



Universidad de  
Castilla-La Mancha



# REVISTA MOLÉCULA

Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas

<https://moleculauclm.wordpress.com>

Nº 202 Época III.  
Septiembre 2025

Programa de Doctorado en Química

Tesis Doctorales

Estancias

E-mail de contacto: [molecula@on.uclm.es](mailto:molecula@on.uclm.es)

ISSN: 2444-183X

|                                  |       |
|----------------------------------|-------|
| Presentación                     | P. 2  |
| Programa de Doctorado en Química | P. 3  |
| The Conversation                 | P. 5  |
| Noticias                         | P. 8  |
| José Elguero                     | P. 15 |
| Tesis Doctorales                 | P. 18 |
| Estancias                        | P. 29 |
| Artículos Científicos            | P. 36 |
| Sugerencia Mensual               | P. 37 |

Comité editorial: Clara Inés Alcolado, Rafael Granados, Antonio de la Hoz, Tania Paniagua, Sofía Parra, Álvaro Ramírez, Abelardo Sánchez.

## PRESENTACIÓN

En este número de Molécula reunimos una variada selección de temas: desde investigaciones recientes sobre el aprovechamiento de huesos de aceitunas y los efectos combinados de cocaína y alcohol, hasta la celebración de la jornada del programa de doctorado en Química. Conmemoramos los 100 años de la mecánica cuántica e incluimos dos artículos enviados por el Prof. José Elguero. Por último, podéis encontrar tesis doctorales defendidas y estancias predoctorales realizadas, además de nuevos artículos de investigación y una sugerencia mensual ¿Quién ocupó el despacho de Einstein?.

El comité editorial.

## PROGRAMA DE DOCTORADO EN QUÍMICA

En el mes de septiembre, durante los días 17, 18 y 19, se ha desarrollado en la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas el “Simposio del Programa de Doctorado en Química 2025”. Este simposio se organiza para que los estudiantes de doctorado adquieran destrezas en la organización de eventos científicos, impartir conferencias y para la comunicación de resultados y su plan de investigación a otros participantes ajenos a sus líneas de investigación. En esta edición han participado 43 estudiantes de doctorado de las diferentes líneas de investigación que integran el programa, de los campus de Toledo, Albacete, Ciudad Real, CSIC de Madrid y las empresas VANGUARDLAND Innova S. L. y Morteros el Sol. Hay que destacar que todos ellos han realizado Comunicaciones Orales de su trabajo de investigación. Este simposio forma parte de las actividades formativas obligatorias del Programa de Doctorado en Química. En esta edición se ha reconocido al Prof. Angel Ríos Castro por su labor durante más de 10 años como coordinador del Programa de Doctorado en Química de la UCLM, GRACIAS ANGEL.



Otro de los objetivos del programa es invitar a investigadores jóvenes y senior que están destacando en diferentes campos de la Química y de la Ciencia y Tecnología de los Alimentos para que compartan con nuestros estudiantes sus experiencias personales en su carrera profesional y los resultados más destacados de sus investigaciones. En esta edición han participado cinco investigadores, alguno de ellos realizó su Tesis Doctoral en grupos de investigación de nuestra Facultad por lo que es un orgullo para todos nosotros que sus carreras profesionales comenzaran en nuestro centro. En esta edición ha participado un investigador extranjero que colabora con uno de los grupos de investigación del programa, el Prof. Ole John Nielsen de la Universidad de Copenhague (Dinamarca), premio Nobel de la Paz por su participación en el equipo que desarrolló estudios sobre el cambio climático y sus consecuencias en el futuro. Las conferencias que impartieron han sido muy interesantes y se abrieron a todo el personal de la Facultad, agradecer la asistencia a todos los compañeros del centro que encontraron tiempo para asistir a las conferencias de estos investigadores y de nuestros estudiantes de doctorado. La verdad, que todas las sesiones han contado con una participación muy destacada.



Las conferencias impartidas por estos investigadores han sido; “Ligand Design: a Path towards Cooperative Organometallic Chemistry” por el Dr. Miquel Navarro Blasco Investigador Ramón y Cajal de la Universidad Autónoma de Madrid; “De la Química Analítica a la Nanotecnología: una trayectoria en plataformas sensóricas” por la Dra. María Moreno Guzman Profesora Titular de la Facultad de Farmacia de la Universidad Complutense de Madrid; “What should I do? – Career planning? Career routes?” por el Prof. Ole John Nielsen procedente de la University of Copenhagen, Dinamarca; “¡Basura científica!: De residuos a recursos y otras (super)vivencias académicas” por el Dr. Rodrigo Oliver Simancas Investigador Juan de la Cierva de la Universidad de Granada; y por último la conferencia titulada “Del microondas a la espintrónica orgánica: un viaje supramolecular, internacional e independiente” por la Dra. Amparo Ruiz Carretero investigadora del programa ATRAЕ que se ha incorporado recientemente al Instituto de Ciencias de los Materiales de Madrid (ICMM) del CSIC. Desde el Programa de Doctorado en Química de la UCLM, a todos ellos les queremos agradecer su colaboración con el programa de forma desinteresada.

Por último, quiero comentar que durante esta actividad formativa se ha organizado un concurso para premiar los mejores trabajos de investigación. Los galardonados con premio han sido: D. Carlos Abellán Diéguez “Microencapsulación de extractos comerciales de origen vegetal como estrategia para mejorar la bioaccesibilidad de sus compuestos funcionales”; Dña. Cristina Blasco Navarro “Multimodal Strategies Against PARP Inhibitor Resistance”; D. Dimitrios Ziogkas “Análisis del ácido fólico con nanopartículas ecológicas: Aplicación de una estrategia de la nanotecnológica sostenible”; D. Enrique Francés Poveda “Fijación de CO<sub>2</sub> en metanol catalizada por compuestos de Ca” y Dña. María López-Sepúlveda Ortega “Optimización de la extracción hidrotermal asistida por microondas para la recuperación sostenible de pectina a partir de la piel externa de la cebolla “La Mancha”.

Esta es una actividad formativa obligatoria del programa de Doctorado en Química que se realizará una vez cada curso y esperamos que en los próximos años el éxito de esta edición se repita.

Prof. Agustín Lara Sanchez.  
Coordinador del Programa de Doctorado en Química

## Así podemos aprovechar los huesos de aceituna para producir biocombustibles



01/07/2025

María Luz Sánchez Silva, Universidad de Castilla-La Mancha; Alba Villardón Pérez, Universidad de Castilla-La Mancha y Fernando Dorado Fernández, Universidad de Castilla-La Mancha

En un mundo donde la lucha contra el cambio climático se ha convertido en una carrera contrarreloj, la búsqueda de soluciones sostenibles es más urgente que nunca. Una de ellas consiste en convertir el dióxido de carbono ( $\text{CO}_2$ ) en metano ( $\text{CH}_4$ ), un combustible útil. Una de las estrategias más prometedoras para lograrlo es la metanación de  $\text{CO}_2$ , técnica innovadora que podría revolucionar nuestra industria energética.

Sin embargo, la implementación a gran escala de este proceso ha sido limitado por la falta de materiales catalíticos –es decir, que aceleran las reacciones químicas– sostenibles y rentables. Aquí es donde entra en juego el biochar o biocarbón derivado de huesos de aceituna.

La conversión del dióxido de carbono en metano no solo ayuda a reducir las emisiones de gases de efecto invernadero, sino que también proporciona una fuente de energía renovable. Este proceso tiene el potencial de transformar la industria energética, pero para que sea viable, se necesitan catalizadores eficientes y sostenibles. El uso de biochar derivado de residuos agrícolas, como los huesos de aceituna, ofrece una solución prometedora.

### **El potencial de los huesos de aceituna.**

Los olivares no solo son un símbolo del paisaje mediterráneo, sino también una fuente invaluable de biomasa renovable. España, líder mundial en la producción de aceitunas, dedica aproximadamente 2,75 millones de hectáreas al cultivo de olivos. Regiones como Andalucía y Extremadura destacan por su alta producción, con la primera representando el 80 % del total nacional.

