ciencia.	
<b>Festividad de San Alberto Magno</b>	<b>P. 25</b>
XII Olimpiada Científico-Tecnológica de Castilla-La Mancha	
IV Certamen Póster Científico Digital 2024	
IV Jornada Regional de Educación en Ciencias, Tecnología e Ingeniería	
3º Edición concurso "Cómo hemos cambiado"	
XIII Certamen Fotográfico	
<b>Tesis doctoral</b>	<b>P. 30</b>
Marina Pinzón García	
<b>Estancia</b>	<b>P. 35</b>
Diego Jesús González Serrano	
<b>PROMOLS</b>	<b>P. 37</b>
Los fitoquímicos, el WhatsApp de las planta	
<b>Artículos</b>	<b>P. 40</b>

## PRESENTACIÓN

En esta edición de Octubre encontramos noticias interesantes relacionadas con el ámbito científico y divulgación, así como información acerca de las conferencias impartidas durante este mes. Se desvelan también los ganadores de algunos Premios Nobel y Marina Pinzon nos resume su tesis doctoral.

También se detallan los próximos eventos que tendrán lugar con motivo de la Festividad de San Alberto Magno, patrón de nuestra Facultad durante el mes de Noviembre.

## Llega "ARGACIENCIA" a Argamasilla de Calatrava



El viernes 25 de octubre tuvo lugar una jornada de divulgación científica denominada ARGACIENCIA en la localidad de Argamasilla de Calatrava. Esta actividad reunió a escolares, estudiantes y ciudadanos de todas las edades en una experiencia que buscaba tanto mostrar la ciencia como despertar el interés por la ciencia y la tecnología.

Esta iniciativa se enmarca dentro del programa "Ciencia Circular" de la UCLM, que pretende acercar la Ciencia que se desarrolla en esta Universidad, de la mano de sus protagonistas a los municipios de la región, preferiblemente de científicos oriundos de cada población que vuelven a su tierra. La organización de la misma corrió a cargo de las profesoras: María del Pilar Prieto Núñez-Polo (Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas), María Ángeles Osorio Gijón (CEIP Virgen del Socorro) y Ana Recuero Sáez (CEIP Rodríguez Marín) y contó con el apoyo y la financiación de la Corporación Municipal de Argamasilla de Calatrava, representada por Jesús Ruiz (Ilmo. alcalde de la localidad) y Sergio Gijón, teniente de alcalde.

El programa contó con varias actividades. Por la mañana, tras la inauguración en presencia de las autoridades municipales, se mostró la exposición “Mujeres ingenieras en el cómic”, presentada por la Catedrática de la Escuela de Ingenieros Industriales de la UCLM Gloria Patricia Rodríguez.



A continuación se realizaron talleres urbanos, con experimentos sencillos y llamativos a cargo de estudiantes de tercer grado de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas y del Instituto Regional de Ciencia Aplicada (IRICA). Se eligieron para ello títulos sugerentes tales como: “Ja-Boom”, “El poder del soplo”, “El volcán de espuma”, “La pasta del elefante”, “La tinta invisible”, “Hidrogel”, “Trampa de CO<sub>2</sub>”, “Tejiendo Nylon 6,6”, “Jamón York con yodo” y “Pañales en la nieve”.



En su sesión vespertina, la jornada finalizó con la conferencia “Rompiendo mitos: Innovación y avances en la lucha contra el cáncer”, impartida por el investigador, oriundo de Argamasilla, Amancio Carnero, investigador del Instituto de Biomedicina del CSIC de Sevilla. Al finalizar la conferencia, el Ayuntamiento ofreció un aperitivo.



La jornada contó con la participación de un gran número de personas. Por este motivo, el alcalde se ha mostrado convencido de que habrá futuras ediciones de ARGACIENCIA.

**D<sup>a</sup> María del Pilar Prieto Núñez-Polo**  
**Catedrática de la Universidad de Castilla-La Mancha**

## La UCLM lanza un proyecto piloto de noticias en lectura fácil para acercar la ciencia a todos los públicos

La Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) ha puesto en marcha un proyecto piloto para adaptar noticias de divulgación científica a formato de lectura fácil. La iniciativa, impulsada por la profesora de la Facultad de Ciencias Ambientales y Bioquímica María José Ruiz García en colaboración con el Gabinete de Comunicación de la institución, cuenta con el respaldo del Vicerrectorado de Internacionalización, el apoyo financiero de la Diputación de Toledo y la participación de Plena inclusión Castilla-La Mancha.



En la presentación del proyecto, tanto el vicerrector Raúl Martín como el director gerente de Plena inclusión Castilla-La Mancha coincidieron en señalar que el objetivo principal es “acercar el conocimiento científico a colectivos con necesidades especiales, facilitando el acceso a contenidos científicos a personas con dificultades de comprensión lectora”.

Para lograrlo, se seleccionarán cinco noticias de divulgación científica, todas ellas de interés para la ciudad de Toledo y su provincia. Estas noticias serán adaptadas a formato de lectura fácil por un equipo especializado de Plena inclusión, entidad de referencia en el ámbito de la discapacidad intelectual y la accesibilidad cognitiva.

Según indicó Collado, “la lectura fácil es una herramienta clave para garantizar el derecho a la información de todas las personas. Consiste en simplificar tanto el lenguaje como la estructura del texto, haciendo la información más comprensible para colectivos que presentan dificultades de comprensión”. Estas personas incluyen, entre otros, a quienes tienen discapacidad intelectual, problemas de aprendizaje o personas mayores que encuentran barreras en la lectura tradicional.

Por su parte, Raúl Martín señaló que la iniciativa “es un paso adelante en nuestra responsabilidad como institución educativa para hacer que el conocimiento científico sea accesible para toda la sociedad, sin dejar a nadie atrás”. Asimismo, ha subrayado la importancia de contar con el apoyo de entidades como Plena inclusión, cuyo equipo será el encargado de adaptar los textos, y de los profesionales del Gabinete de Comunicación de la UCLM, “garantizando que se mantenga el rigor informativo y el carácter divulgativo de las noticias originales”.

También asistió a la presentación la profesora María José Ruiz García, que cuenta con amplia experiencia en divulgación inclusiva. Doctora en Química y cofundadora de la asociación para la divulgación de la ciencia y el fomento del pensamiento crítico ‘Ciencia a la Carta’, actualmente compagina su labor docente e investigadora, centrada en la síntesis de compuestos organometálicos, con actividades de divulgación presenciales y en medios de comunicación.

Participante habitual en la Semana de la Ciencia o ‘Pint of Science’, entre otras actividades de divulgación, es también la responsable en la UCLM del proyecto IDEATE, que favorecerá la implementación de políticas EDI (educación, diversidad, inclusión) en cinco universidades europeas.

**15/10/2024**

**Gabinete de Comunicación UCLM**

## Residuos agrícolas como solución verde: cáscaras de pistacho, almendra y nuez para capturar CO<sub>2</sub>



Los cultivos de pistacho, almendra y nuez están ganando relevancia, tanto por su valor económico como por su potencial como fuente de biomasa renovable. España se posiciona como uno de los principales productores de frutos secos en Europa, con más de 700 000 hectáreas dedicadas a la producción de almendras y nueces, siendo Andalucía y Castilla-La Mancha las regiones más destacadas.

A nivel global, Estados Unidos lidera la producción de almendra con más del 80 % del mercado, mientras que Irán y Estados Unidos dominan el sector del pistacho. Estos cultivos generan grandes cantidades de residuos, como cáscaras y restos de poda, que pueden ser aprovechados para desarrollar materiales sostenibles, como carbones activados o biocombustibles. Este enfoque no solo contribuye a la reducción de desechos, sino que también promueve una agricultura más sostenible y respetuosa con el medio ambiente, en consonancia con la creciente demanda de soluciones ecológicas a nivel mundial.

### **Biocarbones activados**

El carbón activado o carbón activo es un material poroso ideal para la adsorción de contaminantes –los atrae y retiene en su superficie– en aplicaciones como la purificación de agua y aire.

Para producir carbones activados a partir de biomasa, se utilizan tecnologías termoquímicas, y la activación química o física es un método eficaz y prometedor. Este proceso convierte residuos agrícolas, como las cáscaras de pistacho, almendra y nuez, en materiales con alta porosidad.

Aunque se han logrado avances significativos, aún es necesario optimizar los procesos de activación para mejorar el rendimiento y reducir los costes de producción.



El uso de biomasa como materia prima renovable para la producción de biocarbones, junto con el desarrollo de tecnologías más eficientes, abre nuevas oportunidades para el aprovechamiento sostenible de residuos agrícolas y la creación de productos de valor añadido que contribuyen a la economía circular.

Además, la producción y uso de biocarbones están estrechamente vinculados a varios Objetivos de Desarrollo Sostenible (ODS), ya que ofrecen soluciones tanto para el medio ambiente como para la economía circular, disminuyendo la dependencia de combustibles fósiles.

Entre las diversas técnicas para la producción de carbones activados que existen, la activación física es una alternativa más eficiente y sostenible si la comparamos con la activación química.

En la activación física se emplean gases como vapor de agua o dióxido de carbono a altas temperaturas, lo que permite generar una estructura porosa bien definida en el material precursor sin recurrir a productos químicos adicionales. Aunque este proceso requiere más tiempo y temperaturas más elevadas, produce carbones activados más estables y con menor impacto ambiental, ya que no genera residuos tóxicos.

