

Nombramiento Juana Rodríguez	P. 3
Mujer y ciencia	P. 4
Investigación Bioquímica	P. 7
Tesis doctorales	P. 9
Conferencias	P. 17
Cafetería. Concurso PROMOLS	P. 20

Comité editorial: Consuelo Díaz Maroto, Juan Carlos de Haro, Antonio de la Hoz, José Luis Martín, José Fernando Pérez, Javier Torres, Florentina Villanueva, Raúl Martín.

PRESENTACIÓN

En el número de febrero comenzamos con una nueva propuesta, el concurso PROMOLS (moléculas con propiedades) para fomentar la participación de los estudiantes. Hemos incluido el nombramiento de Juana Rodríguez como asesora de la CNAI, las jornadas de mujer y ciencia y la investigación del grupo de la Dra. Mairena Martín. También las habituales secciones de Tesis doctoral y conferencias. Queremos plasmar también nuestros mejores deseos a nuestro compañero y miembro del comité editorial José Luis Martín, deseándole un rápido restablecimiento y que esté pronto con nosotros de nuevo.

El comité editorial.

Los catedráticos de la UCLM Juana Rodríguez y Juan Carlos López, asesores de la Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Investigadora

La Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Investigadora conoce ya los nombres de quiénes conformarán sus comités asesores. Entre ellos se encuentran los profesores de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) Juana Rodríguez Flores y Juan Carlos López López, nombrados vocales de los comités de Química y de Ingeniería y Arquitectura, respectivamente.

Los catedráticos de Química Analítica y de Arquitectura y Tecnología de Computadores de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) Juana Rodríguez Flores y Juan Carlos López López han sido nombrados miembros de los comités asesores de la Comisión Nacional Evaluadora de la Actividad Investigadora, órgano dependiente de la Agencia Nacional de Evaluación de la Calidad y Acreditación (ANECA) del Ministerio de Educación, Cultura y Deporte encargado de realizar la evaluación de la actividad investigadora de los profesores universitarios y del personal de las escalas científicas del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC), con el objetivo de que les sea reconocido un complemento de productividad (sexenio). La profesora Rodríguez Flores será vocal del comité asesor de Química, mientras que el profesor López López lo será del de Ingenierías y Arquitectura, en el subgrupo de Ingenierías de la Comunicación, Computación y Electrónica.

Juana Rodríguez Flores es profesora en la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas en el Campus de Ciudad Real. Actualmente es subdirectora del Departamento de Química Analítica y Tecnología de Alimentos de la UCLM. Con 34 años de experiencia en diferentes áreas de investigación como son la electroquímica, espectroscopia, cromatografía y electroforesis, a día de hoy su principal línea de trabajo es la propuesta de nuevas metodologías analíticas en la determinación de compuestos de interés biológico, principalmente en compuestos novedosos en diferentes tratamientos oncológicos, así como en el estudio de su administración como nanofármacos o la utilización de nanopartículas para mejorar sus metodologías de análisis.

Doctor Ingeniero de Telecomunicaciones, Juan Carlos López López es profesor del Departamento de Tecnologías y Sistemas de Información en la Escuela Superior de Informática en el Campus de Ciudad Real. Es responsable del grupo de investigación Arquitectura y Redes de Computadores (ARCO) de la UCLM y director de la cátedra Indra de la Universidad regional. Sus líneas de investigación se centran en el diseño de sistemas heterogéneos, en servicios avanzados de comunicaciones y en innovación tecnológica.

Gabinete Comunicación UCLM. Ciudad Real, 21 de febrero de 2017



La UCLM reivindica la labor investigadora de las mujeres con diferentes actividades



Con el fin de lograr el acceso y la participación plena y equitativa en la ciencia para las mujeres y las niñas y para lograr la igualdad de género y el empoderamiento de este colectivo, la Asamblea General de Naciones Unidas proclamó el 11 de febrero como el Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia. A la conmemoración de dicha efeméride se suma la Universidad de Castilla-La Mancha con diversas actividades en sus campus, en las que investigadoras de la institución darán a conocer la labor y la importancia de las mujeres en la actividad científica.

La Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) se une al Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia, -que se celebra mañana 11 de febrero-, con la organización de varias actividades en sus campus con las que se pretende visibilizar y reivindicar la participación de las féminas en la actividad investigadora.

Anticipándose a esta efeméride, instituida por la Asamblea General de Naciones Unidas en 2015, las científicas de Albacete, Ciudad Real, Cuenca y Toledo se han reunido hoy en sus respectivos campus para hacerse una foto de familia y dejar así constancia de su presencia y trabajo en la Universidad.

Además, en la jornada de hoy, y a iniciativa de un grupo de profesoras e investigadoras de la Escuela Superior de Ingeniería Informática de Albacete, éstas han visitado varios institutos de Educación Secundaria de la ciudad para explicar a los estudiantes cómo la mujer en la ciencia, en general, y en la Informática, en particular, ha tenido una presencia relevante, a fin de mostrarles modelos a seguir y animarles a su participación.

DÍA INTERNACIONAL DE LA MUJER Y LA NIÑA EN LA CIENCIA

La conmemoración de este Día continuará la semana que viene con diferentes iniciativas. Para el lunes, 13 de febrero, a las 11.00 horas, en la Facultad de Farmacia del Campus de Albacete, el profesor de Física de la UCLM Antonio Barbero y la neurobióloga y decana de la Facultad de Farmacia Mar Arroyo impartirán la ponencia Un desafío de estrellas y una experiencia científica personal, dos historias con nombre de mujer.

Este mismo día, a las 12.30 horas, en el Campus de la Antigua Fábrica de Armas de Toledo y a iniciativa de las facultades de Educación y de Ciencias Ambientales y Bioquímica, tendrá lugar una charla y posterior discusión sobre la presencia de las mujeres en la ciencia desde la Antigüedad. En esa sesión se proyectará un vídeo realizado por alumnas sobre los derechos de autoría de las mujeres en artículos y descubrimientos científicos y se celebrará un taller sobre autoría.

En la jornada siguiente, martes, 14 febrero, a las 12.30 horas, en el salón de actos de la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas del Campus de Ciudad Real, el rector de la UCLM, Miguel Ángel Collado, presentará a la directora de la Unidad de Mujeres y Ciencia de la Secretaría de Estado de Investigación, Desarrollo e Innovación del Ministerio de Economía, Ana Puy, quien impartirá la ponencia La (des)igualdad de género en la formación y profesión científica en España.

El miércoles, 15 de febrero, las actividades llegarán a las sedes universitarias de Almadén y Talavera de la Reina y al Campus de Cuenca. A las 12.00 horas, en la sala de juntas de la Escuela de Ingeniería Minera e Industrial de Almadén, la profesora de Máquinas y Motores Térmicos la UCLM Carmen Mata impartirá la ponencia ¡Soy mujer, soy ingeniera... y además investigo! Por su parte, la profesora de Anatomía y Fisiología de la UCLM Alicia Mohedano impartirá la conferencia Optimizando el tiempo. Investigador principal: mujer y científica, que tendrá lugar a las 10.30 horas en el salón de grados de la Facultad de Terapia Ocupacional, Logopedia y Enfermería de Talavera. Por último, a las 11.00 horas, en el salón de actos de la Escuela Politécnica del Campus de Cuenca, la profesora de Tecnología Electrónica de la UCLM Raquel Cervigón impartirá la ponencia La mujer en la ingeniería biomédica.