Este cultivo genera una gran cantidad de residuos, entre ellos los huesos de aceituna, que tradicionalmente se consideraban desechos. Sin embargo, estos huesos tienen un enorme potencial como materia prima para aplicaciones sostenibles.

## ¿Qué es el biochar y por qué es importante?

La producción del biocarbón implica la pirólisis –descomposición por calor en ausencia de oxígeno– de biomasa, como los huesos de aceituna, a altas temperaturas. El resultado es un material poroso ideal para aplicaciones catalíticas, por ejemplo, en la producción de metano a partir de dióxido de carbono.

La producción de biocarbones activos está ganando tracción a nivel mundial debido a sus múltiples aplicaciones en la agricultura, la purificación de agua y la mitigación del cambio climático.

Se espera que el mercado de biocarbones activos crezca a una tasa compuesta anual del 3,5 % entre 2023 y 2030, alcanzando un valor proyectado de 3500 millones de dólares estadounidenses para el final de este periodo.

## El proceso de activación química

Para aprovechar al máximo el potencial del biochar, es necesario someterlo a un proceso conocido como activación química, que mejora sus propiedades y lo convierte en un soporte más eficaz para catalizadores. En un estudio reciente, evaluamos tres métodos de activación utilizando distintos agentes: hidróxido de potasio (KOH), cloruro de zinc ( $\text{ZnCl}_2$ ) y ácido fosfórico ( $\text{H}_2\text{PO}_4$ ).

El biochar activado con hidróxido de potasio fue el que ofreció mejores resultados. Este tratamiento incrementó notablemente su superficie específica, es decir, la cantidad de área disponible para que ocurran las reacciones químicas. Además, introdujo grupos funcionales que facilitaron una mejor dispersión de las partículas de níquel –empleado como catalizador para acelerar las reacciones– sobre la superficie del biochar. Estos grupos funcionales, pequeñas partes de una molécula con ciertas propiedades, son clave porque favorecen la activación del  $\text{CO}_2$ , lo que permite convertirlo en metano de forma más eficiente.

Gracias a estas mejoras, el material logró convertir el 72 % del  $\text{CO}_2$  en metano, con una selectividad del 95,5 %, lo que significa que casi todo el  $\text{CO}_2$  transformado terminó convertido en metano (rozando lo ideal).

## Biochar activado en las tecnologías para producir metano

Las tecnologías Power-to-Methane (P2M) son una solución innovadora para producir metano a partir de dióxido de carbono con dos etapas principales. La primera consiste en la electrólisis del agua utilizando electricidad renovable para dividir el agua en hidrógeno ( $\text{H}_2$ ) y oxígeno ( $\text{O}_2$ ). Luego, en la segunda etapa, el hidrógeno se combina con  $\text{CO}_2$  produciendo metano y agua.

Es en esta segunda etapa donde la incorporación de materiales como el biochar activado derivado del hueso de aceituna dopado con níquel puede mejorar sustancialmente el rendimiento y la viabilidad económica de estos procesos.

El metano generado puede ser inyectado en la red de gas natural existente o utilizado como combustible para generar electricidad y calor. Las tecnologías P2M no solo ayudan a reducir las emisiones de  $\text{CO}_2$ , sino que también permiten almacenar energía renovable de manera eficiente. Esto es especialmente útil para fuentes de energía intermitentes como la solar y la eólica, que no siempre producen electricidad cuando se necesita.

Al convertir el exceso de electricidad en metano, las tecnologías P2M permiten almacenar esta energía y utilizarla en momentos de alta demanda. Cuando sea necesario, el metano se quema para producir electricidad, igual que se hace con el gas natural. Se puede usar en centrales eléctricas, turbinas o motores. También hay tecnologías más modernas, como las pilas de combustible, que lo transforman en electricidad sin necesidad de llamas.



Esquema de las tecnologías Power-to-Methane para valorizar residuos agrícolas. María Luz Sánchez Silva, CC BY-SA

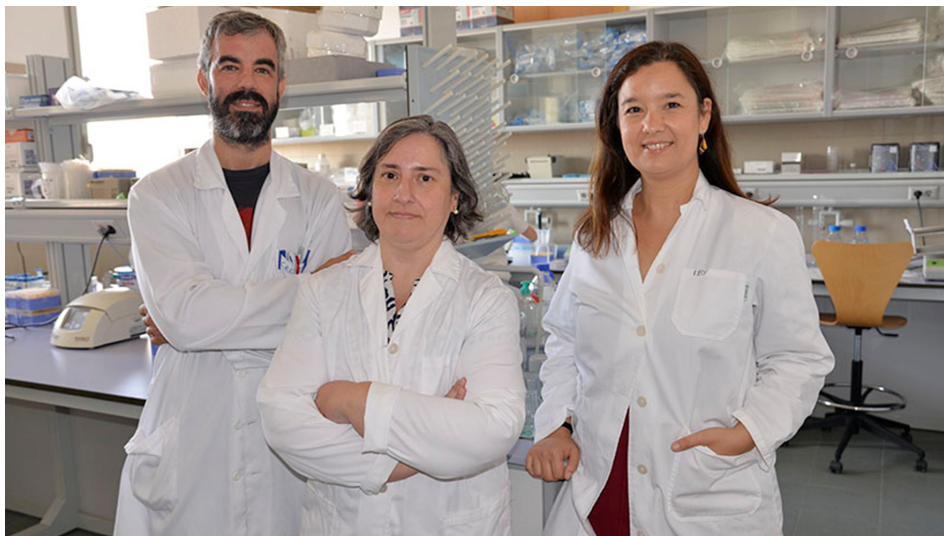
## Impacto ambiental y económico

El uso de residuos agrícolas como los huesos de aceituna ofrece una solución sostenible para la gestión de desechos y promueve una economía circular. Al convertir estos residuos en materiales de alto valor añadido, se reduce la dependencia de recursos no renovables y se minimiza el impacto ambiental. Además, genera ingresos adicionales para los agricultores, mejorando la economía de las zonas rurales.

El potencial del biochar no se limita a la metanación de  $\text{CO}_2$ . Sus aplicaciones pueden extenderse a otros procesos catalíticos y de adsorción, como la purificación de agua y aire. La investigación continua en este campo podría abrir nuevas oportunidades para su uso en diversas industrias, contribuyendo aún más a la sostenibilidad global.

Este artículo fue publicado originalmente en The Conversation. Lea el original.

## Un estudio pionero de la UCLM muestra que la combinación de cocaína y alcohol produce un daño cerebral mayor que su consumo por separado.



De izqda. a dcha.: Carlos A. Castillo, Pilar Alberdi e Inmaculada Ballesteros.

29/07/2025

El consumo conjunto de cocaína y alcohol es una práctica frecuente especialmente entre jóvenes y adultos en contextos recreativos. Poco se sabía sobre los efectos que esta mezcla tiene a nivel cerebral. Ahora, un estudio liderado por la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM), en el que han participado investigadores de la Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED), ha demostrado que su combinación no solo potencia los efectos individuales de ambas sustancias, sino que “altera profundamente” regiones clave del cerebro implicadas en las emociones, el control de impulsos y la adicción.

Investigadores de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) y de la Universidad Nacional de Educación a Distancia (UNED) han llevado a cabo un estudio que revela por primera vez que el consumo conjunto de cocaína y alcohol potencia los efectos individuales de ambas sustancias y provoca un mayor daño cerebral respecto a cuando se administran por separado, afectando a más de un centenar de proteínas clave relacionadas con la adicción, el estado de ánimo y el sueño.

Para el desarrollo de este estudio, liderado por la investigadora de la Facultad de Medicina de la UCLM en el Campus de Ciudad Real Inmaculada Ballesteros Yáñez y publicado en la revista *Neurochemistry International*, el personal investigador utilizó una innovadora técnica de imagen molecular llamada espectrometría de masas por MALDI para analizar el cerebro de ratas expuestas crónicamente a estas sustancias.