En contraste, la activación química utiliza agentes como ácido fosfórico o hidróxido de potasio a temperaturas más bajas, pero implica el uso de sustancias corrosivas, lo que puede generar subproductos contaminantes. La activación física, además de ofrecer carbones de alta calidad con múltiples aplicaciones –como en el tratamiento de la contaminación del agua, la captura de dióxido de carbono y el almacenamiento de energía–, minimiza los riesgos ambientales y reduce los costos asociados al tratamiento de residuos.

El mercado global de carbón activado está experimentando un crecimiento notable, impulsado por su amplia gama de aplicaciones industriales. Se prevé que crezca a una tasa anual del 2,9 % entre 2020 y 2028, alcanzando un valor estimado de 8,12 mil millones de dólares para el final de este período.

A nivel regional, Asia-Pacífico lidera este crecimiento, impulsado por la creciente demanda en países como China, India y otras economías emergentes, donde el aumento de la contaminación ha incrementado la necesidad de soluciones de purificación. América del Norte también muestra un crecimiento destacado, con un papel clave en sectores como la industria farmacéutica y alimentaria, donde el uso de carbón activado es cada vez más importante.

## Captura de CO<sub>2</sub>

En la industria, los métodos más comunes para la captura de dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), como la adsorción por cambio de presión o por cambio de temperatura, emplean materiales como zeolitas y carbones activados que atrapan el CO<sub>2</sub> en sus poros.

Sin embargo, estos procesos presentan varios inconvenientes: consumen grandes cantidades de energía debido a los constantes cambios de presión o temperatura, los materiales se desgastan con el uso prolongado y muchos de ellos, como las zeolitas, provienen de fuentes no renovables.

Los biocarbones activados, obtenidos a partir de residuos agrícolas como cáscaras de pistacho, almendra o nuez, surgen como una alternativa más sostenible. Al ser de origen renovable, su producción reduce el impacto ambiental y contribuye a la economía circular. Además, estos biocarbones pueden retener CO<sub>2</sub> de manera eficiente, al igual que los materiales tradicionales, pero con menores costos y un impacto ambiental reducido. En resumen, representan una solución prometedora para hacer la captura de carbono más ecológica y asequible.

## **Reactivación y uso infinito**

En muchas aplicaciones industriales, el carbón activado puede reutilizarse una vez que ha llegado a su capacidad máxima de adsorción, un estado conocido como saturación. En este punto, el material pierde su capacidad para adsorber nuevos contaminantes, pero esto no significa el fin de su vida útil. Mediante un proceso de reactivación térmica, es posible restaurar sus propiedades y prolongar su uso.

El proceso de reactivación implica someter el carbón a altas temperaturas para eliminar los compuestos adsorbidos. Primero, se seca el material, luego se eliminan los compuestos volátiles a través de evaporación y, finalmente, los compuestos no volátiles se descomponen, dejando una estructura amorfa.

A través de la aplicación de gases, los microporos del carbón se regeneran, permitiendo que el material recupere su capacidad de adsorción y pueda reutilizarse en diversas aplicaciones. Este proceso no solo extiende la vida útil del carbón activado, sino que también reduce la necesidad de producir nuevos materiales, por lo que supone una solución más sostenible.

Se espera que la innovación tecnológica en la producción de carbón activado, como el uso de biomasa y otras fuentes de carbono sostenibles, desempeñe un papel fundamental en el crecimiento futuro del mercado. Este panorama positivo está respaldado por las crecientes regulaciones ambientales y el enfoque global en prácticas más sostenibles, lo que refuerza la importancia de soluciones ecológicas en este sector.

**María Luz Sánchez Silva, Catedrática de Universidad en el Área de Ingeniería Química, Universidad de Castilla-La Mancha**

Este artículo fue publicado originalmente en [The Conversation](#). Lea el [original](#).

John Hopfield y Geoffrey Hinton ganan el Premio Nobel de Física 2024 por hacer que "las máquinas aprendan" y sentar las bases de la inteligencia artificial



Los profesores de las universidades de Princeton (EE.UU.) y de Toronto (Canadá) ganaron el premio.

**El premio Nobel de Física 2024 ha ido a parar a quienes han sentado las bases para que "las máquinas aprendan", un aspecto clave para el desarrollo de la inteligencia artificial.**

Los profesores John Hopfield (91) y Geoffrey Hinton (76) han sido galardonados este martes por la Real Academia Sueca de las Ciencias por sus "descubrimientos e invenciones" que han sido "fundamentales para el aprendizaje automático con redes neuronales artificiales", declaró el jurado.

El nombre de los premiados fue leído por Hans Ellegren, secretario general de la organización que otorga los premios científicos más importante del mundo, desde Estocolmo (Suecia).

Hopfield es profesor en la Universidad de Princeton (Estados Unidos), mientras que Hinton da clases en la Universidad de Toronto (Canadá).

**"Estoy estupefacto.** No tenía idea de que esto sucedería", declaró Hinton, a quien se ha apodado como "el padrino" de la inteligencia artificial.



"Los premiados han buscado copiar el funcionamiento del cerebro", aseguró el jurado del Nobel.

## Las bases de la IA

"El premio de este año es sobre máquinas que aprenden", anunció el secretario general de la Academia sueca.

Hopfield creó **una memoria asociativa** en 1982, la cual podía almacenar y reconstruir imágenes y otros tipos de patrones en los datos.

Hinton, por su parte, desarrolló un método que permite a una máquina encontrar propiedades en los datos de forma autónoma y, por lo tanto, realizar tareas como **identificar elementos específicos en imágenes**.

El trabajo de los científicos ha servido para que las computadoras sean capaces de imitar funciones humanas como la memoria y el aprendizaje.

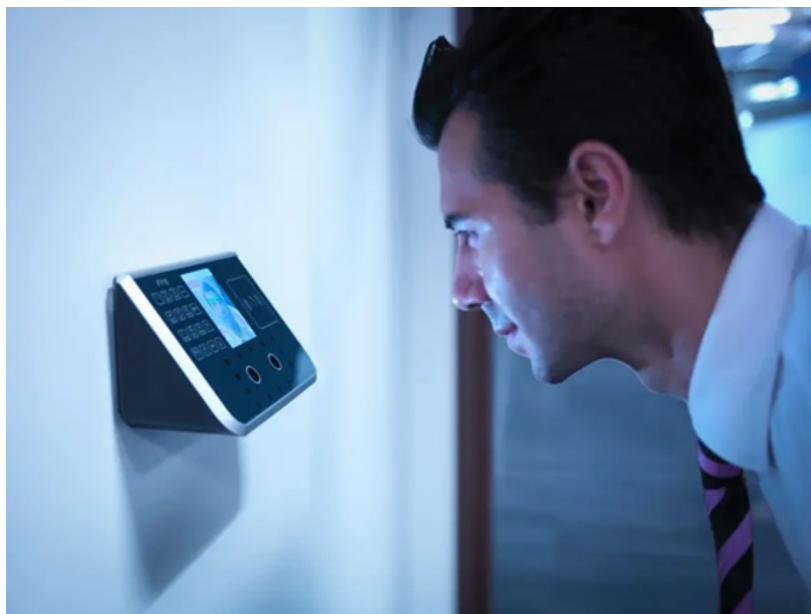
¿Cómo? Utilizando conceptos y métodos fundamentales de la física, los científicos desarrollaron tecnologías que utilizan estructuras en redes para procesar información. Algunas de esas estructuras ya se utilizan a diario.

**"El aprendizaje es una capacidad fascinante del cerebro humano"**, afirmó Ellen Moons, presidenta del Comité Nobel de Física, luego de leerlos los nombres de los laureados.

"Nosotros podemos reconocer imágenes y asociarlas con memorias y experiencias pasadas. Billones de neuronas que están conectadas entre sí nos dan una capacidad cognitiva única", apuntó la miembro del jurado, quien indicó que "las redes neuronales artificiales (desarrolladas por los premiados) están inspiradas en las redes neuronales de nuestro cerebro".

Moons aseguró que el trabajo de los premiados no solo ha permitido avances en la astrofísica o el estudio de las partículas, sino que ya es "nuestra vida cotidiana", a través de tecnologías como "el reconocimiento facial y la traducción de lenguajes".

La investigación de Hinton allanó el camino para sistemas de inteligencia artificial como ChatGPT.



El trabajo de Hopfield y Hinton ha permitido el desarrollo de tecnologías como la de reconocimiento facial.

## Avance con luces y sombras

La presidenta del Comité Nobel de Física aseguró que los estudios de Hopfield y Hinton pueden "ayudar a los seres humanos a **tomar decisiones más rápidas y confiables a la hora de diagnosticar enfermedades**".

Sin embargo, también admitió que abren las puertas a situaciones peligrosas y de riesgo. Esto ya fue advertido por el propio Hinton, quien en 2023 renunció a su puesto como asesor de Google alertando sobre los riesgos que implicaba el rápido desarrollo de la inteligencia artificial.

Nada más conocer sobre la concesión del premio a su persona, el profesor británico-canadense insistió en sus llamadas de atención.