Para el jueves, 16 de febrero, y de la mano de la Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales de la UCLM y de la Delegación de Ciudad Real del Colegio Oficial de Ingenieros Industriales de Madrid, se celebrará en el Campus de Ciudad Real una mesa redonda sobre las mujeres en la ingeniería industrial, en la que un conjunto de ingenieras expondrán el trabajo que desarrollan y explicarán por qué es importante contar con las mujeres en el campo de la Ingeniería. Coincidiendo con esta actividad se presentará el Concurso de Pósteres sobre Ingenieras Ocultas, dirigido a estudiantes de Educación Secundaria Obligatoria y de Bachillerato. La cita será a las 17.30 horas, en el Edificio Politécnico.

Las actividades organizadas por la UCLM en torno al Día Internacional de la Mujer y la Niña en la Ciencia culminarán el viernes, 17 de febrero, a las 13.00 horas, en el Aula Magna del Edificio 37 del Campus de la Fábrica de Armas de Toledo con la ponencia Mi relación con la Ciencia: un modelo de simbiosis, que impartirá la catedrática de Tecnología de los Alimentos Llanos Palop.

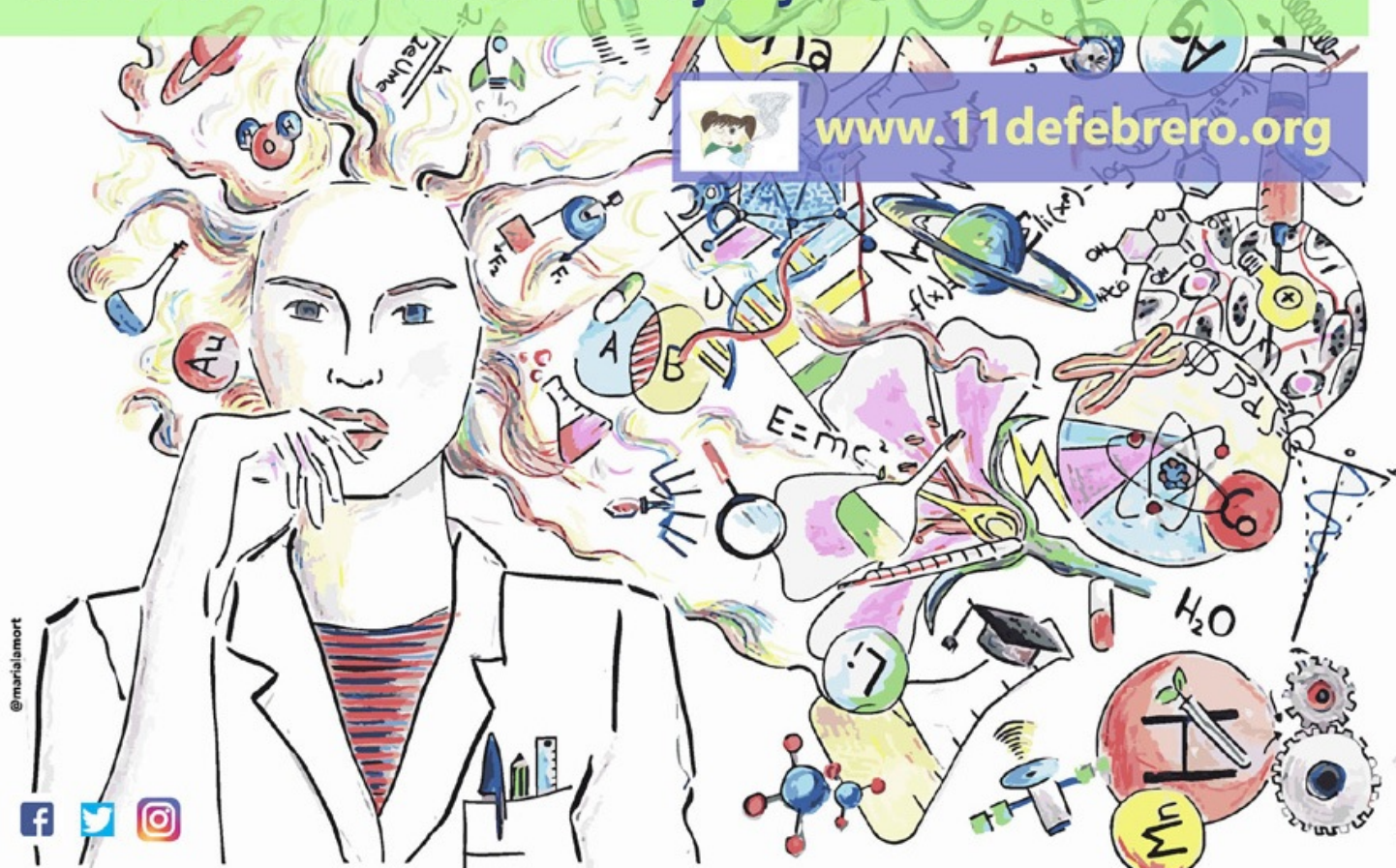
Además, y hasta el 26 de febrero, en el Aula Cultural Universidad Abierta de Ciudad Real (sala ACUA), podrá visitarse la exposición del concurso de fotografía 'Mujer y Ciencia'.

Todas las actividades, a excepción de las que organizan los propios centros, están promovidas por el Vicerrectorado de Estudiantes y Responsabilidad Social de la UCLM.

DÍA INTERNACIONAL DE LA MUJER Y LA NIÑA EN LA CIENCIA

Día internacional de la mujer y la niña en la ciencia

www.11defebrero.org



Gabinete Comunicación UCLM. Ciudad Real, 10 de febrero de 2017

INVESTIGADORES DE LA UCLM DESCUBREN UN NUEVO PAPEL DEL COLESTEROL EN LA REGULACIÓN DE PROTEÍNAS

El colesterol presente en las membranas de las células puede interferir en la función de una importante proteína de las membranas cerebrales mediante una interacción desconocida hasta el momento. Éste es el resultado del estudio realizado por investigadores de la Universidad de Castilla-La Mancha, el Instituto Hospital del Mar de Investigaciones Médicas de la Universidad Pompeu Fabra y el Hospital Charité de Berlín, el cual puede ser la clave para el desarrollo de nuevos fármacos para tratar enfermedades como el Alzheimer.