Los resultados mostraron un “efecto sinérgico”, es decir, que el daño cerebral es mucho mayor cuando se combina cocaína y alcohol a cuando se consumen por separado. La región cerebral más afectada fue la amígdala, fundamental en la regulación emocional, donde se observaron importantes descensos en proteínas del sistema GABAérgico y opioide, dos rutas clave en la regulación del placer, la ansiedad y el control de impulsos. Además, los investigadores detectaron alteraciones en rutas implicadas en la neurodegeneración y la desregulación del ritmo

Según los autores, estos hallazgos pueden ayudar a entender por qué el uso combinado de alcohol y cocaína genera mayor riesgo de dependencia y trastornos mentales, ofrecen un paso más hacia una comprensión más realista y compleja del cerebro adicto, y abren nuevas vías para desarrollar biomarcadores e impulsar futuras investigaciones clínicas y traslacionales para avanzar en la prevención, diagnóstico y tratamiento más eficaz de las adicciones.

El estudio ha sido financiado, entre otros, por el Ministerio de Ciencia e Innovación, el Plan Nacional sobre Drogas y el Instituto de Salud Carlos III. En el mismo han participado Inmaculada Ballesteros, Pilar Alberdi y Carlos A. Castillo Sarmiento, de la UCLM; y Alberto Marcos y Emilio Ambrosio, de la UNED.

Gabinete de Comunicación  
Ciudad Real, 29 de julio de 2025

## Los frenéticos meses que dieron origen a la física cuántica hace 100 años.



¿A quiénes reconoces en la llamada fotografía más inteligente de la historia? Al final de la nota encuentras todos los nombres.

Ana Pais, BBC News Mundo

7 septiembre 2025

La física cuántica es "uno de los grandes monumentos de la historia de la humanidad", afirma el físico e historiador de la ciencia español José Manuel Sánchez Ron.

Puede sonar raro llamar "monumento" a una rama de la ciencia que estudia la materia a escala microscópica, es decir, el comportamiento de los electrones, los fotones y otras partículas subatómicas.

Pero aunque Sánchez Ron reconoce que se trata de "una creación que no es de piedra ni de ningún material sólido de esos que se pueden tocar", está convencido de que "durará mucho más que cualquiera de ellos".

Por lo pronto, han pasado 100 años desde que se publicó el estudio científico que desató la revolución de la física cuántica, una teoría que todavía sigue transformando ámbitos tan dispares como la medicina, la seguridad nacional y las telecomunicaciones.

"Cambió cómo vivimos, cómo trabajamos, cómo nos relacionamos y nos comunicamos. En ese sentido, la mecánica cuántica tiene una importancia descomunal, mayor que ninguna otra teoría de las que conocemos", afirma Sánchez Ron a BBC Mundo.

"Otro hijo menos bienvenido de la física cuántica son las bombas atómicas de Hiroshima y Nagasaki", agrega para destacar cómo influyó —e influye— poderosamente en la política internacional.

Incluso transformó nuestro propio sentido de la realidad, ya que es una teoría que desafía la intuición. "Creo que puedo decir con seguridad que nadie entiende la mecánica cuántica", declaró en 1964 el físico Richard Feynman en una de sus célebres conferencias.

Justamente por eso Unesco está celebrando el Año Internacional de la Ciencia y la Tecnología Cuánticas con decenas de eventos a lo largo del mundo para marcar un siglo de su creación.

"Algo con este nivel de impacto necesita la atención de políticos, científicos y del público en general", explica a BBC Mundo Amal Kasry, jefa del área de Ciencias Básicas de Unesco.

Por eso, para leer este artículo sobre el origen de la física cuántica el consejo es el mismo que Feynman dio en aquellas conferencias: "Simplemente relájense y disfruten".

Un siglo después, la física cuántica es aún una de las áreas científicas más efervescentes.

## El joven genio

El 29 de julio de 1925 la revista alemana especializada en física Zeitschrift für Physik recibió un artículo que sacudiría la física al ser publicado unos meses después. Su autor era un alemán de 23 años llamado Werner Heisenberg.

Esa juventud, lejos de una desventaja, fue una de sus fortalezas, ya que le permitió cuestionar los paradigmas vigentes creados por físicos de la talla de Albert Einstein, Niels Bohr y Arnold Sommerfeld. Isaac Newton llevaba más de 180 años muerto cuando Einstein tiró abajo su teoría de la gravedad. Heisenberg, en cambio, fue discípulo de Sommerfeld, colaborador de Bohr y mantuvo varios debates con Einstein a lo largo de los años, el único de los tres que jamás aceptó la teoría cuántica. Según Sánchez Ron, "aparte de genio, joven y con una exquisita formación, se podría decir que Heisenberg estuvo en el lugar adecuado en el momento adecuado". Otros autores lo describen también como ambicioso, jovial y amante del excursionismo. "Heisenberg logró reunir un gran conjunto de observaciones, de datos, de incógnitas que se habían venido acumulando con especial fuerza a partir de 1900", explica el académico español que este año publicó la trilogía "Historia de la física cuántica" con motivo del centenario. De hecho, el primer volumen abarca el periodo fundacional de esta teoría y va de 1860 a 1924. El segundo tomo comienza con el artículo de 1925, donde Heisenberg "desarrolló la primera forma satisfactoria de mecánica cuántica". Pero antes, tuvo que enfermarse.

## Una teoría "loca".

Durante años, lo que podría llamarse la "vieja teoría cuántica" fue avanzando y, a la vez, arrastrando problemas e incongruencias.

Tal es así que en 1923 el físico y matemático Max Born escribió: "Es cada vez más probable que no solo se necesiten nuevas hipótesis, sino que todo el sistema de conceptos de la física tenga que reconstruirse desde cero". Fue en ese mismo año que Heisenberg se incorporó como asistente de Born en la Universidad de Gotinga, Alemania. Allí el joven descubrió lo que desataría su famoso artículo de 1925: existían problemas en las órbitas usadas para explicar el movimiento de los electrones en el llamado modelo atómico de Bohr-Sommerfeld. Unos meses después de llegar a Gotinga, Heisenberg se fue un semestre a Copenhague, Dinamarca, a trabajar justamente con Bohr.



Con solo 23 años, Heisenberg "desarrolló la primera forma satisfactoria de mecánica cuántica".

"El énfasis en Gotinga estaba más en el lado matemático, en el lado formal, mientras que en Copenhague estaba más en el lado, yo diría, filosófico", explicaría años después Heisenberg.

Esa combinación de influencias fue crucial para ayudarlo a pensar una teoría "loca", como él mismo la llamó.

En un artículo de la revista Nature sobre el centenario de la física cuántica, el historiador de la ciencia Kristian Camilleri cuenta que Heisenberg "experimentó con todo tipo de ideas hasta encontrar una que funcionara: un enfoque muy adecuado para un período de tanta agitación conceptual".

En mayo de 1925 Heisenberg sufrió un fuerte ataque de alergia y se retiró a la isla de Heligoland, en Alemania, para curarse "con los aires de mar", según su autobiografía.

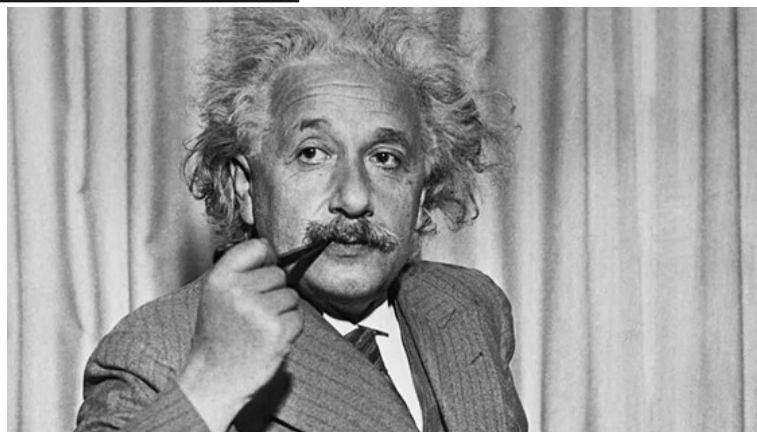
"Aparte de los paseos diarios —escribió el físico— no hubo ocasión externa alguna que me pudiera apartar de trabajar en mi problema y así avancé más rápidamente de lo que me hubiera sido posible en Gotinga".