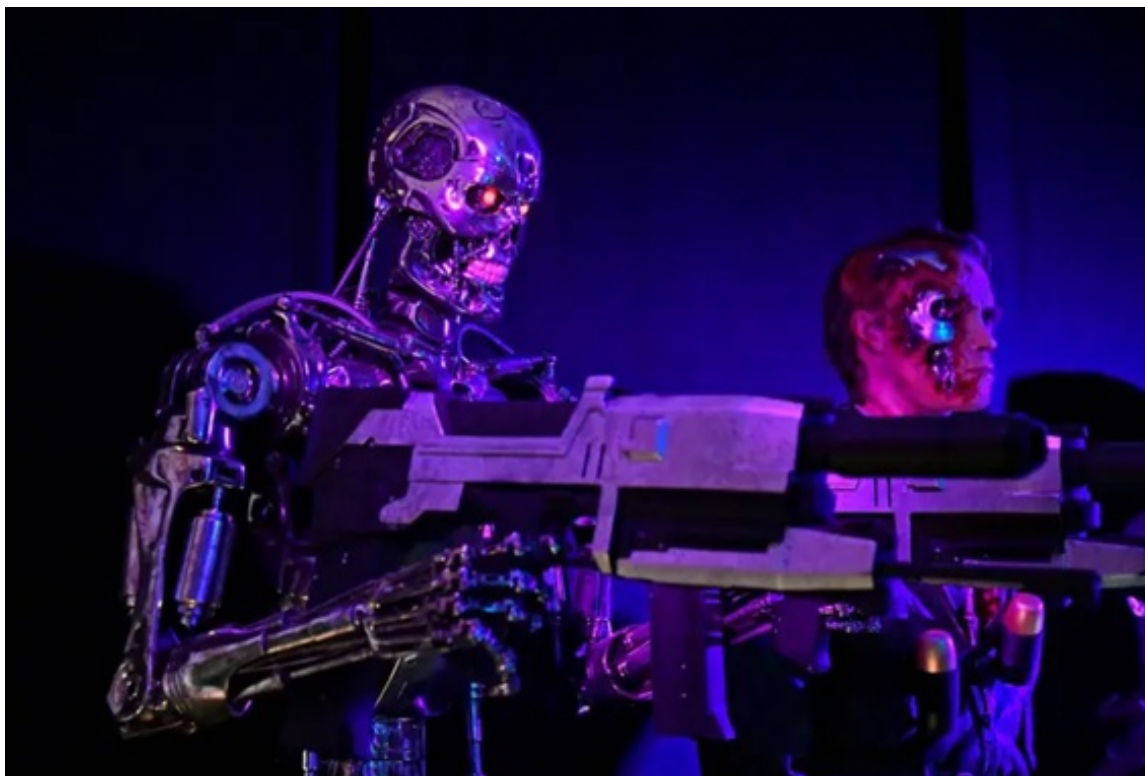
**"No tenemos experiencia sobre lo que es tener cosas más inteligentes que nosotros"**, declaró Hinton por teléfono en la conferencia de prensa del Nobel.

"Va a ser maravilloso en muchos aspectos, en áreas como la atención médica", aseveró, pero acto seguido indicó que "también tenemos que preocuparnos por una serie de posibles consecuencias negativas. En particular, la amenaza de que **estas cosas se salgan de control**".

# PREMIOS NOBEL

En una entrevista a la BBC, el ahora premiado realizó un aterrador pronóstico que parece salido del guión de una película de Hollywood.

"Mi suposición es que, dentro de cinco o 20 años, habrá una probabilidad del 50% de que tengamos que afrontar el problema de que la inteligencia artificial intente tomar el control de nuestras vidas", dijo.



Hinton cree que la humanidad podría tener que enfrentar en un futuro cercano un dilema parecido al de la película "Terminator", donde las máquinas se alzan contra los humanos.

**08/10/2024**

**Noticia BBC**

Qué son los microARN por los que Victor Ambros y Gary Ruvkun ganaron el Premio Nobel de Medicina



Victor Ambros y Gary Ruvkun, los ganadores del Premio Nobel de Medicina

**Victor Ambros y Gary Ruvkun ganaron este lunes el Premio Nobel de Medicina.**

Los dos científicos estadounidenses **descubrieron los microARN**, una nueva clase de diminutas moléculas de ARN que desempeñan un papel crucial en la regulación de los genes.

Su revolucionario descubrimiento en el pequeño gusano *C. elegans* reveló un principio completamente nuevo de regulación genética, que resultó ser esencial para los organismos pluricelulares, incluido el ser humano.

Durante décadas, la comunidad científica prestó poca atención a este descubrimiento. Según la Fundación Nobel, se pensaba que este mecanismo era "una peculiaridad" de un gusano, algo "probablemente irrelevante para los humanos y otros animales más complejos". Pero no. El trabajo de Ambros y Ruvkun ayudó a explicar **cómo funcionan nuestros genes dentro del cuerpo humano y cómo eso da lugar al desarrollo de los distintos tejidos en nuestro organismo.**

De hecho, "ahora se sabe que el genoma humano codifica más de 1.000 microARN", explica la Fundación Nobel.

Los ganadores se repartirán un premio de 11 millones de coronas suecas (aproximadamente US\$1 millón).

## Particularidades genéticas

Todas las células del cuerpo humano contienen la misma información genética en bruto, encerrada en nuestro ADN.

Pero, a pesar de partir de la misma información genética, las células del cuerpo humano son **muy diferentes en forma y función**.

Los impulsos eléctricos de las células nerviosas son distintos de los latidos rítmicos de las células cardíacas. La central metabólica que es una célula hepática es distinta de una célula renal que filtra la urea de la sangre. La capacidad de detección de la luz de las células de la retina es distinta de la de los glóbulos blancos que producen anticuerpos para combatir las infecciones.

Toda esta variedad puede surgir del mismo material de partida gracias a la **expresión genética**.

Los científicos estadounidenses fueron los primeros en descubrir los microARN y cómo estos ejercen un **control sobre la forma en que los genes se expresan** de manera diferente en los distintos tejidos.



Los ganadores compartirán un premio de cerca de US\$1 millón

Sin la capacidad de controlar la expresión génica, cada célula de un organismo sería idéntica, por lo que los microARN ayudaron a posibilitar la **evolución de formas de vida complejas**.

La regulación anómala de los microARN puede contribuir al cáncer y a algunas enfermedades como la pérdida de audición congénita y los trastornos óseos. Un ejemplo es el síndrome DICER1, que provoca cáncer en diversos tejidos y está causado por mutaciones que afectan a los microARN.



## Cómo funciona

Ambros y Ruvkun investigaron sobre el gusano nematodo *C. elegans*.

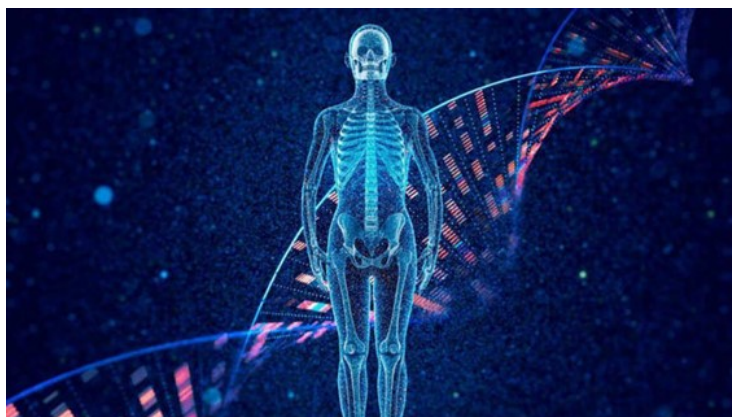
**"Vieron unos gusanos que parecían un poco raros y decidieron entender por qué",** cuenta Olle Kämpe, miembro del Comité Nobel.

Experimentaron con una forma mutante del gusano que no desarrollaba algunos tipos de células. Y finalmente dieron con pequeños fragmentos de material genético o microARN que eran esenciales para el desarrollo de los gusanos.

Así es como funciona:

- Nuestro ADN contiene un gen o instrucción genética.
- Nuestras células hacen una copia, llamada ARN mensajero o simplemente ARNm (lo recordarás de las vacunas COVID).
- Este ARN sale del núcleo de la célula y ordena a las fábricas de proteínas de la célula que empiecen a producir una proteína específica.
- Pero los microARN se interponen en el camino adhiriéndose al ARN mensajero y detienen su funcionamiento.
- En esencia, el microARN ha impedido que el gen se exprese en la célula.

Otros trabajos demostraron que no se trata de un proceso exclusivo de los gusanos, sino de **un componente esencial de la vida en la Tierra.**



Cuerpo humano

**"Su trabajo pionero sobre la regulación genética por microARN allanó el camino a investigaciones sobre terapias novedosas para enfermedades devastadoras como la epilepsia,** pero también nos abrieron los ojos a la maravillosa maquinaria que controla estrechamente lo que ocurre en nuestras células", dijo a la BBC Janosch Heller de la Universidad de la Ciudad de Dublín.

**07/10/2024**

**Noticia BBC**

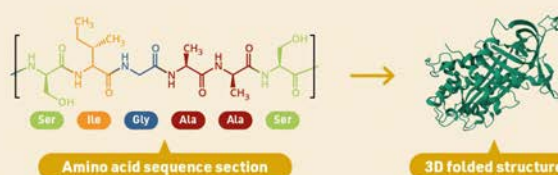
Premio Nobel de Química a David Baker por el diseño computacional de proteínas, y a Demis Hassabis y John M. Jumper por la predicción de estructuras proteicas.