Un estudio llevado a cabo por los investigadores de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) Mairena Martín y José Luis Albasanz, junto con otros del Instituto Hospital del Mar de Investigaciones Médicas de la Universidad Pompeu Fabra y el Hospital Charité de Berlín demuestra, por vez primera, que el colesterol presente en las membranas de las células puede interferir en la función de una importante proteína de las membranas cerebrales a través de un modo de interacción desconocido hasta el momento.

El trabajo, publicado en la revista Nature Communications, revela que el colesterol es capaz de regular la actividad del receptor A2A de adenosina, invadiendo su interior y accediendo así a su centro activo. Ello permitirá, según los investigadores, idear nuevas formas de interacción con estas proteínas que, en un futuro, podrían convertirse en dianas farmacológicas para el tratamiento de enfermedades neurodegenerativas como el Alzheimer.

Los investigadores Martín y Albasanz explican que el receptor de adenosina pertenece a la familia de los receptores acoplados a proteínas G (GPCRs), una familia de proteínas ubicadas en la membrana de las células que son clave en la transmisión de señales celulares y en la comunicación entre las células; de ahí que dichas proteínas estén involucradas en la mayoría de procesos fisiológicos relevantes, incluyendo la interpretación de estímulos sensoriales como la visión, el olor o el gusto, la regulación de la actividad del sistema inmune e inflamatorio o la modulación del comportamiento.

Por su parte, continúan los investigadores, el colesterol es un componente esencial de las membranas neuronales donde residen, entre otras proteínas, los GPCRs, y hasta ahora se creía que el colesterol de membrana podía regular la actividad de estas proteínas mediante dos mecanismos: alterando las propiedades físicas de la membrana o uniéndose a la superficie de la proteína. En ambos casos, se pensaba que el colesterol solo podía ejercer su acción moduladora desde fuera de la proteína.

Sin embargo, ahora este estudio demuestra por primera vez que el colesterol puede ejercer una acción directa sobre los GPCRs y establece las bases de una vía de interacción entre la membrana celular y estas proteínas receptoras y que hasta el momento era completamente desconocida.

Nuevas vías de investigación

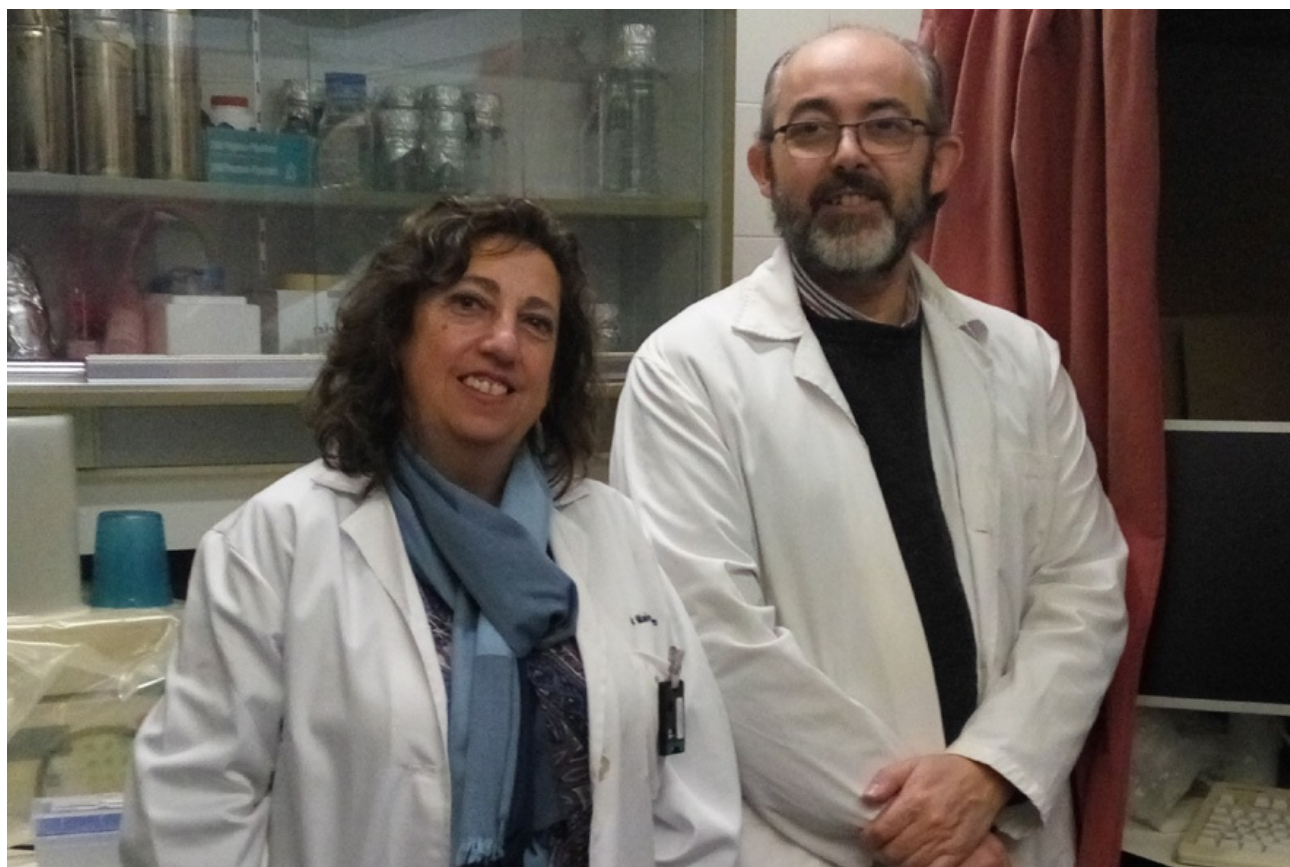
Este trabajo ha sido posible mediante el uso de simulaciones moleculares de última generación –realizado por los investigadores Jana Selent y Ramón Guixà, del Instituto Hospital del Mar de Investigaciones Médicas y el Hospital Charité de Berlín, respectivamente- y el diseño de un protocolo experimental en cultivos celulares –desarrollado por los profesores de la UCLM citados-. El mismo ha permitido demostrar que el colesterol puede abandonar la membrana neuronal y acceder al interior del receptor de adenosina, en concreto a su centro activo, modulando así su funcionalidad.

INVESTIGADORES DE LA UCLM DESCUBREN UN NUEVO PAPEL DEL COLESTEROL EN LA REGULACIÓN DE PROTEÍNAS

Hasta la fecha, el Grupo de Neuroquímica de la UCLM al que pertenecen los profesores Martín y Albasanz había descrito previamente que los receptores de adenosina se encuentran afectados en el cerebro de pacientes de Alzheimer, enfermedad en la que también se ha visto alteración de los niveles de colesterol. Así, un nivel elevado de colesterol en la membrana podría favorecer el bloqueo de los receptores de adenosina, lo que podría explicar algunos síntomas observados en la enfermedad de Alzheimer.

Los resultados del nuevo trabajo plantean un cambio de paradigma y abren nuevas vías de investigación en campos donde la relación colesterol-GPCRs es esencial, ya que también se estudia si este mecanismo puede estar involucrado en otras enfermedades del sistema nervioso central.