## **Heisenberg *versus* Einstein.**

"En lugar de construir un modelo atómico basado en la idea de que los electrones se mueven a lo largo de órbitas bien definidas de forma aproximadamente clásica, Heisenberg decidió desarrollar una teoría innovadora del movimiento, una 'mecánica cuántica', en la que los electrones ya no podían considerarse partículas que se mueven a lo largo de trayectorias continuas", cuenta Camilleri.

El propio Heisenberg reconoció en una carta de principios de julio de 1925 que todos sus "miserables esfuerzos" estaban depositados en "eliminar por completo el concepto de órbitas, que, de todos modos, no se pueden observar".

Tal como había hecho Einstein en su juventud, Heisenberg partió de la base de que "las teorías debían evitar cualquier concepto que no pudiera ser observado, medido o verificado", escribe el periodista Walter Isaacson en la biografía "Einstein".



"Ha surgido una nueva moda en la física", se quejaba Albert Einstein refiriéndose a la física cuántica.

Sin embargo, su referente fue también su mayor detractor. Isaacson reproduce en el libro el siguiente diálogo del primer encuentro de Heisenberg y Einstein, ocurrido en 1926:

—No podemos observar las órbitas de los electrones dentro del átomo —dijo Heisenberg—. Una buena teoría debe basarse en magnitudes directamente observables.

—Pero ¿no creerá usted en serio que solo las magnitudes observables deben formar parte de una teoría física? —protestó Einstein.

—¿No es precisamente lo que usted ha hecho con la relatividad? —preguntó Heisenberg, no sin cierta sorpresa.

—Posiblemente empleé esa clase de razonamiento —admitió Einstein—, pero aún así es un sinsentido.

Luego incluso diría que "un buen chiste no debe repetirse demasiado". Le gustara a Einstein o no, ya era demasiado tarde: la revolución había llegado para quedarse.

## **La "avalancha" cuántica.**

"La rapidez con la que la mecánica cuántica se desarrolló es sorprendente", escribe Camilleri.

El historiador de la ciencia cuenta que "la avalancha de artículos" que se desató "dejó a muchos físicos con dificultades para mantenerse al día con los últimos avances": "Apenas alguien comprendía una nueva técnica o formulación de la mecánica cuántica, aparecía otra".

Incluso cuenta que existen varios ejemplos de físicos que presentaban artículos a revistas científicas y recién entonces se enteraban de que alguien más había descubierto exactamente lo mismo y lo había publicado poco antes.

Según sus cálculos, se publicaron casi 200 artículos sobre la temática entre julio de 1925 y marzo de 1927, cuando Heisenberg publicó su principio de incertidumbre en un artículo que también fue crucial para la física cuántica y que para Camilleri "redondeó su desarrollo".

Para Heisenberg, en cambio, "oficialmente la culminación de la teoría cuántica" ocurrió unos meses después, en octubre de 1927, durante el V Congreso Solvay de física en Bruselas.

Fue allí donde Einstein y Bohr tuvieron su legendario debate acerca de si Dios juega (o no) con los dados y donde se tomó la icónica imagen que reúne a sus 29 asistentes, usualmente apodada la fotografía más inteligente de la historia. No en vano más de la mitad de las personas retratadas ya habían obtenido o terminarían recibiendo el premio Nobel.

Entre los 29 solo hay una mujer, Marie Curie, y aunque mucho ha cambiado desde entonces, la brecha de género es uno de los grandes desafíos de la física cuántica hoy, dice Kasry.

"El 79% de las empresas cuánticas no tienen mujeres en posiciones de liderazgo y solo 1 de cada 54 solicitantes de empleo en el sector cuántico es mujer", afirma un reporte publicado este año por Unesco.

El otro desafío es "la brecha, la enorme brecha que existe entre el norte y el sur respecto a la tecnología cuántica", afirma Kasry. Incluso, agrega, "solo unos pocos países han desarrollado estrategias concretas" para abordar la temática.

Aquellos frenéticos meses ocurridos hace un siglo impactan hoy en nuestras vidas y lo seguirán haciendo, ya que la física cuántica es aún una de las áreas científicas más efervescentes.

Por eso, aunque "nadie entiende la mecánica cuántica", quizás este artículo al menos ayude a valorarla.

Estas son las personas de la fotografía principal del artículo, enumerados de izquierda a derecha:

- Tercera fila: Auguste Piccard, Émile Henriot, Paul Ehrenfest, Édouard Herzen, Théophile de Donder, Erwin Schrodinger, Jules-Émile Verschaffelt, Wolfgang Pauli, Werner Heisenberg, Ralph Howard Fowler, Léon Brillouin
- Segunda fila: Peter Debye, Martin Knudsen, William Lawrence Bragg, Hendrik Anthony Kramers, Paul Dirac, Arthur H. Compton, Louis de Broglie, Max Born, Niels Bohr.
- Primera fila: Irving Langmuir, Max Planck, Marie Curie, Hendrik A. Lorentz, Albert Einstein, Paul Langevin, Charles-Eugène Guye, C. T. R. Wilson, Owen Willans Richardson.

## ¿Puede considerarse satisfactorio el uso de particiones para describir la realidad física?

17Jun25

ANY serious consideration of a physical theory must take into account the distinction between the objective reality, which is independent of any theory, and the physical concepts with which the theory operates. These concepts are intended to correspond with the objective reality, and by means of these concepts we picture this reality to ourselves.

A. Einstein, B. Podolsky and N. Rosen, 1935.

En muchas ramas de la química, pero especialmente en espectroscopía, espectrometría y química cuántica, es parte obligada del análisis de datos su partición en diferentes términos, generalmente aditivos, ya que raramente se incluyen términos de interacción.

En el campo de la química teórica, desde Keiji Morokuma hasta Ángel Martín Pendás y Julia Contreras pasando por Donald G. Truhlar, cualquier resultado numérico, no solo termodinámico (EDA), se somete a una partición más o menos rigurosa, siendo el requisito principal que la suma de los términos coincida con el valor analizado.

¿Es esto necesario? ¿O es meramente contingente debido a la debilidad humana?

El valor obtenido pertenece de forma biunívoca a una entidad molecular (o supramolecular) específica. Muchas propiedades (geometría, deformación, tensiones, cargas, estados, etc.) están asociadas a esta entidad. Al ser humano, dada su limitada inteligencia algebraica y geométrica, le resulta casi imposible trascender las tres dimensiones y, por lo tanto, comprender una molécula en su totalidad. De ahí la partición.

En un próximo futuro la rivalidad con otras formas de inteligencia (capaces de hacerlo) llevará a los humanos no a evolucionar, que es extremadamente lento, sino a educar a sus descendientes para que piensen multidimensionalmente y a asociar a una molécula un valor obviando las particiones.

Algo similar ocurre con las tablas de valores, que tradicionalmente se discuten con gran detalle incluso cuando toda la información está en la tabla. Algún día, los lectores de una publicación podrán analizar una tabla “desnuda” por iniciativa propia. Solo así podrán ir más lejos que los autores

Se atribuye a Niels Bohr esta frase «Es muy difícil hacer predicciones, sobre todo respecto al futuro». Que esto sirva de salvaguardia para todo lo anterior.