## The 2024 Nobel Prize in Chemistry

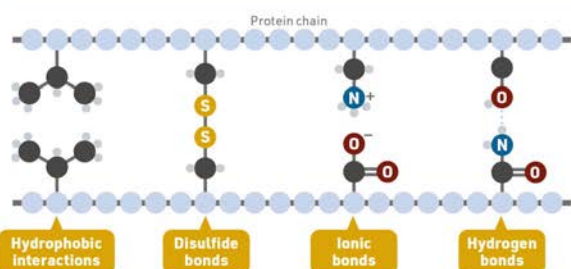


The 2024 Nobel Prize in Chemistry was awarded to **David Baker** for computational protein design and to **Demis Hassabis** and **John M. Jumper** for protein structure prediction.

Proteins are important biological molecules formed from 20 naturally occurring amino acids. Proteins form folded 3D structures which are key to their function and properties, but the exact way in which they fold is hard to predict. A protein with just 100 amino acids could have  $10^{47}$  different 3D structures.



In 2020, **Demis Hassabis**, **John Jumper** and their co-workers unveiled an artificial intelligence model called AlphaFold2 to predict 3D folded structures of proteins. This is notoriously difficult because of the range of intermolecular forces in protein structures.



AlphaFold2 analyses amino acid sequences and evaluates how they might interact with each other. It has since been used to predict the structures of the almost 200 million known proteins.

**David Baker** developed Rosetta, software that also attempts to predict protein structures. He wondered if it was possible to work in the other direction: to start with a protein structure and use the software to work out its amino acid sequence.



Rosetta uses a database of protein structures and searches it for fragments with the same structure as the desired structure, pieces them together, then suggests an amino acid sequence based on this.

Baker's research group succeeded in doing this in 2003 to create an entirely new protein. They have since produced many other novel proteins that do not occur naturally.

### WHY DOES THIS RESEARCH MATTER?

Being able to predict and design protein structures has benefits for the design of protein-based drugs, sensors, vaccines, catalysts, and more. It also aids our understanding of existing proteins and how they interact with other molecules.

Nobel Prize in Chemistry press release: <https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2024/press-release/>



© Andy Brunning/Compound Interest 2024 – compoundchem.com | @compoundchem  
This graphic is shared under a CC Attribution-NonCommercial-NoDerivatives 4.0 licence



Para más información, consulte el siguiente [enlace](#).

Nobel de Química a la estructura de las proteínas una vez más... ¿la última?



Anuncio del premio Nobel de Química, el 9 de octubre de 2024. De izquierda a derecha, David Baker, Demis Hassabis y John M. Jumper. Nobel Prize/YouTube, CC BY-SA

Las proteínas, esas conocidas moléculas compuestas por secuencias de aminoácidos, están presentes en nuestra alimentación cotidiana y son muy importantes en todos los procesos de la vida. Las combinaciones de los 20 aminoácidos esenciales –desde decenas a miles generan todas ellas.

El estudio de su composición, función y estructura recibe la atención de los investigadores y de la Academia Sueca de Ciencias desde hace mucho tiempo: lo han reconocido en los premios Nobel de 1957, 1962, 1972, 1982, 1983, 2004, 2012 y, ahora, 2024.



©Terezia Kovalova/The Royal Swedish Academy of Sciences

La proteína artificial Top7, diseñada por Brian Kuhlman y Gautam Dantas en el laboratorio de David Baker en la Universidad de Washington. Terezia Kovalova/The Royal Swedish Academy of Sciences

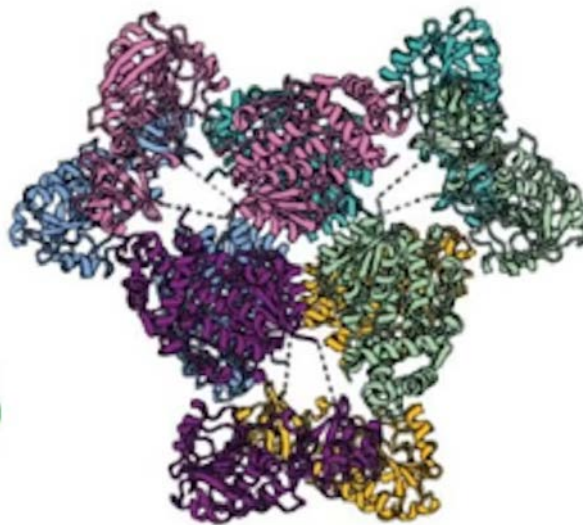
¿Será este el último premio Nobel relacionado con las proteínas? Muy probablemente, ya que la contribución de David Baker, Demis Hassabis y John M. Jumper, los galardonados de este año, ha resuelto de un plumazo dos de los grandes retos de la bioquímica.

Por un lado, ha permitido conocer la estructura tridimensional de unas 200.000 proteínas – prácticamente, todas las conocidas– con ayuda de la inteligencia artificial.

Por otro, hace posible “crear” proteínas, esto es, identificar la secuencia de aminoácidos que forma una proteína con la estructura tridimensional deseada.

## Deconstruyendo los ladrillos de la vida

¿Y para qué interesa conocer la estructura tridimensional de las proteínas y tener la capacidad de crearlas a demanda? Para el beneficio de la humanidad, como reclamaba Alfred Nobel en el testamento que da origen a estos galardones.



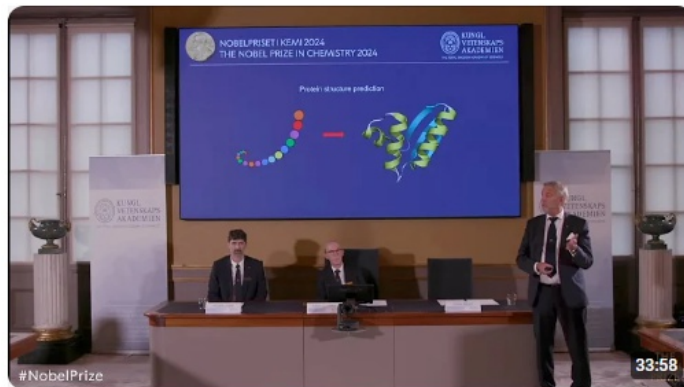
Una enzima (una proteína) bacteriana que causa la resistencia a antibióticos.  
Terezia Kovalova/The Royal Swedish Academy of Sciences

Saber por qué se produce la resistencia a antibióticos, cuál es el mecanismo para que se desarrollen determinadas enfermedades, entender cómo algunas bacterias descomponen material plástico, acelerar los procedimientos para crear vacunas, crear fármacos específicos o personalizados o nuevos nanomateriales, es, tras las aportaciones de los galardonados, mucho más fácil, rápido y accesible al conjunto de los investigadores de diversos campos.

## Para poder construir desde cero

David Baker es especialista en desarrollar programas de química computacional para, estableciendo la premisa de la estructura 3D deseada, identificar qué aminoácidos componen la estructura primaria de la proteína.

En las propias palabras de Baker: “Si quieres construir un avión, no empieces modificando un pájaro, sino que comprendes los primeros principios de la aerodinámica y construyes máquinas voladoras a partir de ellos”. Esto cambió ya en 2003 la estrategia antes basada en la modificación de proteínas conocidas.



Anuncio del Premio Nobel de Química por el profesor Hans Ellegren, secretario general de la Real Academia Sueca de Ciencias, el 9 de octubre de 2024.

Por su parte Demis Hassabis y John Jumper, este con menos de 40 años, han aprovechado los desarrollos de la inteligencia artificial inicialmente aplicados en juegos de mesa.

El programa Deep Blue consiguió derrotar al campeón del mundo de ajedrez Gary Kasparov en 1997 y después se retiró, ya que no era ese su objetivo final. De la misma manera Alpha Go consiguió derrotar al campeón del mundo de GO en 2016. El primero utilizaba la potencia de cálculo y bases de datos de partidas. El segundo conseguía aprender a partir de las reglas del juego.

Con estas mismas herramientas, los científicos abordan el objetivo final: desentrañar la estructura de moléculas complejas como las proteínas y conseguir diseñar nuevas estructuras y aplicaciones de estas moléculas tan transcendentales para la vida.

El equipo Hassabis/Jumper entrenó al sistema de inteligencia artificial AlphaFold2 con la enorme información de las bases de datos de todas las estructuras de proteínas y secuencias de aminoácidos conocidas y la nueva arquitectura de IA empezó a dar buenos resultados. Esta versión mejorada logró un hito histórico en el CASP de 2020 –algo así como unas olimpiadas de proteínas–, alcanzando una precisión comparable a la cristalografía de rayos X y resolviendo efectivamente un desafío de 50 años en la predicción de estructuras proteicas.

**09/10/2024**

**Antonio M. Rodríguez García**

**Facultad de Farmacia, Química Orgánica, Universidad de Castilla-La Mancha**

**Antonio de la Hoz Ayuso**

**Catedrático de Química Orgánica, Universidad de Castilla-La Mancha**

**Enrique Díez Barra**

**Química Orgánica, Universidad de Castilla-La Mancha**

Este artículo fue publicado originalmente en [The Conversation](#). Lea el [original](#).

Why you should care about exponential smoothing?

Dr. Ivan Svetunkov

Lancaster University Management School



In the age of Machine Learning, many data scientists have started using more complicated approaches for forecasting, such as XGBoost, k-NN, Artificial Neural Networks etc. Due to the increased interest in these methods, the simpler and robust approaches might look less attractive than the more innovative ones and, as a result, tend to be neglected.

However, the good old exponential smoothing still works well in many situations and is still widely used in practice, especially in demand planning. In this talk, Ivan gave a short overview of the history of exponential smoothing, show how it has evolved over time, explain why it has been so popular and discuss how it can be used in modern demand forecasting in a variety of situations.