Gabinete Comunicación UCLM. Ciudad Real, 28 de febrero de 2017



STUDY OF IMPROVED ELECTRODES FOR HIGH TEMPERATURE PEM FUEL CELLS BASED ON PBI MEMBRANES

Doctorando: D. Héctor Zamora Triguero

Directores: Dr. D. Manuel Andrés Rodrigo Rodrigo
Dr. D. Justo Lobato Bajo

Las celdas de combustible son dispositivos que pueden ser utilizados para producir energía a partir del hidrógeno y otros combustibles. Se clasifican en diferentes tipos atendiendo a los componentes, los electrolitos, los reactivos y las condiciones de funcionamiento. De entre ellos, este trabajo se ha centrado en las celdas de combustible de membrana polimérica, especialmente en las celdas de combustible de membrana de intercambio protónico de alta temperatura (HT-PEMFCs), que han supuesto un campo de investigación y desarrollo muy importante durante más de dos décadas.

Estas pilas utilizan una membrana de intercambio protónico basada en polibenzimidazol (PBI), el cual posee buenas propiedades fisicoquímicas y una alta conductividad protónica en el intervalo de temperatura de operación de la celda (100-200 °C) cuando es dopada con ácido fosfórico. En Tesis anteriores la actividad de investigación de nuestro Grupo de investigación se centró en la mejora de dichas membranas, aumentando su durabilidad y propiedades físico-químicas, lo que tuvo una repercusión positiva en el rendimiento de la celda. Sin embargo, la presencia de un medio ácido y la alta temperatura tiene un efecto negativo en la durabilidad de otros componentes de la pila, especialmente los electrodos.

La presente tesis doctoral se ha centrado por lo tanto en la mejora de la durabilidad de los mismos. Para ello, el estudio se ha centrado en la investigación de nuevos materiales para sustituir al carbón Vulcan XC72 (material generalmente utilizado en diversos componentes del electrodo y que sufre una elevada degradación en las condiciones de operación de la celda) en la capa microporosa (MPL) y como soporte catalítico. La MPL, normalmente de naturaleza carbonosa, mejora la difusión de los gases y líquidos, minimizando la resistencia eléctrica de contacto entre la capa catalítica y el papel de carbono usado como capa macroporosa. También ayuda a mejorar la gestión del agua durante la operación de la celda.

La degradación de esta capa produce una importante disminución en la vida útil y en el rendimiento de la celda de combustible. Por otro lado, el soporte catalítico tiene una gran repercusión en el rendimiento de la celda. El área superficial, la porosidad, la conductividad eléctrica, la estabilidad electroquímica y la existencia de grupos funcionales en la superficie del soporte son las características clave buscadas para un buen soporte catalítico. Teniendo en cuenta el estado del arte de la tecnología en el momento de la puesta en marcha de esta Tesis, se han estudiado diferentes materiales carbonosos (nanofibras de Carbono Platelet (CNFp) y nanoesferas de carbono (CNSs), fabricados en nuestras instalaciones) y no carbonosos (carburo de Silicio (SiC) y carburo de Silicio-Titanio (SixTiyC), para sustituir el carbón Vulcan en ambos elementos. Primeramente, todos los materiales fueron caracterizados fisicoquímicamente.

Se estudiaron parámetros importantes tales como el área superficial, la porosidad, la hidrofobicidad y la conductividad eléctrica. Se observó que los materiales no carbonosos tenían unas menores porosidades, conductividades eléctricas y carácter hidrofóbico respecto a los materiales carbonosos. También se observó que la proporción de Si:Ti en el carburo binario influía de forma notable sobre estos parámetros, especialmente en la conductividad eléctrica (que se incrementaba con la mayor proporción de TiC en el carburo binario) y en el área superficial y la porosidad (que disminuían con el contenido en TiC).

STUDY OF IMPROVED ELECTRODES FOR HIGH TEMPERATURE PEM FUEL CELLS BASED ON PBI MEMBRANES

Los resultados mostraron que las MPLs preparadas con CNSs y materiales no carbonosos tienen una excelente estabilidad termoquímica y electroquímica en estas condiciones, mientras que las preparadas con el carbón Vulcan y las nanofibras sufren una elevada degradación. En las pruebas en celda de combustible, la MEA con MPL basada en CNSs exhibió un rendimiento aceptable en términos de densidad de potencia y una gran mejora en términos de estabilidad cuando se la comparaba con una MEA estándar basada en carbón Vulcan. Los otros materiales presentaron diversos problemas relacionados con la difusión de los gases a través del electrodo y con alta resistencia óhmica en el caso de los materiales no carbonosos, obteniendo resultados por debajo del nivel aceptable para implementarse en pila.

Finalizado el estudio de caracterización de la MPL, la atención se centró en la evaluación de la influencia de los nuevos materiales en la capa catalítica, preparando diferentes catalizadores con un contenido en Pt del 40% en peso sobre los diferentes materiales estudiados como soportes catalíticos. Los mejores resultados en términos de área electroquímicamente activa (ECSA), actividad catalítica y estabilidad fueron alcanzados por los catalizadores soportados sobre $\text{Si}_{0.9}\text{Ti}_{0.1}\text{C}$ y CNFp, que mostraron valores en términos de actividad en el mismo intervalo que un catalizador comercial de Pt/Vulcan XC72.

El funcionamiento de los nuevos catalizadores en celda fue evaluado mediante experimentos de vida de corta duración igual que en el caso de la MPL, obteniendo que los mejores catalizadores testados fuera de celda también presentaban los mejores rendimientos y estabilidad. En la última parte del trabajo de investigación que conforma esta Tesis, se prepararon dos cátodos en los que para fabricar la MPL y capa catalítica se utilizaron exclusivamente los materiales que mejores características demostraron en los estudios previos. Así, en el primero de los cátodos se usaron materiales carbonosos (CNSs en la MPL y 40% Pt/CNFp como catalizador) y en el segundo, materiales no carbonosos ($\text{S}_{10.7}\text{Ti}_{0.3}\text{C}$ en la MPL y 40% Pt/ $\text{Si}_{0.9}\text{Ti}_{0.1}\text{C}$ como catalizador). Estos cátodos fueron evaluados en ensayos de vida más largos RESUMEN 30 que los utilizados en los estudios anteriores (300 horas utilizando oxígeno puro como oxidante) y se compararon los resultados con los obtenidos por una MEA estándar.