José Elguero

## **Premios y medallas que llevan el nombre de científicos a las cuales los químicos pueden acceder.**

### **Gobierno de España, Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades, Premios Nacionales de Investigación**

Premio Nacional de Investigación Santiago Ramón y Cajal  
Premio Nacional de Investigación Enrique Moles  
Premio Nacional de Investigación Juan de la Cierva  
Premio Nacional de Investigación Leonardo Torres Quevedo  
Premio Nacional de Investigación Blas Cabrera  
Premio Nacional de Investigación Alejandro Malaspina

### **El Premio Nacional de Investigación para Jóvenes**

Premio Nacional de Investigación Felisa Martín Bravo  
Premio Nacional de Investigación María Teresa Toral

### **Real Academia de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales**

Medalla Echegaray  
Medalla Santiago Ramón y Cajal

### **Real Academia Nacional de Farmacia de España**

Medalla Carracido

### **Consejo Superior de Investigaciones Científicas**

Medalla Margarita Salas

### **Instituto Cajal (CSIC)**

Diploma Internacional Cajal

### **Comunidad de Madrid**

Premio Margarita Salas  
Premio Miguel Catalán

### **Comunidad Valenciana**

Premio Alberto Sols

### **Generalitat de Catalunya**

Medalla Narcís Monturiol

## **Gobierno de Aragón**

Premio Aragón Investiga a la Excelencia Investigadora Miguel Servet

Premio Aragón Investiga para Jóvenes Blanca Catalán de Ocón

Premio Aragón Investiga a Investigación con Perspectiva de Género María Andresa Casamayor

## **Universidad de Valencia**

Premio Carmen y Severo Ochoa

## **Real Sociedad Española de Química**

Premio Elhúyar-Goldschmidt

Premio González-Ciamician

Premio Catalán-Sabatier

Premio Moles-Weizmann

Premio Medinaveitia-Lourenço

Premio Gamboa-Winkler

## **Grupos Especializados**

Grupo Especializado de Química Orgánica

Medalla Félix Serratosa

Medalla Ignacio Ribas

Medalla José Barluenga

Grupo Especializado de Electroquímica

Premio Antonio Aldaz

Grupo Especializado de Adsorción

Premio Juan de Dios López González

Grupo Especializado de Química y Computación

Premio Juan Bertrán i Rusca

Premio José Elguero Bertolini

Grupo Especializado de Didáctica e Historia de la Física y la Química

Premio Salvador Senent

Sección Territorial de Madrid

M. Cruz Moreno-Bondi

## **Fundación Cajasol**

Premio Manuel Losada Villasante

Aquellas lectoras y lectores que deseen corregir esta lista por adición u omisión pueden escribir a Molécula y sus comentarios serán atendidos.

## **Polymeric materials as three-dimensional scaffolds for cell culture and differentiation.**

**Irene San Millán Rodríguez**

El pasado 22 de julio de 2025 tuvo lugar la defensa de la Tesis Doctoral de Dña. Irene San Millán Rodríguez titulada “Materiales poliméricos como soportes tridimensionales para cultivo y diferenciación celular/Polymeric materials as three-dimensional scaffolds for cell culture and differentiation”. Esta tesis ha sido desarrollada en el Departamento de Química Inorgánica, Orgánica y Bioquímica, bajo la supervisión de las profesoras Dña. Ester Vázquez Fernández-Pacheco y Dña. Sonia Merino Guijarro y en colaboración con la Facultad de Medicina de Ciudad Real bajo la supervisión de Dña. Inmaculada Ballesteros Yáñez. Dicho acto de defensa concluyó con la calificación de sobresaliente “*Cum Laude*” por parte del tribunal, siendo los miembros constituyentes del mismo Dña. María Concepción Serrano López-Terradas del Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid (ICMM, CSIC) como presidenta, Dña. Andreia Lages Cerqueira de la Universidad de Aveiro como vocal y D. Antonio Manuel Rodríguez García de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) como secretario. A continuación, se presenta un breve resumen sobre el trabajo desarrollado en esta tesis:

En los últimos años, la búsqueda de tratamientos innovadores que permitan sustituir a los métodos de trasplante y regeneración de órganos tradicionales ha promovido la aparición de grandes avances en el campo de la ingeniería de tejidos. Las investigaciones centradas en el desarrollo de nuevos biomateriales que actúen como soportes para el crecimiento de las células y que presenten propiedades ventajosas (como respuesta a estímulos externos o capacidad antimicrobiana entre otras) son esenciales para conseguir una regeneración exitosa.

En este contexto, el trabajo realizado durante esta tesis busca desarrollar nuevos materiales poliméricos para su empleo como soportes tridimensionales de cultivos celulares. Estos soportes, además de brindar un sustento mecánico adecuado para las células y su desarrollo, incorporan distintos nanomateriales cuyas propiedades resultan de gran interés a la hora de ampliar su aplicabilidad en ingeniería de tejidos.

El primer capítulo comienza con una revisión general sobre la ingeniería de tejidos y los diferentes biomateriales más utilizados en este campo, así como de las principales técnicas empleadas para su obtención. Una vez establecidas estas bases generales, el capítulo se centra en los hidrogeles, detallando aspectos relacionados con sus propiedades, aplicaciones y métodos de síntesis. Finalmente, el capítulo concluye con una revisión global de los nanomateriales, haciendo hincapié en las ventajas que ofrece su uso combinado con los hidrogeles como soportes para biomedicina.

El segundo capítulo aborda la síntesis y caracterización de hidrogeles híbridos de acrilamida y quitosano, a los que se incorporan grafeno y nanopartículas de magnetita. En el caso del grafeno, la presencia de este nanomaterial bidimensional permite conseguir altos niveles de viabilidad y diferenciación neuronal (Figura 1). Por su parte, la formación de nanopartículas superparamagnéticas de  $\text{Fe}_3\text{O}_4$  en el interior de los hidrogeles ha demostrado ser una forma eficaz de controlar la liberación de fármacos y moléculas bioactivas mediante la aplicación de un campo magnético externo alterno de baja frecuencia.

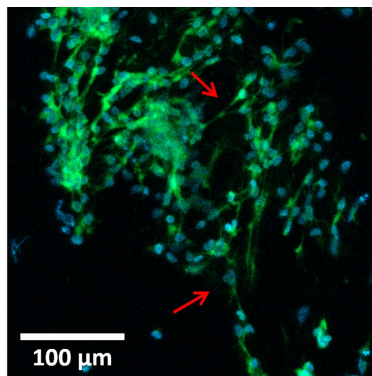


Figura 1. Neuronas diferenciadas en un hidrogel de grafeno conectadas entre sí gracias a la formación de neuritas.

Uno de los grandes peligros que enfrenta en la actualidad el ser humano es la expansión de la resistencia a los antimicrobianos. Por ello, la investigación de materiales que minimicen los riesgos de contaminación e infecciones resulta vital para la fabricación de prótesis y recubrimientos de equipamiento médico.

En este contexto, el capítulo 3 de la tesis se centra en el desarrollo de hidrogeles basados en el monómero de 2-vinil-4,6-diamino-1,3,5-triazina en los cuales se han incorporado dos materiales bidimensionales diferentes (disulfuro de molibdeno y nitruro de boro hexagonal) además de nanopartículas de magnetita. La buena capacidad antimicrobiana que estos nanomateriales han demostrado poseer por sí solos, ocasiona que su inclusión en estructuras como los hidrogeles de lugar a soportes resistentes al crecimiento de ciertos microorganismos. Además, al quedar atrapados en la matriz, se minimizan los riesgos derivados de su uso. Mediante ensayos de difusión en agar con distintas bacterias y levaduras, se ha confirmado que los soportes híbridos sintetizados poseen capacidad antimicrobiana selectiva (Figura 2). Estos resultados son prometedores y abren la puerta a futuros estudios centrados en los efectos fototérmico y de hipertermia, los cuales podrían mejorar su rendimiento gracias a la presencia de los nanomateriales embebidos en la estructura.

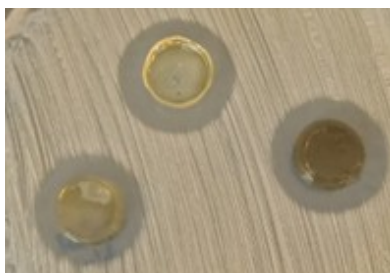


Figura 2. Ejemplo del efecto antimicrobiano de distintos hidrogeles frente a la levadura *Zygosaccharomyces rouxii*.