## VIERNES EN EL IRICA

Gestión de la investigación. Otra mirada de la ciencia.

Antonio Alfaro

Director de Área del Vicerrectorado de Investigación  
Universidad de Castilla-La Mancha

La Universidad de Castilla-La Mancha presta el servicio público de la educación superior a través de, entre otras actividades, la investigación, la transferencia de conocimiento a la sociedad y la difusión de la cultura. Para ello, la universidad pone a disposición de las investigadoras e investigadores, empresas y sociedad en general, una serie de recursos y estructuras que tienen como objetivo el cumplimiento de estos objetivos.

Desde los vicerrectorados de Política Científica e Innovación, Empleo y Emprendimiento, se lideran y coordinan los recursos humanos, materiales y económicos, así como las estructuras que tienen como misión apoyar el trabajo de nuestro personal investigador para que desarrolle su actividad en las mejores y más competitivas condiciones.

La investigación en España está en un periodo de continuos cambios derivados de los exigentes requisitos exigidos por los organismos financiadores nacionales y europeos, que suponen para científicos y gestores administrativos de las universidades un reto constante para adaptarse a ellos.

En esta charla se intenta acercar a las personas asistentes al corazón de la gestión de la investigación en nuestra universidad, a conocer desde otra perspectiva la actividad científica y cómo se gestionan los recursos existentes, derivados de los presupuestos de la UCLM y de la financiación afectada que las investigadoras e investigadores consiguen a través de la participación en convocatorias competitivas.

La UCLM a pesar de su juventud ha sido capaz situarse entre las mejores universidades en producción científica, sin duda, fruto del trabajo desarrollado por el personal investigador y los recursos humanos y materiales que la institución ha puesto a su disposición. El Plan Propio de la UCLM es ejemplo de compromiso con la investigación y la transferencia, es un referente a nivel nacional por la importante apuesta presupuestaria que supone y por la variedad y cantidad de actuaciones que lo conforman.

Los estudios de doctorado gestionados desde la Escuela Internacional de Doctorado han experimentado un crecimiento muy importante en número de matriculados, tesis leídas y actividades de formación dirigidas a los doctorandos y doctorandas.

En los últimos años y desde su creación la UCC+I ha impulsado la actividad de divulgación de la ciencia entre la sociedad, acercando nuestro trabajo a escuelas, ciudades, pueblos y colectivos a los que sus circunstancias les dificultan acceder al conocimiento científico.

Sin duda, trabajar en ciencia es un reto apasionante a la vez que difícil, con nuestro trabajo intentamos que este reto se afronte con las máximas garantías posibles, ofreciendo un servicio profesional y cercano a la comunidad científica de la UCLM.

El desarrollo socioeconómico de nuestra región y la generación y difusión del conocimiento es un objetivo compartido que une nuestros esfuerzos desde distintas miradas profesionales.

18/10/2024

Instituto Regional de Investigación Científica Aplicada (IRICA), Ciudad Real



## XII Olimpiada Científico-Tecnológica de Castilla-La Mancha

14 de Octubre de 2024

Estimados/as compañeros/as,

Se acerca la festividad de San Alberto Magno, patrón de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de la Universidad de Castilla-La Mancha y, como en años anteriores, estamos organizando:

### ‘XII Olimpiada Científico-Tecnológica de Castilla-La Mancha’

Organizada por la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas para estudiantes de Bachillerato y Formación Profesional de Castilla La Mancha. La jornada tendrá lugar el día 13 de noviembre de 2024 en horario de mañana con una posterior comida y también ofrecemos a todos los participantes una sesión de puertas abiertas por la tarde, donde visitar nuestras instalaciones.

El mismo día, como en años anteriores, también tenemos prevista la realización de una jornada que sustituye al anterior simposio regional educacional, a fin de facilitar que sea incluido en el plan de Formación permanente del profesorado con duración de 8 horas, como el año pasado.

Creemos que este tipo de experiencias para los estudiantes no solo les ayuda en el aprendizaje de la química, la tecnología y la ingeniería, sino que también les permite acercarse a la universidad y conocer por dentro lo que será en un futuro su nueva casa. Por tanto, considerando que esta olimpiada es un concurso a nivel regional, que la participación que podemos asumir al ser experimental es muy reducida, os pedimos vuestro compromiso, sabiendo que es un gran esfuerzo para los profesores, que inscribáis a los mejores alumnos y los más preparados para que puedan tener esta oportunidad y así desarrollar sus dotes de científicas, por lo que se recomienda que sean estudiantes que conozcan los laboratorios y se preparen para ello.

Esperamos que esta iniciativa, sea de vuestro interés y contar con vuestra presencia en Ciudad Real el 13 de noviembre.

# IV CERTAMEN PÓSTER CIENTÍFICO DIGITAL 2024

FACULTAD DE CIENCIAS  
Y TECNOLOGÍAS QUÍMICAS

IV CERTAMEN PÓSTER CIENTÍFICO  
DIGITAL. SAN ALBERTO 2024

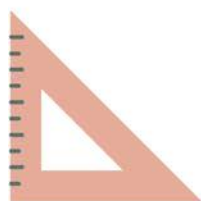
FCyTQ  
Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas

Patrocinado por:  
**La Casona**  
Restaurante

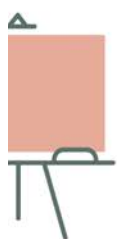
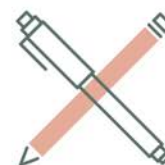
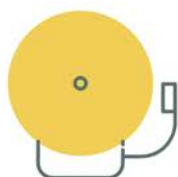
IV Jornada Regional de Educación en Ciencias, Tecnología e Ingeniería



LA FACULTAD DE CIENCIAS Y  
TECNOLOGÍAS QUÍMICAS LE  
INVITA A LA



## IV JORNADA REGIONAL DE EDUCACIÓN EN CIENCIAS, TECNOLOGÍA E INGENIERÍA



13 noviembre 2024

SALON DE ACTOS  
RECTOR ERNESTO MARTÍNEZ ATAZ  
EDIFICIO S. ALBERTO MAGNO



3º Edición concurso "Cómo hemos cambiado"

La Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas  
te invita a participar en



## Cómo hemos cambiado (3º edición)

Mádanos tu foto más tierna o divertida y participa  
descubriendo quien se esconde detrás de cada una de ellas

# XXXIII CERTAMEN FOTOGRAFICO SAN ALBERTO 2024



6-13 noviembre 2024  
Hall Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas



Javiceci  
fotógrafos

## Novel catalysts for hydrogen production from ammonia decomposition

Marina Pinzón García



El pasado 18 de octubre de 2024 tuvo lugar la defensa de la Tesis Doctoral de D<sup>a</sup>. Marina Pinzón García titulada “Catalizadores novedosos para la producción de hidrógeno a partir de la descomposición de amoníaco/Novel catalysts for hydrogen production from ammonia decomposition”. Esta tesis ha sido desarrollada en el Departamento de Ingeniería Química, bajo la supervisión de las profesoras D<sup>a</sup>. Paula Sánchez Paredes y D<sup>a</sup>. Amaya Romero Izquierdo. Dicho acto de defensa concluyó con la calificación de sobresaliente por parte del tribunal, siendo los miembros constituyentes del mismo D. Luis J. Alemany Arrebola de la Universidad de Málaga (UMA) como Presidente, D. Vladimiro Dal Santo de Consiglio Nazionale delle Ricerche (CNR) como Vocal, y D<sup>a</sup> Ana Raquel de la Osa Puebla de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) como Secretaria.

A continuación, se presenta un breve resumen sobre el trabajo desarrollado en esta tesis:

La incesante utilización de recursos no renovables ha desencadenado una crisis energética y medioambiental sin precedentes a nivel mundial. En Europa, la volatilidad de los precios, los recursos fósiles limitados y los conflictos geopolíticos han agravado en los últimos años el problema del coste energético y su suministro. La urgencia de la necesidad de diversificación de fuentes de energía es un hecho irrefutable. A pesar del progreso realizado en la reducción de emisiones, la eficiencia energética y la irrupción de las energías renovables, Europa debe acelerar las medidas para cumplir con los ambiciosos objetivos climáticos y energéticos.

En este sentido, debido al carácter intermitente de las energías renovables, es crucial desarrollar tecnologías que permitan almacenar el excedente con gran capacidad y largos tiempos de descarga. El hidrógeno (elemento más abundante del planeta) denominado “verde”, cuando es producido por electrólisis de agua mediante recursos renovables, puede ayudar a resolver este problema, funcionando como vector energético. No obstante, actualmente, el uso del hidrógeno presenta varios desafíos: más del 96 % de la producción mundial tiene lugar a partir de combustibles fósiles y, existe una falta de infraestructuras para su distribución y consumo. Además, su densidad extremadamente baja, incluso cuando se comprime, significa que la cantidad de energía en términos volumétricos es muy inferior a la mayoría de los combustibles líquidos, dificultando su almacenamiento de una forma segura y económica.

Una posible solución sería emplear moléculas químicas como fuentes portadoras de hidrógeno, que pudieran ser transformadas en este en la propia fuente móvil. De entre las sustancias capaces de asumir el rol de portadoras de hidrógeno, el amoníaco es especialmente prometedor debido a su relativamente bajo coste de producción, alta densidad energética, facilidad de licuefacción y, lo más importante, su transformación a hidrógeno está libre de emisiones de CO<sub>2</sub>. Además, cuenta con una infraestructura y red de distribución amplia y sobradamente madura.