La MEA preparada con nanomateriales de carbono mostró excelentes resultados en términos de estabilidad y rendimiento, mejorando estos valores con respecto a los obtenidos por la MEA estándar. Así, mientras que en la MEA estándar se observaba un proceso de degradación con una pérdida de voltaje de $-47 \mu\text{V h}^{-1}$ aproximada, la MEA preparada con los nuevos materiales carbonosos mostró un proceso de activación en vez de degradación durante todo el ensayo, con un aumento del voltaje promedio de aproximadamente $+27 \mu\text{V h}^{-1}$. Con respecto a la densidad de potencia máxima, la MEA preparada con los materiales carbonosos novedosos mostró valores finales de alrededor de 350 mW cm^{-2} , mientras que la MEA estándar alcanzó solamente 300 mW cm^{-2} . Este hecho fue explicado en términos de la mejora de la estabilidad de la capa catalítica, ya que no había signos de pérdidas importantes de área activa a lo largo de las diferentes pruebas de caracterización, situación opuesta a la MEA estándar, donde sí se observaron pérdidas apreciables de este parámetro. La MEA basada en materiales no carbonosos por el contrario, presentó valores de voltaje bastante inferiores a la MEA estándar, manteniendo una buena estabilidad, lo que significa que el uso de estos materiales requiere una investigación más profunda en orden de optimizar los electrodos preparados con los mismos para mantener esa alta estabilidad incrementando el rendimiento.

INTENSIFICATION OF PHOTOCATALYTIC DEGRADATION PROCESSES IN AQUEOUS EFFLUENTS

Doctorando: D. Antonio José Expósito Serrano

Directores: Dr. D. Jose María Monteagudo Martínez
Dr. D. Antonio Durán Segovia



En los últimos años, se han acumulado en el agua en baja concentración un gran número de sustancias tóxicas conocidas con el nombre de contaminantes emergentes. Estas sustancias han sido diseñadas para ser resistentes, inhibidoras o tóxicas a tratamientos biológicos y al medio ambiente, lo que las hace potencialmente peligrosas para los ecosistemas.

Los procesos de oxidación avanzada y, más concretamente, la fotocatalisis se han mostrado como tecnologías prometedoras para degradar este tipo de sustancias. Sin embargo, actualmente no se ha extendido su uso en la industria debido a su ineficiencia y elevado coste. Esta tesis pretende rectificar esta situación comparando un amplio rango de procesos fotocatalíticos intensificados mediante diferentes tecnologías para incrementar su eficiencia y efectividad en la eliminación de contaminantes. Estos procesos de intensificación incluyen: el uso de diferentes reactores (reactor de capa fina, colector parabólico compuesto (CPC) solar, reactor de disco rotatorio...) y el uso de nuevas tecnologías de degradación de contaminantes (ultrasonidos (US), complejos de ferrioxalato y procesos de oxidación avanzada basados en radicales sulfato). Por tanto, la principal novedad de este trabajo, desarrollado principalmente en las instalaciones del grupo IMAES en la ETSII de Ciudad Real, radica en ser el primer estudio de comparación de un amplio rango de procesos fotocatalíticos intensificados.

La tesis se ha centrado en la comparación y optimización de los principales parámetros que controlan la cinética de reacción y el mecanismo de los reactores, para alcanzar el grado óptimo de degradación de contaminantes emergentes, usando los compuestos antipirina y carbamazepina como modelos. Se utilizó la eficiencia y efectividad de los tratamientos, la optimización mediante redes neuronales y el uso de análisis tecnoeconómicos para determinar la tecnología óptima de intensificación. Finalmente, se estudiaron aguas contaminadas reales procedentes de la industria para evaluar la validez de los procesos.

Como resultado, se confirmó que los procesos de oxidación avanzada son una alternativa tecnológicamente viable para la eliminación de contaminantes emergentes y los procesos de fotocatalisis solar se pueden plantear como una potencial etapa de pretratamiento en una EDAR.

DEFINICIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE LA SÍNTESIS DE NANOMATERIALES BASADOS EN GRAFENO

Doctorando: D. Maria del Prado Lavin Lopez

Directores: Dra. D. Amaya Romero Izquierdo
Dr. D^a José Luis Valverde Palomino



La tesis doctoral titulada “Definición y optimización de la síntesis de nanomateriales basados en grafeno”, abarca el estudio de la síntesis y caracterización de grafeno siguiendo dos estrategias diferentes: la estrategia Bottom-Up, en la que se parte de moléculas gaseosas de hidrocarburo para sintetizar láminas de grafeno sobre un metal, y la estrategia Top-Down en la que se usa grafito como materia prima para sintetizar materiales derivados del grafeno (en polvo o en suspensión).

En primer lugar, se optimizaron las principales variables de operación que influyen sobre la síntesis de grafeno mediante el método de Deposición Química en fase Vapor (CVD) a presión atmosférica. Para ello se usaron diferentes metales de transición (Ni, Cu, Fe) policristalinos como catalizadores, metano (CH_4) como fuente carbonosa, hidrógeno (H_2) como gas reductor, y nitrógeno (N_2) como gas inerte. Las variables de operación estudiadas fueron: temperatura, tiempo, relación entre los caudales de metano e hidrógeno y caudal total de gases ($\text{CH}_4 + \text{H}_2$), todas ellas durante la etapa de reacción. Para una exhaustiva caracterización de las muestras de grafeno obtenidas se utilizaron tanto la espectroscopía Raman como la microscopía óptica. Además, se diseñó una aplicación Excel-VBA para analizar la calidad del grafeno depositado sobre las láminas metálicas que, basándose en las imágenes obtenidas por microscopía óptica, permitía calcular el porcentaje de cada uno de los tipos de grafeno (monocapa, bicapa, pocas capas o multicapa) depositados sobre el catalizador metálico, determinando un “parámetro de calidad” en función de dichos porcentajes.

A continuación, se llevó a cabo la síntesis y caracterización de materiales derivados del grafeno siguiendo la estrategia Top-Down. En primer lugar, se sintetizó óxido de grafito mediante el método de Hummers Mejorado, el cual se intentó optimizar introduciendo determinados cambios que no afectarían significativamente al producto final. Por último, se llevó a cabo un estudio en el que se compararon tres estrategias de reducción de óxido de grafeno. En primer lugar, se estudió la reducción química de los grupos oxigenados presentes en la estructura del óxido de grafeno utilizando hidracina o ácido ascórbico como agentes reductores. A continuación, se llevó a cabo la reducción o eliminación parcial de los grupos funcionales oxigenados presentes en el óxido de grafito mediante un tratamiento térmico suave conocido como reducción térmica. Por último, y con la finalidad de incrementar el grado de reducción de grupos oxigenados, se siguió una estrategia de reducción basada en la combinación de las dos anteriores, conocida como reducción múltiples fases, que se basa en la reducción

OPTIMIZACIÓN ENERGÉTICA DE REDES INDUSTRIALES DE INTERCAMBIO DE CALOR

Doctorando: D. Mauricio Altamirano de la Nieta

Directores: Dr. D. José Luis Valverde Palomino
Dra. D^a Lourdes Rodríguez Mayor



INFLUENCIA DE LA ESPECIE BOTÁNICA, DEL GRADO DE TOSTADO Y DEL USO DE LAS BARRICAS DE ROBLE SOBRE LOS ELAGITANINOS; CONSECUENCIAS ENOLÓGICAS Y SENSORIALES

Doctoranda: D^a. María Navarro Fernández

Directores: Dr. D. Fernando Zamora Marín
Dr. D. Joan Miquel Canals Bosch
Dr. D. Isidro Herмосín Gutiérrez



La nueva doctora junto a sus directores de tesis (izquierda a derecha): Dr. Zamora Marín (URV), Dr. Canals Bosch (URV) y Dr. Herмосín Gutiérrez (UCLM).