Finalmente, en el capítulo 4 se recoge el trabajo elaborado durante la estancia predoctoral en la universidad de Aveiro. El objetivo del proyecto en el que se enmarcó esta estancia era introducir células y micropartículas poliméricas en el interior de microcápsulas líquidas de forma que el conjunto actuase como sistema de cultivo tridimensional. Además, las propiedades mecánicas modulables de las micropartículas permitirían dirigir la diferenciación de las células hacia diferentes tipos de líneas celulares. Con este fin, durante este periodo, el trabajo consistió en la optimización de los procesos de síntesis de las micropartículas para cada uno de los materiales utilizados, de forma que su tamaño y morfología se adecuasen a los requisitos del grupo de investigación.

Por tanto, esta tesis engloba un trabajo multidisciplinar en el que se han desarrollado soportes tridimensionales de diversa naturaleza, combinados en algunos casos con nanomateriales, empleando distintos métodos de síntesis. En todos los casos, los materiales resultantes dejan patente su gran potencial, presentando aplicaciones muy variadas en diferentes áreas relacionadas con la ingeniería de tejidos.

## Diseño de nuevos materiales blandos con aplicación en el campo de la robótica.

**Francisco Javier Patiño Rodrigo**

El pasado 22 de julio de 2025 tuvo lugar la defensa de la Tesis Doctoral de D. Francisco Javier Patiño Rodrigo titulada “Diseño de nuevos materiales blandos con aplicación en el campo de la robótica”. Esta tesis ha sido desarrollada en el Departamento de Inorgánica, Orgánica y Bioquímica, bajo la supervisión de las catedráticas D<sup>a</sup>. Ester Vázquez Fernández-Pacheco y D<sup>a</sup>. María Antonia Herrero Chamorro. Dicho acto de defensa concluyó con la calificación sobresaliente *cum laude* por parte del tribunal, siendo los miembros constituyentes del mismo D. Manuel Andrés Rodrigo Rodrigo de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) como Presidente, D<sup>a</sup>. María de las Nieves López-Salas de la universidad de Paderborn como Vocal y D<sup>a</sup>. Marisol Martín González del Consejo Superior de Investigaciones Científicas (CSIC) como Secretaria. A continuación, se presenta un breve resumen sobre el trabajo desarrollado en esta tesis:

Los robots tradicionales suelen estar fabricados de materiales rígidos y pesados como los metales, pudiendo encarnar peligros a la hora de trabajar junto a humanos, con la posibilidad de causar lesiones graves o incluso la muerte. Como alternativa surge la robótica blanda, un nuevo campo de investigación dentro del ámbito de la robótica que ha experimentado un gran crecimiento en los últimos años. Esta nueva área de estudio se centra en el uso de materiales blandos y deformables con el fin de facilitar las interacciones humano-robot, minimizando significativamente el riesgo para las personas.

Los materiales más comúnmente utilizados engloban siliconas, gomas y otros elastómeros. Sin embargo, los materiales inteligentes, aquellos capaces de responder a un estímulo externo tales como luz, campo eléctrico o temperatura, están recibiendo cada vez mayor atención por parte de los investigadores. Dentro de este grupo podemos encontrar a los hidrogeles, materiales poliméricos tridimensionales capaces de absorber grandes cantidades de agua manteniendo su estructura (Fig. 1). Debido a su gran contenido en agua, en muchos casos superior al 90%, presentan una elevada biocompatibilidad y un notable grado de biomimetismo. Otras propiedades incluyen respuesta a diferentes estímulos y capacidad de autocuración al recibir daños.

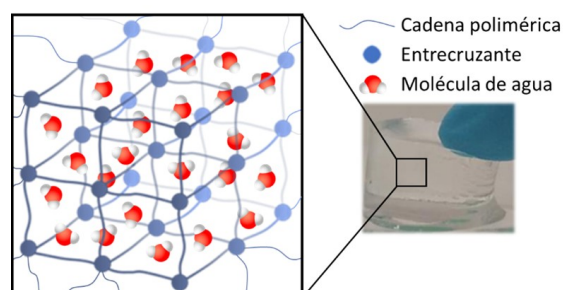


Figura 1: Estructura típica de un hidrogel.

En esta tesis se busca el desarrollo de nuevos materiales con aplicación en robótica blanda. Este trabajo se cimenta sobre la experiencia previa del grupo de investigación en este campo, y explora soluciones en tres líneas de investigación diferentes: materiales con autocuración, materiales con respuesta a estímulos eléctricos y materiales conductores de la electricidad deformables.

El trabajo comienza aportando una visión global del campo de la robótica blanda, repasando los materiales más utilizados. A continuación, cada capítulo está destinado a una de las líneas de investigación, comenzando por un repaso del estado del arte, así como del trabajo previo del grupo en dicha área.

En el campo de los materiales con autocuración, se comienza estudiando el mecanismo de autocuración del material previamente preparado por el grupo de investigación. Una vez conocido, se aplican diversas estrategias para mejorar dicha capacidad curativa sin afectar a sus propiedades mecánicas, llegando a duplicar la eficiencia de curación del material inicial (Fig. 2).

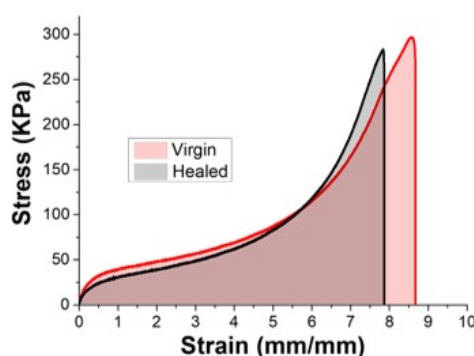


Figura 2: Comparación entre un material virgen y otro curado durante 24 en un ensayo de tensión-deformación.

Respecto a los materiales con respuesta a estímulos eléctricos, se aborda su desarrollo desde dos perspectivas distintas: la mejora de su velocidad de actuación y la mejora de sus propiedades mecánicas. A pesar de que a lo largo de este capítulo se desarrollan nuevos hidrogeles con respuesta eléctrica, determinar su mejoría con respecto al trabajo previo se ve obstaculizado por la inadecuación de los electrodos empleados, debido a su oxidación y baja adherencia durante la actuación (Fig. 3).



Figura 3: Hidrogel curvado ante estímulo eléctrico con electrodos dañados por la corriente.

Con el objetivo de encontrar unos electrodos adecuados comienza el último capítulo. Para que el electrodo sea apropiado debe cumplir una serie de requisitos tales como alta conductividad y resistencia REDOX, junto a gran deformabilidad y adherencia al actuador. Tras explorar un gran número de opciones, tales como metales líquidos, polímeros conductores y láminas metálicas, finalmente se encuentran unas telas conductoras que logran un equilibrio entre estas cuatro características. De este modo, se logra actuar los hidrogeles de forma efectiva, pudiendo demostrar que dos de los hidrogeles preparados en el capítulo anterior presentan una mejora considerable en su capacidad de actuación con respecto al material inicial (Fig. 4).

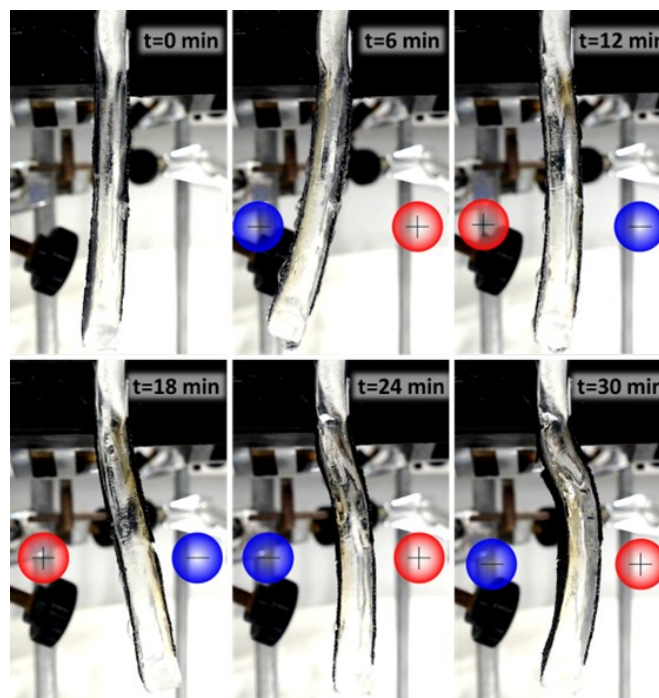


Figura 4: Hidrogel con respuesta a estímulos eléctricos usando electrodos adecuados.