Sin embargo, las aplicaciones prácticas relacionadas con este compuesto se han visto gravemente obstaculizadas debido al elevado coste de los catalizadores y la falta de madurez tecnológica de la reacción de descomposición del amoníaco en hidrógeno, para lo cual es esencial realizar esfuerzos en investigación, como el objeto de esta tesis doctoral. Así el desarrollo de este proyecto contribuiría muy positivamente hacia la transición energética y un futuro sostenible y descarbonizado.

En este contexto, el trabajo desarrollado en esta tesis tiene como objetivo explorar catalizadores novedosos de elevada actividad, a temperaturas moderadas, para la producción de hidrógeno mediante la descomposición de amoníaco. El desarrollo de este objetivo global se ha estructurado en cinco bloques: (I) soportes catalíticos basados en carburos, (II) perovskitas como precursores catalíticos, (III) óxido de grafeno reducido como soporte catalítico, (IV) activación mediante el fenómeno de promoción electroquímica (EPOC) y (V) evaluación energética del amoníaco como portador de hidrógeno.

La memoria contiene ocho capítulos de resultados (Capítulos 4 a 11) en los cuales se desarrollan los objetivos específicos que se resumirán a continuación. En la Sección I se engloban los Capítulos 4 a 6, en la II los Capítulos 7 y 8, en la Sección III el Capítulo 9, en la IV el Capítulo 10, y por último la Sección V incluye el Capítulo 11.

En el Capítulo 4, se demostró por primera vez en la literatura la utilización del b-SiC (carburo de silicio comercial, SICAT®) como soporte de catalizadores de rutenio (Ru) para la producción de hidrógeno a partir de la descomposición de amoníaco. En particular, se estudió la influencia de las condiciones de preparación del catalizador. Se comprobó que la modificación de la atmósfera de calcinación permitía eliminar mayor cantidad de especies cloruros derivadas del precursor, los cuales inhibían los centros activos.

Tanto el efecto de la temperatura de reducción, como el del contenido metálico, estaban directamente relacionados con el tamaño final de las partículas de Ru, lo que influía en la actividad catalítica. Una temperatura de reducción más baja resultó en un tamaño de partículas promedio menor, mientras que un incremento de la carga de Ru aumentaba el tamaño de las partículas debido a la aglomeración de estas. Se generaron la mayor cantidad de centros activos (sitios B5) y, en consecuencia, la mayor conversión de amoníaco a hidrógeno, con una carga de metal igual a 2,5 % en peso, una calcinación en nitrógeno a 500 °C y un pretratamiento de reducción con H<sub>2</sub> a 400 °C. Estas condiciones de calcinación y reducción optimizadas se mantuvieron constantes para los posteriores estudios sobre los soportes de carburos y óxido grafeno reducido.

Con el objetivo de disminuir los costes en el catalizador y sustituir el Ru por un elemento noble, en el Capítulo 5 se compararon dos tipos de carburos como soporte de catalizadores de cobalto (Co). En particular se utilizaron b-SiC, con un área superficial de 25 m<sup>2</sup> g<sup>-1</sup> y un composite formado por TiC-SiC (SICAT®), de mayor área superficial (~ 78 m<sup>2</sup> g<sup>-1</sup>). Se estudiaron diferentes parámetros relacionados con el método de preparación de los catalizadores que se intuía, podían influir en la fase metálica activa. En primer lugar, se comprobó que el aumento del contenido metálico provocaba una aglomeración de las partículas de Co en ambos soportes. Se obtuvieron menores tamaños de Co en los catalizadores soportados sobre TiC-SiC, debido a su mayor área superficial. Sin embargo, esto no se tradujo en una mayor conversión de amoníaco, debido a una peor reducción del Co en dicho soporte. A su favor, el composite mostraba un óptimo en la conversión de amoníaco para un 2,5 % en peso de Co, mientras que el SiC lo hacía para el doble de carga. Por otro lado, el precursor de Co tuvo un impacto en la reducción de las especies de Co, mostrando un mayor grado de reducción los catalizadores preparados con nitrato de cobalto, que mejoraron los resultados catalíticos. Por último, se constató que era posible reducir el catalizador *in-situ* utilizando amoníaco, lo que resultaría de gran interés para su aplicación práctica. Además, la necesidad de conversiones elevadas para una utilización posterior del hidrógeno en pilas de combustible condicionó la elección del b-SiC para futuros estudios.

El Capítulo 6, se centró en mejorar la actividad catalítica del Co/b-SiC utilizando diferentes promotores. Se emplearon metales alcalinos, alcalino-térreos y tierras-raras para modificar las propiedades físico-químicas y electrónicas del metal. Así, se estudió la influencia del tipo de promotor y la carga de este. Se observó que el K y el La mejoraron la actividad catalítica debido a que aumentaron la basicidad y la capacidad de donación de electrones a la fase activa, mientras que el Cs, Mg, Ca y Ce no lo consiguieron. En particular, los catalizadores promovidos con Mg y Ca presentaron menor cantidad de sitios básicos y una peor distribución de los promotores. Sin embargo, y a pesar del incremento en la basicidad y la distribución homogénea del Cs y el Ce, estos promotores no mejoraron la producción de hidrógeno lo que, según algunos autores, podría ser atribuido a una mayor inhibición del hidrógeno. Por último, se optimizó la carga de potasio en un 1 % en peso; un 0,5 % en peso de K se mostró insuficiente y un 1,5 % en peso de promotor bloqueó los sitios activos y provocó una disminución de la conversión de amoníaco.



En el Capítulo 7, se demostró por primera vez en la literatura como influía la preparación de catalizadores de Co y Ni, utilizando precursores del tipo perovskitas ( $\text{LaBO}_3$ ), en la reacción de descomposición de amoníaco. Las atractivas características fisicoquímicas de estos materiales, unido a la experiencia del grupo de investigación en la síntesis y caracterización, justificaron su uso en la reacción objeto de la tesis. En particular, se ensayó como influía la relación molar de combustible a nitratos metálicos, y la temperatura de calcinación para los precursores de Ni ( $\text{LaNiO}_3$ ) y Co ( $\text{LaCoO}_3$ ). En primer lugar, se encontró que una relación molar 1:1 tenía un efecto positivo en la aparición de la especie cristalina  $\text{LaBO}_3$ . Así, se generaban partículas metálicas de menor tamaño y aumentaba la basicidad tras la reducción, mejorando la conversión del amoníaco a menores temperaturas. Por otro lado, una temperatura de calcinación de 650 °C generó Ni(0) de menor tamaño y ampliamente disperso sobre  $\text{La}_2\text{O}_3$ , que mejoró la actividad catalítica. Sin embargo, para el Co la temperatura de calcinación no fue tan determinante en la actividad. Comparativamente, la perovskita de Ni presentó mejores resultados en la reacción de descomposición que la perovskita de Co, debido per se a la especie metálica y a que presentaba mayor cantidad de sitios básicos.

Con el objetivo de aumentar la actividad de las perovskitas, en el Capítulo 8, inicialmente, se prepararon diferentes catalizadores bimetálicas variando la relación molar de Ni y Co ( $\text{LaCo}_{1-x}\text{Ni}_x\text{O}_3$ ). Sin embargo, se obtuvieron tamaños de partícula mayores, y con peor resultado catalítico, que el catalizador derivado de  $\text{LaNiO}_3$ . Así, en este capítulo también se estudió el impacto que presentaba la adición de diferentes promotores ( $\text{La}_x\text{A}_{1-x}\text{NiO}_3$ ; A = Ce y Mg) y la cantidad de este sobre la perovskita base de Ni. Se comprobó que el material  $\text{La}_{0,1}\text{A}_{0,9}\text{NiO}_3$  mejoraba la conversión de amoníaco a menores temperaturas de reacción, ya que, presentó un menor tamaño de partícula de Ni y una basicidad óptima. Comparativamente, el catalizador obtenido de la perovskita dopada con Mg presentó mayor conversión con respecto a la perovskita dopada con Ce, debido a una mayor cantidad de sitios básicos generados con la sinergia Ni-Mg-La.

En el Capítulo 9, se exploró un nuevo soporte carbonoso, como el óxido de grafeno reducido (rGO), para comprobar los resultados catalíticos en la reacción en estudio. El grupo de investigación tiene una amplia experiencia en la síntesis y utilización de este material y, además, en la literatura se ha demostrado el aumento de la conductividad electrónica que pueden conferir al metal activo. Se utilizó Ru y las condiciones de preparación optimizadas en el capítulo 4, por ser la fase más activa, y para poder compararlo con los soportes de SiC. Se estudió el efecto de la carga metálica de Ru y, la presencia o no, de 2-cloroetilamina (reductor) en la síntesis del rGO. Se comprobó que aumentaba la aglomeración de las partículas con el aumento de la carga metálica, siendo una carga de 2,5 % en peso la óptima para generar la mayor cantidad de sitios activos. Por otro lado, la adición de 2-cloroetilamina mejoró la cristalinidad de rGO resultando en una estructura más ordenada con mayor conductividad electrónica y basicidad.