El pasado 28 de febrero se defendió la Tesis Doctoral “INFLUENCIA DE LA ESPECIE BOTÁNICA, DEL GRADO DE TOSTADO Y DEL USO DE LAS BARRICAS DE ROBLE SOBRE LOS ELAGITANINOS; CONSECUENCIAS ENOLÓGICAS Y SENSORIALES”. La ya Doctora María Navarro Fernández se formó como Licenciada en Ciencia y Tecnología de Alimentos en la UCLM y pasó a ser alumna de doctorado del Programa de Enología de la Universidad Rovira i Virgili (URV, Tarragona) en virtud de la colaboración científica entre el Grupo de Tecnología Enológica de la URV (Dres. Fernando Zamora Marín y Joan Miquel Canals Bosch), el Grupo de Enología y Productos Naturales de la UCLM (Dres. Isidro Herмосín Gutiérrez y Sergio Gómez Alonso) y el Instituto de la Vid y el Vino de Castilla-La Mancha (Dr. Esteban García Romero. Esta colaboración se ha desarrollado en los últimos 6 años a través de proyectos nacionales coordinados.

El objetivo fundamental de este trabajo era generar información científica sobre los elagitaninos que la madera de roble libera al vino, así como la influencia del origen botánico del roble, del grado de tostado de las duelas y de la influencia del uso previo de las barricas, a fin de conocer mejor cómo todos estos factores afectan a la composición final del vino de crianza y de este modo generar conocimiento que pueda resultar útil tanto para el mundo académico como para los profesionales del sector.

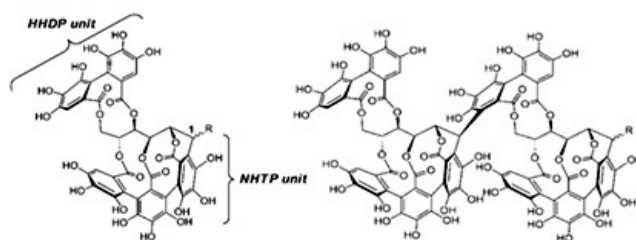
INFLUENCIA DE LA ESPECIE BOTÁNICA, DEL GRADO DE TOSTADO Y DEL USO DE LAS BARRICAS DE ROBLE SOBRE LOS ELAGITANINOS; CONSECUENCIAS ENOLÓGICAS Y SENSORIALES

Está generalmente aceptado, gracias a la experiencia acumulada durante años, que el contacto del vino con la madera de roble, ya sea en barricas o mediante el uso de alternativos como los virutas, implica el enriquecimiento del vino en elagitaninos, los cuales parecen contribuir a la astringencia, al sabor amargo y a la sensación de cuerpo del vino. Estos compuestos se liberan de forma relativamente rápida y posteriormente pueden desaparecer por hidrólisis u oxidación en un medio ácido como el vino.

El avance y la generalización de las técnicas instrumentales de análisis, especialmente en el caso de HPLC-MS, ha permitido el desarrollo de métodos analíticos mucho más potentes y eficaces por lo que su empleo para un estudio como el planteado permite revisar y profundizar en la investigación sobre los elagitaninos liberados por el roble.

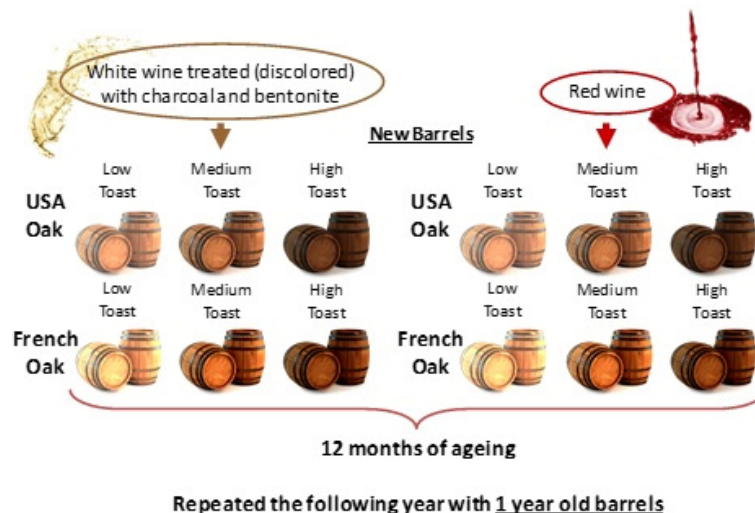
La Tesis se dividió en cuatro capítulos, el primero se centró desarrollar un método optimizado de el análisis de elagitaninos, el segundo en ver la influencia del origen botánico, grado de tostado y uso de las barricas sobre los elagitaninos en el vino, el tercero se baso en la apreciación sensorial por parte de un panel sobre los principales volátiles liberados por las barricas con diferentes características y, finalmente el cuarto en establecer la tasa de consumo de oxígeno por parte de los elagitaninos.

En el capítulo I se procedió a la mejora los métodos de análisis utilizados hasta el momento para evaluar la concentración de elagitaninos en el vino envejecido en contacto con madera de roble. Disminuyendo el volumen de muestra necesaria, la cantidad de disolvente utilizado y el número de pasos necesarios para extraer y aislar de forma cuantitativa la fracción de elagitaninos del vino por extracción en fase sólida, y también el método de análisis cromatográfico (HPLC) para determinar la cantidad de elagitaninos.