Con este hallazgo concluye esta tesis doctoral, marcada por una fuerte interdisciplinaridad entre química, ciencia de materiales e ingeniería. Se ha explorado desde el diseño químico de los materiales hasta su aplicación, pasando por la caracterización mecánica y eléctrica, abriendo nuevas vías para continuar perfeccionando estos materiales en el futuro.

## **Design of 3D printed electrochemical gas-liquid reactors for sustainable processes.**

**Rafael Granados Fernández**

El pasado 22 de julio de 2025 tuvo lugar la defensa de la Tesis Doctoral de D. Rafael Granados Fernández, titulada “Design of 3D Printed Electrochemical Gas-Liquid Reactors for Sustainable Processes”. Esta tesis doctoral se ha desarrollado en el Laboratorio de Ingeniería Electroquímica y Ambiental (E3L), perteneciente al grupo TEQUIMA, del Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Castilla-La Mancha, y se incluye en el Programa de Doctorado en Ingeniería Química y Ambiental, regulado por el Real Decreto 99/2011. Además, Esta Tesis doctoral forma parte del proyecto “Nuevas Tecnologías de Electroabsorción para Aplicaciones Ambientales y Energéticas Más Sostenibles (NEAT4SUST+)” (PID2019-107271RB-I00), financiado por el Ministerio de Economía, Industria y Competitividad de España y la Unión Europea. El objetivo principal del proyecto es evaluar el tratamiento de corrientes gaseosas contaminadas con compuestos orgánicos volátiles (COVs) mediante tecnologías electroquímicas. Esto implica el desarrollo y la optimización de dispositivos innovadores capaces de procesar mezclas bifásicas gas-líquido, comúnmente conocidas como absorbedores asistidos electroquímicamente, electro-absorbedores o electro-lavadores.

En la primera parte de esta Tesis Doctoral, se enfocó en el desarrollo de una metodología para la fabricación de celdas electroquímicas personalizadas, aprovechando las ventajas de la tecnología de impresión 3D. Se lleva a cabo un estudio de un caso completo sobre una celda de absorción asistida electroquímicamente sin membrana, diseñada para la eliminación de compuestos orgánicos volátiles (COVs), abordando todas las etapas necesarias de la fabricación del prototipo, incluyendo la conceptualización, el diseño químico y mecánico, la impresión 3D, la verificación del proceso y la estimación de costes. Se evalúan múltiples conceptos con el fin de unificar en un mismo dispositivo la columna de absorción con la celda electroquímica. Cada una de estas etapas abarca múltiples subetapas, incluyendo un análisis DAFO junto con un análisis de viabilidad para decidir la mejor opción a desarrollar.

Durante la fase de impresión, se realizó un análisis de los materiales disponibles para determinar sus propiedades clave, compatibilidad con los COVs, condiciones de operación (básicas / ácidas) y la tecnología de impresión 3D más adecuada para desarrollar los conceptos propuestos. El material utilizado es una resina inerte resistente a compuestos orgánicos volátiles, estableciéndose la estereolitografía (SLA) como la técnica de impresión 3D más adecuada. Se evalúa la fluido dinámica a diferentes caudales en fase líquida, junto con una evaluación de los coeficientes de transferencia de masa bajo las condiciones operativas. Se eligió al benceno como el COV representativo para todos los casos estudiados en esta tesis. El primer prototipo fue equipado con un ánodo de diamante dopado con boro (BDD) y un cátodo de titanio, demostrando un rendimiento eficiente. Si bien un aumento en la densidad de corriente incrementa la producción de oxidantes en el sistema, esto no mejora la eficiencia en la degradación del benceno. De hecho, la máxima tasa de degradación, del 65.2 %, a una densidad de corriente de 50 mA cm<sup>-2</sup>.

Para el segundo prototipo, una nueva unidad personalizada de electro-absorción con un electrodo de difusión de gases como cátodo fue desarrollada. El núcleo de este capítulo se centra en la integración de un electrodo de difusión de gas que actúa como sustrato catódico, cumpliendo una doble función: la dispersión directa del gas y la superficie electrocatalítica para la generación de  $\text{H}_2\text{O}_2$  mediante la reacción de reducción de oxígeno. El electrodo de difusión de gas catódico se fabrica mediante un método de prensado en caliente, mientras que el ánodo, en este caso, consiste en una malla de titanio recubierta con óxidos metálicos mixtos, con la composición específica  $\text{Ti}/(\text{RuO}_2)_{0.8}(\text{Sb}_2\text{O}_4)_{0.2}$ . Un desafío clave en el diseño fue el análisis comparativo de dos configuraciones diferentes para alojar el electrodo de difusión de gas, con el objetivo de optimizar la conductividad electrónica y la dispersión del gas, minimizando la distribución del diámetro de las burbujas. El sistema logró implementar con éxito un cátodo de electrodo de difusión de gas para el tratamiento de corrientes gaseosas contaminadas con compuestos orgánicos volátiles. Para validar la capacidad del prototipo en la eliminación de COVs, se realizaron pruebas iniciales de rendimiento que demostraron una degradación del 33 % de benceno con una corriente de gas contaminado de  $100 \text{ mL min}^{-1}$  a una densidad de corriente de  $50 \text{ mA cm}^{-2}$ .

Para el tercer prototipo, se exploró una nueva alternativa: un absorbedor asistido electroquímicamente con un ensamblaje electrodo-membrana (MEA, por sus siglas en inglés). Al igual que en los casos anteriores, se utilizó la tecnología de impresión 3D junto con la metodología integral desarrollada. El sistema MEA fue implementado con éxito en el dispositivo. Este electro-absorbedor está equipado con un ánodo de malla de diamante dopado con boro (BDD), un cátodo de malla de titanio y una membrana Nafion® 117. La tecnología MEA permite el uso de absorbentes con bajas concentraciones de sal. Durante la operación, se producen especies oxidantes reactivas en los electrodos, las cuales se dispersan tanto en la fase líquida como en la gaseosa, siendo el ozono el oxidante predominante en la fase gaseosa. La validación de la eliminación de COVs se llevó a cabo a diferentes densidades de corriente, observándose una degradación máxima del 50.6 % a  $50 \text{ mA cm}^{-2}$  con un caudal de gas de  $50 \text{ mL min}^{-1}$ .

Tras evaluar las diferentes alternativas desarrolladas para el tratamiento de COVs mediante la tecnología de absorbedores asistidos electroquímicamente en una única unidad, y considerando que el Nivel de Madurez Tecnológica (TRL, por sus siglas en inglés) de esta tecnología aún es muy bajo, el escalado de reactores electroquímicos es clave para la transición de tecnologías a escala de laboratorio hacia aplicaciones industriales. Aunque la absorción asistida electroquímicamente ha demostrado ser altamente eficiente para la remediación de gases contaminados con COVs, su escalabilidad aún no se ha explorado completamente, siendo necesario determinar las condiciones óptimas de operación para mantener altas tasas de eliminación y eficiencia energética.