En vista de los resultados favorables obtenidos en la producción de hidrógeno y la experiencia del grupo en el fenómeno de promoción electroquímica (EPOC), en el Capítulo 10 se estudió por primera vez en la literatura, el Ru como electrodo de trabajo (película catalítica) de un sistema electrocatalítico para la descomposición de amoníaco. En primer lugar, se estudió la influencia de dos electrolitos sólidos de  $\text{bAl}_2\text{O}_3$  (Ionotec®), uno con conductor de iones  $\text{Na}^+$  y otro de iones  $\text{K}^+$ . El suministro electroquímico de ambos iones empleando diferentes polarizaciones aumentó la velocidad de producción de hidrógeno, dando lugar a un efecto promocional reversible y controlado. Este efecto favorable se atribuyó a la mejora en la cinética de la reacción de deshidrogenación del amoníaco, debido al fortalecimiento del enlace de quimisorción de las especies N. Entre los dos conductores iónicos, el efecto de promoción fue mayor para los iones  $\text{K}^+$  en las condiciones óptimas de polarización. Además, se observó un bloqueo de los sitios activos de la película de Ru para polarizaciones negativas debido al exceso de migración de iones  $\text{K}^+$ . No obstante, el catalizador se regeneró completamente *in-situ* tras la aplicación de un potencial de + 2 V.

Finalmente, el Capítulo 11 recoge un análisis energético para evaluar la capacidad del amoníaco como molécula portadora de hidrógeno. Para ello, se simuló y validó (software Aspen HYSYS®) el proceso completo: síntesis de amoníaco, acondicionamiento para su almacenamiento, el proceso de descomposición, la purificación del hidrógeno obtenido y su utilización final para la producción de energía en una aplicación residencial. Esta producción de energía contemplaba dos escenarios diferentes, la combustión directa del hidrógeno o bien la generación de energía eléctrica en una celda de combustible. Se evaluó el consumo energético del proceso, usando la herramienta Aspen Energy Analyzer™, y se diseñó una red de intercambiadores de calor que permitía disminuir el requerimiento energético en un 40 %, resultando en un ahorro energético del 59 %. La celda de combustible generó una mayor cantidad de energía eléctrica (~ 42 % más) en comparación con la combustión directa, utilizando la misma cantidad de hidrógeno.

## Estancia internacional de Diego Jesús González Serrano en el complejo Agro Food Park de la Universidad de Aarhus (AU), Dinamarca

Mi nombre es Diego Jesús González Serrano, estudiante de tercer año del Doctorado en Química de la UCLM bajo la dirección de los profesores Andrés Moreno y Beatriz Cabañas. En este artículo voy a comentar con vosotros mi estancia predoctoral en Dinamarca durante los meses de mayo, junio y julio de 2024.

Primero de todo, mi tesis se está desarrollando en el grupo MSOC FOOD & FOOD WASTE CHEMISTRY del Departamento de Química Orgánica, Inorgánica y Bioquímica de la UCLM. Mi proyecto de tesis se ha centrado en la extracción y purificación de polisacáridos y colorantes naturales procedentes de residuos agroalimentarios para el desarrollo de nuevos biomateriales. Así, durante mi trabajo en la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de Ciudad Real, hemos conseguido aislar y caracterizar los componentes básicos de dichos biomateriales y sintetizarlos con éxito. Sin embargo, con el fin de profundizar en las propiedades de estos materiales y su posible aplicación, se decidió aprovechar la colaboración existente entre nuestro grupo de investigación y el del doctor Mario Martínez, experto en biomateriales. Es así como terminé realizando mi estancia predoctoral en Aarhus, la segunda ciudad más poblada de Dinamarca y la más grande de la península de Jutlandia.

Mi centro de trabajo durante la estancia fue el Departamento de Tecnología y Ciencia de los Alimentos de la Universidad de Aarhus (AU), dentro del complejo tecnológico conocido como Agro Food Park. Trabajar en dicho complejo resultó una experiencia muy enriquecedora, dado que gran parte de la investigación que allí se realiza es en colaboración con empresas que poseen su sede tecnológica en el propio Agro Food Park, tal como la compañía láctea Arla Foods. Es cierto que el centro se encontraba localizado muy a las afueras de la ciudad, pero eso me permitió descubrir la mayor pasión de los daneses: los paseos en bicicleta. Diría que en Dinamarca descubrí tipos de bicicletas que jamás había visto en España, de forma que en algunas de las versiones eléctricas era posible ver familias enteras subidas en gigantescas cestas.



# ESTANCIA

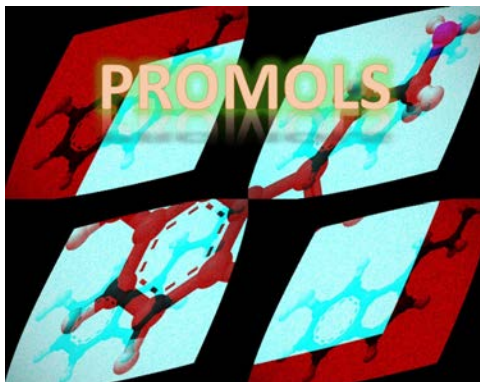
Gracias a la amabilidad y gran conocimiento de todos los miembros del grupo del doctor Mario Martínez fue muy fácil aprender a usar técnicas que no había conocido anteriormente, tales como analizadores de ángulo de contacto, equipos de análisis de permeabilidad o aparatos de ensayo de tracción. Todo ello permitió un análisis mecánico y estructural de mis biomateriales a un nivel muy profundo, suponiendo un gran avance en mi investigación. Otro gran avance, esta vez a nivel personal, fue el convivir con doctorandos de todas partes del mundo en la residencia universitaria “International Center Dormitory”. Así, durante los dos primeros meses de mi estancia, disfruté en nuestra cocina común de muchos momentos inolvidables: compartiendo experiencias investigadoras y personales, aprendiendo gastronomía de todas partes del mundo y dándome cuenta de la importancia del inglés como punto de unión. En solo dos meses pasamos a ser una pequeña familia, llevándome de allí amigos que creo no olvidaré por mucho que pasen los años. Igualmente, en mi centro de trabajo hice también muy buenos amigos, los cuales me ensañaron las maravillas de Aarhus: el centro histórico De Gamle By, el museo de arte moderno Aros, el bosque de Risskov, o simplemente la colorida belleza del centro de la ciudad.

El último mes de mi estancia tuve además la suerte de recibir la visita de mi pareja, tomando la arriesgada idea de vivir en una casa rural en mitad de un bosque cercano a la ciudad de Lystrup. La vida rural en Dinamarca, muy común en la zona, resultó un cambio fascinante, aprovechando además algunos días de julio para visitar Copenhague, la hermosa capital de Dinamarca, así como las ciudades alemanas de Hamburgo y Bremen, esta última prácticamente sacada de un cuento de los hermanos Grimm. Me gustaría terminar este artículo animando a cualquier doctorando que tenga la oportunidad a realizar una estancia de este tipo, pues resultará un empuje tremendo a nivel investigador, y, muy probablemente, una aventura de los más inesperada.



## Los fitoquímicos, el WhatsApp de las planta

Beatriz Elena Carrasquero Navas  
Tercer curso del Grado en Ciencia y Tecnología de los Alimentos



Para nosotros es muy normal conversar con las personas, hacer una llamada telefónica o recibir un correo electrónico. Esta comunicación se basa en un fenómeno físico, ya que los sonidos que emitimos son ondas mecánicas propagándose en el aire que impactan en los tímpanos y posteriormente son transformadas en señales eléctricas por el cerebro que nos hacen expresar una respuesta. Al mismo tiempo, la tecnología actual ha extendido nuestra comunicación hacia las ondas electromagnéticas.

Pero ¿Es la comunicación un proceso exclusivamente físico y único de los organismos vivos del reino animal? Pues, parece que no. Si nos ponemos a pensar en que las plantas hablan entre ellas, alguien nos diría que estamos mal de la cabeza. ¿Quién ha visto un árbol preguntándole algo a otro? ¿Cómo le pide una planta a un insecto que por favor participe en la polinización? Todo esto suena completamente absurdo. Sin embargo, la naturaleza siempre da sorpresas y entre ellas tenemos un nuevo modo de comunicación, tan sofisticado como el nuestro pero que se fundamenta en sustancias del mundo químico vegetal conocidas como fitoquímicos.

Imaginemos un árbol en el campo, él no está tan solo como aparenta, ya que en el suelo hay un universo de seres vivos. Nuestro árbol comienza a producir flavonoides, azúcares y aminoácidos, los cuales exuda desde las raíces para solicitar amablemente a ciertos hongos que se asocien en beneficio mutuo o simbiosis. El hongo responde a este llamado para unirse a la raíz formándose nódulos radicales, que extiende sus hifas para captar nutrientes del suelo. Si otros árboles hacen lo mismo, se produce una red de hifas y raíces que entran en contacto formando lo que llaman una Wood Wide Web (W.W.W.) de comunicación química (BBC, 2024).

Esta red (figura 1) actúa en muchas situaciones, por ejemplo, en presencia de patógenos el árbol reacciona con emisiones de monoterpenos, entre ellos mirceno, canfeno o pineno, que son señales de defensa en los tejidos de muchas plantas (Badri y col. 2009). A través de la W.W.W, los árboles vecinos detectan estos compuestos, los interpretan como un mensaje de aviso y comienzan a producir reacciones inmunes para defenderse, aunque no estén todavía en peligro.

En otro ejemplo, cuando un árbol manifiesta estrés por carencia de nutrientes, a través de la W.W.W, los demás árboles se enteran de que uno de sus compañeros tiene estrés nutricional y envían por la red sustancias nutritivas en ayuda.