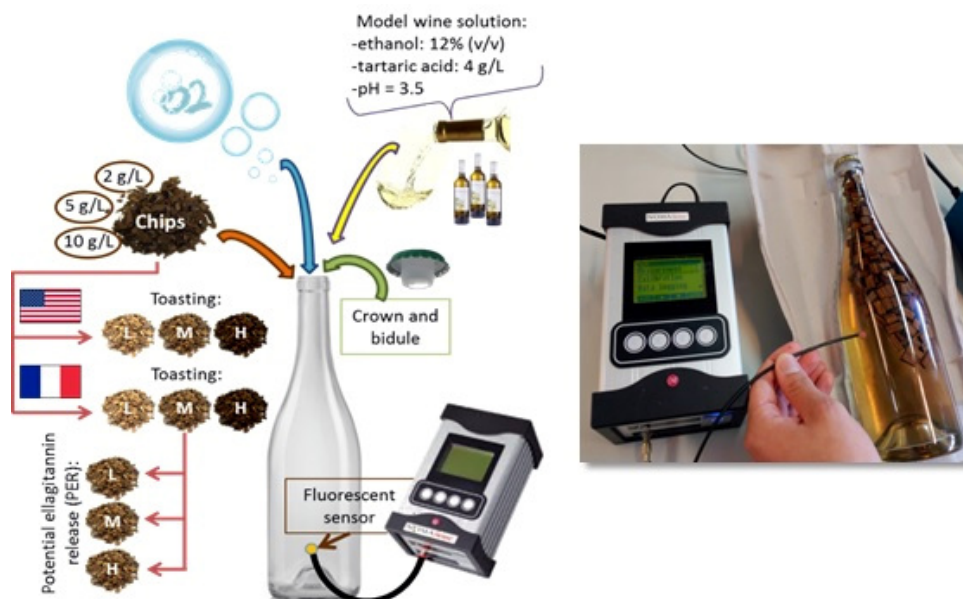
En el capítulo II se analizó el contenido y evolución de los elagitaninos totales en los vinos envejecidos en barricas de roble, en función de diversos parámetros como el origen botánico (roble francés vs. roble americano), así como los procesos a los que ve sometida la madera de roble para la fabricación de las barricas, como el proceso de tostado (niveles de tostado ligero, medio e intenso), y el número de veces que la barrica es usada. Ello fue posible mediante un diseño experimental en el que se emplearon duplicados de barricas cuya manufactura era perfectamente conocida y controlada, así como comparando los resultados obtenidos al emplear tanto una matriz neutra (vino blanco decolorado con carbón activo y bentonita) como una matriz compleja (vino tinto tal cual).

INFLUENCIA DE LA ESPECIE BOTÁNICA, DEL GRADO DE TOSTADO Y DEL USO DE LAS BARRICAS DE ROBLE SOBRE LOS ELAGITANINOS; CONSECUENCIAS ENOLÓGICAS Y SENSORIALES



Como un objetivo secundario, surgido a raíz del desarrollo de los trabajos experimentales de la tesis, se consideró el interés por realizar un estudio de los compuestos volátiles liberados de las barricas al vino, complementado con un enfoque sensorial, que constituye el contenido del capítulo III de la tesis.

Finalmente, en el capítulo IV se realizó un estudio del consumo de oxígeno por parte de los elagitaninos liberados por la madera de roble de diversos orígenes botánicos (francés o americano), niveles de tostado (ligero, medio e intenso) y potencial de liberación de elagitaninos (PER: bajo, medio y alto) a fin de cuantificar cuál es su verdadero impacto en la posible protección del vino frente a la oxidación.



PLAYING WITH BUCKYBALL MARACAS: STRUCTURE AND REACTIVITY OF ENDOHEDRAL FULLERENES

Prof. Luis Echegoyen

Robert A. Welch Chair Professor of Chemistry at the University of Texas at El Paso



Our group has been involved in the exohedral functionalization (addition chemistry) of both empty as well as of endohedral fullerenes and we have gained considerable fundamental knowledge of their reactivities and regiochemical preferences. Several of the compounds that we have synthesized work very well as electron extracting layers in perovskite solar cells and some of these results will be presented.

Working with endohedral compounds, we recently isolated and characterized two new scandium carbide endohedral structures, $\text{Sc}_2\text{C}_2@C_{2v}(9)\text{-C}_{86}$ and $\text{Sc}_2\text{C}_2@C_s(\text{hept})\text{-C}_{88}$.³ The former compound represents the first observation of the $C_{2v}(9)$ C_{86} cage and it possesses a distorted but ordered scandium cluster inside. The second compound is unique in that it possesses a heptagonal ring on its carbon surface, see Fig. 1. More importantly, this compound is a kinetically trapped product of the addition of a C_2 unit to $\text{Sc}_2\text{C}_2@C_{2v}(9)\text{-C}_{86}$, an important mechanistic result that reaffirms the “bottom-up” fullerene growth proposal.

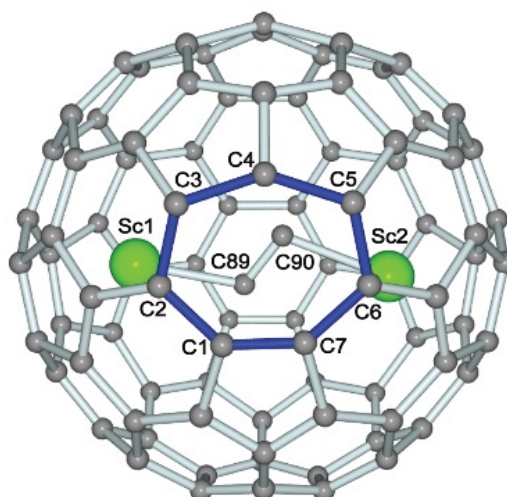
We have also made considerable progress with uranium-based endohedrals, obtaining the first X-Ray crystal structures of $\text{U}@C_{74}$ and two isomers of $\text{U}@C_{82}$ and found that the formal oxidation state of U varies with the isomeric cage. Remarkably, we have also obtained the crystal structures of $\text{U}_2@C_{80}$ (Ih) and of a totally unexpected uranium carbide, $\text{U}_2\text{C}@C_{80}$ (Ih), with a unique U-C bonding. Many other totally unexpected uranium endohedrals have been detected and are being isolated and characterized.

The synthesis, characterization and reactivities of several of these new compounds will be presented and discussed.

1 Echegoyen et al, ACS Appl. Mater. Interfaces, 2016 (DOI: 10.1021/acsami.6b10668).

2 Echegoyen, et al, J. Am. Chem. Soc. 2015, 137, 10116.

3 Echegoyen, et al, J. Am. Chem. Soc. 2016, 138, 13030.



“ENAMÓRATE DE LA CIENCIA”

I Feria de la Ciencia. IES “María Zambrano” de Alcázar de San Juan.

El pasado 14 de febrero tuvo lugar la I Feria de la Ciencia “Enamórate de la Ciencia” realizada por la Sección de Divulgación Científica del Grupo de Investigación Científica COLOR (Chemistry Outreach, Luminescence & Optics Research) bajo la dirección del Dr. José Antonio Murillo Pulgarín, Catedrático de Química Analítica.

Con esta Feria de la Ciencia se trata de transmitir a los más jóvenes la trascendencia social positiva de la Química, la Física y la Biología. Se realizan diez experimentos en los que los alumnos pueden participar con materiales muy sencillos, totalmente inocuos y relacionados con las actividades de la vida ordinaria. Por ejemplo, en Química se realiza un espejo de plata según el modelo tradicional transformando un recipiente esférico de vidrio en un espejo convexo que produce el mismo efecto que los espejos que se utilizan para controlar los posibles hurtos en los comercios o los que se colocan en los esquinas de calles estrechas para aumentar la visibilidad. Se explica la reacción del agua oxigenada con la sangre y cómo se desprende oxígeno que al final es el responsable de su acción desinfectante. Por último, los alumnos podrán escribir con diferentes tintas invisibles utilizadas por los espías en la Primera y Segunda Guerra Mundial, con rotuladores cuya escritura se revela con luz ultravioleta producida por un LED que contiene el mismo rotulador o rociando con un simple pulverizador una disolución muy diluida, inocua por tanto, de sosa.