Paralela a esta W.W.W. “alámbrica”, las plantas disponen de otra red “inalámbrica” que se transmite por el aire, a la que se pueden conectar a través de sus “dispositivos móviles”, es decir las hojas y sus estomas. Los compuestos volátiles junto con la información que transportan pueden ingresar a la planta por las estomas. Imaginemos que cuando un insecto herbívoro ataca una planta, ella responde produciendo el terpeno  $\beta$ -Cariofileno hacia el aire con dos propósitos: alejar al insecto y mandar un mensaje de alerta al resto de las plantas sobre el peligro inminente. Una vez recibido el mensaje, las otras plantas y árboles activan el estado de alerta produciendo sus propios terpenos para protegerse del peligro (Rosenkranz y col. 2021).

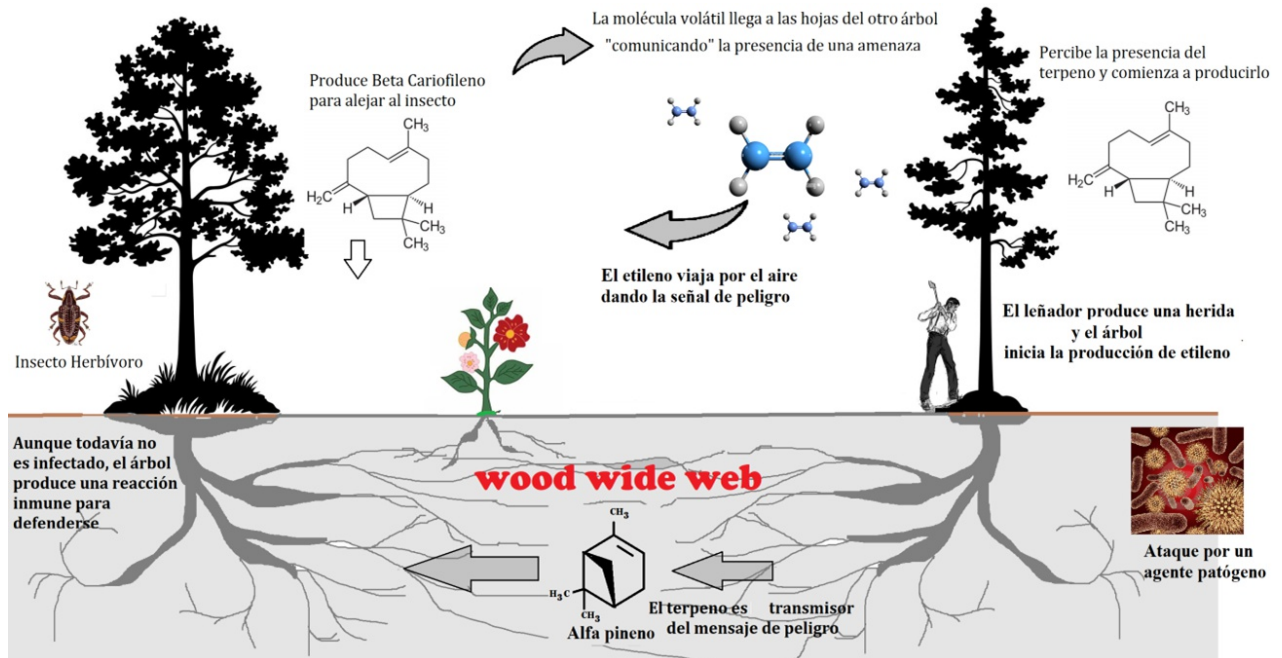


Figura 1: Red de comunicación o Wood Wide Web

Podemos incluir en esta mensajería química a las hormonas vegetales, por ejemplo, al etileno cuya fórmula química es  $C_2H_4$ . Se trata de un alqueno con dos átomos de carbono unidos por una instauración doble que a temperatura ambiente es gaseoso, incoloro y con un ligero olor dulce. Fue de las primeras fitohormonas en ser descubiertas, aunque de manera accidental, ya que en el siglo XIX algunos agricultores notaron que cuando almacenaban vegetales cerca de lámparas de gas, éstos aceleraban su proceso de deterioro, la maduración acelerada de los frutos e incluso la caída prematura de las hojas. En 1901 Dimitry Neljubow, en el Instituto Botánico de San Petersburgo, señaló al etileno responsable del “efecto triple” en las plántulas de guisante, es decir que, al exponer las plantas al etileno, se producen la reducción en la elongación del tallo, su engrosamiento y curvaturas por los cambios en la orientación del crecimiento.

Como se ha encontrado que el etileno también regula la respuesta al estrés, por ello cuando una planta es estresada a causa de heridas, períodos de sequía, inundaciones, infecciones por patógenos, ataques de herbívoros o falta de nutrientes en el suelo, aumenta la producción de etileno, el cual es liberado al aire para comunicar a la comunidad vegetal una señal de peligro. Las plantas que reciben el mensaje comienzan a producir su propio etileno con lo cual, sin estar en situación de estrés, se preparan para enfrentarlo ajustando su proceso de crecimiento, la elongación y hasta el engrosamiento de sus tallos, llegando inclusive a inhibir la germinación de sus semillas mientras las condiciones no sean favorables (Zhang y col. 2024).

Es interesante que esta comunicación no ocurre solamente en situaciones de peligro. Cuando un fruto comienza a madurar produce etileno que viaja por el aire y los otros frutos de la misma u otra planta reciben esta señal y la toman como un indicativo para comenzar a madurar simultáneamente. De aquí que surge la famosa frase de que “una manzana podrida en el frutero pudre a las demás”.

En conclusión, podemos decir que existe un proceso complejo de comunicación entre las plantas basado en la transmisión de datos por la vía de diferentes sustancias químicas, cuando las plantas reciben la información reaccionan ya sea para protegerse, ayudar a las otras o iniciar procesos fisiológicos. Estas sustancias químicas: flavonoides, terpenos, terpenoides o fitohormonas constituyen el lenguaje de esta singular comunicación que puede hacerse por la red neuronal existente en el suelo o por el aire de manera inalámbrica. De allí que los vegetales también tienen sus grupos de Whatsapp.

## Referencias

Badri, D. Weir, T., Van der Leile, D. & Vivanco, J. (2009). *Rhizosphere chemical dialogues: plant-microbe interactions*. Current Opinion in Biotechnology. 20: 642-650. DOI: [10.1016/j.copbio.2009.09.014](https://doi.org/10.1016/j.copbio.2009.09.014)

BBC Scienc Focus. Online : <https://www.sciencefocus.com/nature/mycorrhizal-networks-wood-wide-web>

Rosenkranz, M., Chen, Y., Zhu, P. & Vlot, C. (2021) *Volatile Terpenes – mediators plant-to-plant communication*. The Plant Journal. 617-631. DOI: [10.1111/tpj.15453](https://doi.org/10.1111/tpj.15453)

Zang, X. Sun, J & Don, Ch. 2024. *Molecular regulations of ethylene signal in plant slat stress responses*. Plant Stress. 14. 100583. DOI: [10.1016/j.stress.2024.100583](https://doi.org/10.1016/j.stress.2024.100583)

## **CIENCIA Y TECNOLOGÍA DE LOS ALIMENTOS**

da Costa, K.C.M.; Oliveira, L.d.S.; Silva, J.C.; Santana, T.S.; de Freitas, R.A.; Bressan, A.F.M.; Gómez-Alonso, S.; Pérez-Navarro, J.; Pertuzatti, P.B.; Giachini, F.R. Enhancing Vascular Health and Lowering Blood Pressure in Spontaneously Hypertensive Rats through Syrah Grape (*Vitis vinifera*) Pomace: The Role of Phenolic Compounds. *Nutrients*, 2024, 16, 2312.

<https://doi.org/10.3390/nu16142312>

Fernández-González, M.; Izquierdo-Cañas, P.M.; García-Romero, E.; Paniagua-Martínez, T.; Gómez-Alonso, S. The Effects of a *Saccharomyces cerevisiae* Strain Overexpressing the Endopolygalacturonase PGU1 Gene on the Aminoacidic, Volatile, and Phenolic Compositions of Cabernet Sauvignon Wines. *Fermentation*, 2024, 10, 375 .

<https://doi.org/10.3390/fermentation10070375>

## **QUÍMICA ORGÁNICA**

Plaza-Pedroche, R.; Fernández-Liencres, M. P.; Jiménez-Pulido, S. B.; Illán-Cabeza, N. A.; Achelle, S.; Navarro, A.; Rodríguez-López, J. Tunable Emission and Structural Insights of 6-Arylviny-2,4-bis(2'-hydroxyphenyl)pyrimidines and Their O<sup>N</sup>O-Chelated Boron Complexes. *ACS Appl. Opt. Mater.* 2024, 2, 2051- 2066 .

<https://doi.org/10.1021/acsaom.4c00251>

González-Alfaro, S.; Fernández-Liencres, M. P.; Jiménez-Pulido, S. B.; Illán-Cabeza, N. A.; Sánchez-Ruiz, A.; García-Martínez, J. C.; Navarro, A.; Rodríguez-López, J.J. Benchmarking luminescent properties of the arylvinylpyrimidine scaffold. *Chem. Phys.* 2024, 161, 164307.

<https://doi.org/10.1063/5.0224650>



En el próximo número de Molécula...

En el próximo número de Molécula se incluirán todas las actividades realizadas durante la festividad de San Alberto Magno, así como más noticias de interés y curiosidades.