En Física, se explican los choques elásticos que son los que se producen cuando chocan las pelotas con el suelo al caer o, mejor, cuando se produce la colisión entre las bolas de billar. Los alumnos realizan también una experiencia donde se comprueban aquellos compuestos de la vida diaria que son o no conductores de la electricidad, como la sal y el azúcar de cocina, el vinagre, el salfumat utilizado en limpieza, etc.

Se aprovecha también los fundamentos físicos en los que se basan algunos motores como los motores de cuatro tiempos que se utilizan en los coches y, en general, en los medios de transporte o los motores tipo Stirling. Para ello utilizamos maquetas mecánicas realizadas con materiales plásticos transparentes que permiten comprobar de manera totalmente visual cómo es el funcionamiento de estos motores y, además, comprender la importancia de la Ciencia en la Tecnología que se basa en la aplicación de los principios científicos.

Por último, en Biología los alumnos utilizan los llamados “microscopios USB” para observarse su propia piel, sus cabellos, sus uñas, etc. y también pueden observarse los tejidos de sus propias prendas de vestir y el tejido de las fibras textiles que los forman distinguiendo fácilmente las fibras sintéticas de las naturales: así pueden ver las fibras de sus camisas, abrigos, bufandas, etc. Otra de las experiencias consiste en descubrir los compuestos químicos volátiles que constituyen los aromas de algunos alimentos, frutas y flores mostrando así que la química es la base de la naturaleza.

Para transmitir a los alumnos que el uso adecuado de productos químicos en la alimentación es beneficioso y nada perjudicial, se analiza un aditivo alimentario que es un compuesto químico natural. Así hacen una experiencia donde descubren qué alimentos sin procesar contienen o no almidón, como pan, patata, manzana, arroz y como en algunos preparados tipo Jamón de York se utiliza también este aditivo.

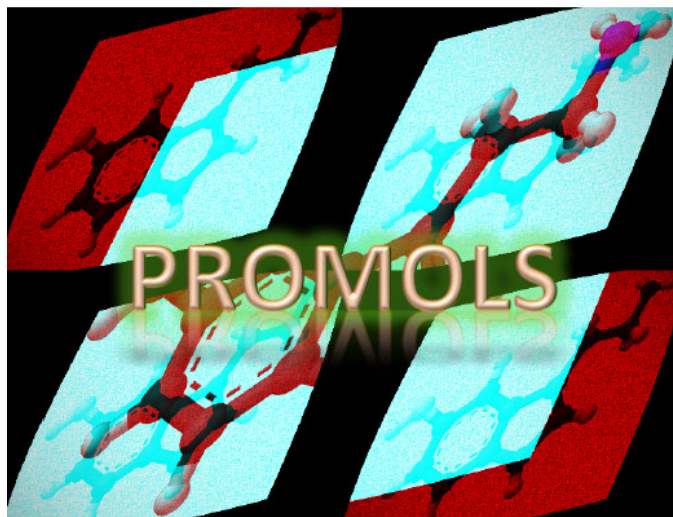
“ENAMÓRATE DE LA CIENCIA”

I Feria de la Ciencia. IES “María Zambrano” de Alcázar de San Juan.

En resumen se trata de concienciar a los ciudadanos de que los científicos, especialmente los químicos, somos personas al servicio de la comunidad que aprendemos, enseñamos e investigamos para el progreso y el desarrollo de la humanidad ya que la Ciencia está en cualquier proceso o en cualquier actividad humana por simple y sencilla que esta sea, es más la propia vida humana es un concatenación de reacciones químicas.

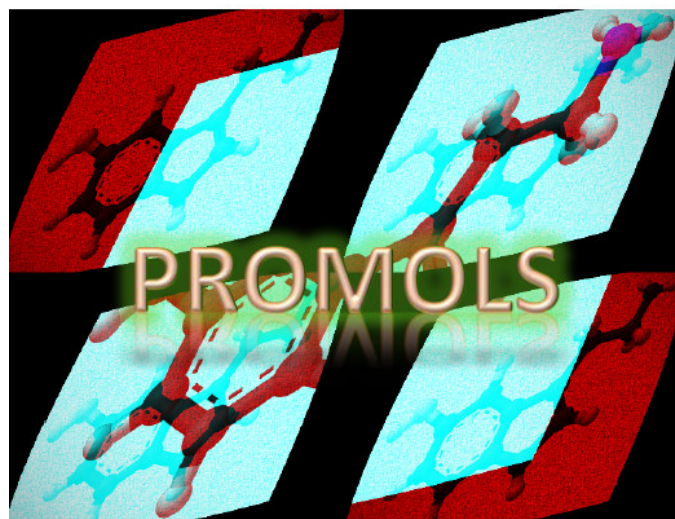
Síguenos en  @GrupoColorUCLM





La Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas a través de la revista MOLÉCULA promueve el concurso PROMOLS con las siguientes características:

- 1) Podrán participar los alumnos matriculados en la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas en los distintos grados y másteres.
- 2) En los números ordinarios (8) de la revista MOLÉCULA (Enero, Febrero, Marzo, Abril, Mayo, Julio, Septiembre y Octubre) se propondrá una propiedad o un proceso químico. Se excluyen los números monográficos (Junio y Noviembre).
- 3) Los alumnos que deseen participar deberán enviar moléculas o procesos que cumplan los requisitos explicando brevemente las características que presentan (máximo 2 páginas).
- 4) El envío se realizará por correo electrónico a la dirección (Antonio.Hoz@uclm.es) como documento adjunto en formato pdf y ponien como asunto PROMOLS. La fecha límite para la recepción de las trabajos es el día 20 de cada mes.
- 5) El decanato elegirá un jurado que seleccionará un ganador cada mes y en el mes de noviembre seleccionará un ganador final entre los ganadores de ese año. Las decisiones del jurado son inapelables.
- 6) La entrega del premio, que consistirá en una TABLET, se realizará durante las celebraciones de San Alberto Magno.



Recientemente un grupo de investigadores, entre los que se encuentran varios españoles, ha publicado la ruta genética para mejorar el sabor de los tomates.

Es habitual oír aquello de que los tomates ya no saben como antiguamente. Las mejoras genéticas del tomate y otros frutos se ha centrado fundamentalmente en la mejora del aspecto, dureza y resistencia a plagas, sin embargo se ha dejado de lado aspectos tan importantes como el sabor.

Por ello es necesario considerar cual es la ruta genética para mejorar el sabor de los alimentos y que vuelvan a ser como antes.

Por tanto nuestro primer PROMOL para el mes de marzo son las moléculas implicadas en el sabor de los tomates.



En el próximo número de Molécula...

En el próximo número incluiremos información sobre la Olimpiada de Química que se celebrará el día 3 de Marzo, algunos artículos de divulgación científica, información de cursos y jornada alimentarias, así como nuestras secciones habituales de investigación, Tesis doctorales, conferencias, estancias, y los resultados de la primera entrega del concurso PROMOLS.