Por tanto, la última parte de la tesis se evaluó el escalado del prototipo desarrollado con un ensamblaje electrodo-membrana. La ampliación fue desde un área anódica de 4.3 cm<sup>2</sup> a 50.4 cm<sup>2</sup>. Este valor se utilizó como unidad funcional para calcular el volumen de electrolito y el caudal de gas en el sistema escalado. Se llevó a cabo un análisis integral de la dinámica de fluidos del dispositivo, tanto en la columna de absorción como en la celda electroquímica, utilizando visualización fotográfica mediante la introducción de un pulso de tinta negra en el sistema, así como simulaciones CFD (Dinámica de Fluidos Computacional por sus siglas en inglés). Además, al igual que en los casos anteriores, se evaluó la transferencia de masa mediante el método de corriente límite. El benceno fue utilizado como modelo de COVs para evaluar su eliminación a diferentes densidades de corriente (25, 50, 100, 150 mA cm<sup>-2</sup>). Los resultados muestran que esta tecnología permite maximizar el uso de los oxidantes generados electroquímicamente. La eficiencia máxima de eliminación, cercana al 60 %, se alcanzó operando a 50 mA cm<sup>-2</sup> con un flujo de gas de 100 mL min<sup>-1</sup>. Además, se evaluaron los impactos ambientales y en la salud de la tecnología de electro-absorción integrando la regeneración electroquímica del carbón activado para la eliminación de benceno en ambientes interiores. Se compararon dos escenarios de tratamiento: (1) purificación indirecta mediante el uso de carbón activado regenerado electroquímicamente, y (2) tratamiento directo de la corriente gaseosa mediante celdas electroquímicas que combinan electro-absorción, adsorción y regeneración *in situ* del carbón activado. La evaluación se realizó mediante un Análisis de Ciclo de Vida (ACV), considerando categorías clave de impacto como toxicidad humana, potencial de calentamiento global, ecotoxicidad acuática y uso de recursos.

Los resultados de esta Tesis confirman la eficacia de la tecnología de absorbedores asistidos electroquímicamente para la eliminación de compuestos orgánicos volátiles, habiéndose alcanzado con éxito todos los objetivos establecidos. El absorbedor asistido electroquímicamente con configuración MEA fue seleccionado como el mejor prototipo desarrollado para la eliminación de COV en corrientes gaseosas. No obstante, el elevado coste de algunos materiales utilizados, como la membrana o el uso de BDD como ánodo, debe tenerse en cuenta si se pretende escalar la producción en masa de este tipo de tecnología a nivel industrial.



**Autor/Doctorando:** Rafael Granados Fernández

**Directores:** Justo Lobato Bajo y Carmen M<sup>a</sup> Fernández-Marchante

**Presidente:** D<sup>a</sup>. AURORA SANTOS LÓPEZ

**Secretaria:** D<sup>a</sup>. ENGRACIA LACASA FERNÁNDEZ

**Vocal:** D. LUIS FERNANDO LEÓN FERNÁNDEZ

## From bench to bedside: Preclinical studies of novel approaches to cancer treatment.

**Almudena del Campo Balguerías**

En primer lugar, como farmacéutica, he aprovechado la experiencia en Química desarrollada dentro de mi grupo de investigación, aplicándola al ámbito de las ciencias de la salud. Esta integración de la química y las ciencias de la salud ha sido fundamental para el desarrollo de esta tesis doctoral, cuyo contenido, por su amplitud y carácter multidisciplinar, se ha estructurado en dos capítulos principales.

El primer capítulo se centra en la molécula de guanidina, un andamiaje químico versátil que se exploró como base para el diseño de nuevas estrategias terapéuticas y aplicaciones biomédicas. En este contexto, se sintetizó con éxito una serie de fenil-guanidinas en altos rendimientos, identificándose el compuesto ACB3 como líder de la serie gracias a su destacada actividad antitumoral. Los estudios biológicos demostraron que ACB3 era capaz de inducir apoptosis, detener el ciclo celular y reducir tanto la adhesión como la capacidad clonogénica en diversos tumores sólidos, confirmando así el potencial de las guanidinas como agentes oncológicos.

Posteriormente, estas moléculas se utilizaron como ligandos en el desarrollo de metalofármacos de rutenio, obteniéndose una nueva familia de compuestos entre los que destacaron RuG3 y RuG8, que mostraron potentes efectos antiproliferativos y excelente tolerancia *in vivo*. Estos resultados los posicionan como alternativas prometedoras a la quimioterapia convencional basada en compuestos de platino. Además, la guanidina CS3 se evaluó como nanotermómetro fluorescente, mostrando gran sensibilidad en células vivas, y ACB13 reveló una potente actividad antimicrobiana frente a cepas resistentes de *Staphylococcus aureus*, lo que abre nuevas perspectivas para el diseño de agentes antiinfecciosos.

Los resultados obtenidos en el primer capítulo de esta tesis demuestran la importancia, versatilidad y utilidad de las moléculas basadas en guanidina en aplicaciones relacionadas con la salud.

El segundo capítulo aborda el papel de la nanotecnología en el tratamiento del carcinoma escamoso de cabeza y cuello (HNSCC). Para ello, se desarrollaron diferentes plataformas de nanopartículas poliméricas y lipídicas destinadas a la administración de los fármacos Alpelisib y Cisplatino, ambos de amplio uso en oncología. Los estudios *in vitro* demostraron que la encapsulación de estos agentes terapéuticos mejoraba su eficacia antitumoral al potenciar su actividad antiproliferativa y reducir los efectos adversos asociados al fármaco libre.

Un aspecto clave de este capítulo fue el diseño de sistemas de direccionamiento activo mediante la conjugación de las nanopartículas con el anticuerpo monoclonal Cetuximab, ampliamente utilizado en clínica para el tratamiento de tumores de cabeza y cuello por su capacidad de reconocer y unirse específicamente al receptor EGFR, sobreexpresado en este tipo de cáncer. La incorporación de Cetuximab permitió transformar las formulaciones pasivas en nanomedicinas capaces de reconocer selectivamente las células tumorales. Los ensayos *in vivo* confirmaron que estas nanopartículas conjugadas con Cetuximab mejoraban significativamente la captación celular y la acumulación tumoral en comparación con sus equivalentes no dirigidos.

Por tanto, los resultados obtenidos en este segundo capítulo demuestran que el desarrollo de diversas nanopartículas de direccionamiento activo mejora la acumulación tumoral, sentando las bases para el desarrollo de nuevas terapias basadas en la nanotecnología que aumenten la especificidad y eficacia de los tratamientos actuales para esta enfermedad.

En la Secretaría General de la Universidad, ha sido depositada el día 17 de junio de 2025 la Tesis Doctoral: **FROM BENCH TO BEDSIDE: PRECLINICAL STUDIES OF NOVEL APPROACHES TO CANCER TREATMENT** de la que es autor **D<sup>a</sup>. Almudena del Campo Balguerías**, dirigida por los **Directores**.

CARLOS ALONSO MORENO  
IVÁN BRAVO PÉREZ

La tesis fue defendida en la Facultad de Farmacia el día 17 de julio de 2025 y el tribunal que juzgó dicha tesis estaba formado por:

**Presidente:** Dra. ELENA JIMÉNEZ MARTÍNEZ de la Universidad de Castilla-La Mancha

**Secretario:** Dr. GUSTAVO ADOLFO ESPINO ORDOÑEZ de la Universidad de Burgos

**Vocal:** Dr. PEDRO BAPTISTA de la Universidade Nova de Lisboa



## **Adolphe Merkle Institute (AMI), Fribourg, Suiza. Elena Briñas Gutiérrez.**

Mi nombre es Elena Briñas Gutiérrez, soy estudiante predoctoral en la Universidad de Castilla la Mancha. Realizo una tesis codirigida entre los grupos MSOC-NanoChemistry y Analytical Nano Group en la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas y en el Instituto Regional de Investigación Científica Aplicada (IRICA).

Durante 4 meses, desde abril hasta finales de julio de 2024, he realizado una estancia en el Adolphe Merkle Institute (AMI) de la Universidad de Fribourg (Suiza), en el grupo de investigación BioNanomaterials. He realizado esta estancia bajo la supervisión de Patricia Taladriz líder del proyecto “Nanoplastic Analytics”.

Mi proyecto de tesis está centrado en el desarrollo de sustratos SERS basados en diferentes nanomateriales para la detección de otros nanomateriales que puedan resultar nuevos contaminantes emergentes. Mis primeras investigaciones se centraron en el desarrollo de metodologías que nos permitieran medir grafeno y otros derivados en agua. Sin embargo, durante mi estancia en AMI, mi objetivo fue la detección de sub-micro y nanoplasticos en agua gracias al uso del grafeno. Además, durante este periodo he podido utilizar técnicas avanzadas como SEM, TEM, DLS, NTA y espectroscopía Raman, lo que me ha permitido ampliar mi formación y adquirir nuevas destrezas.

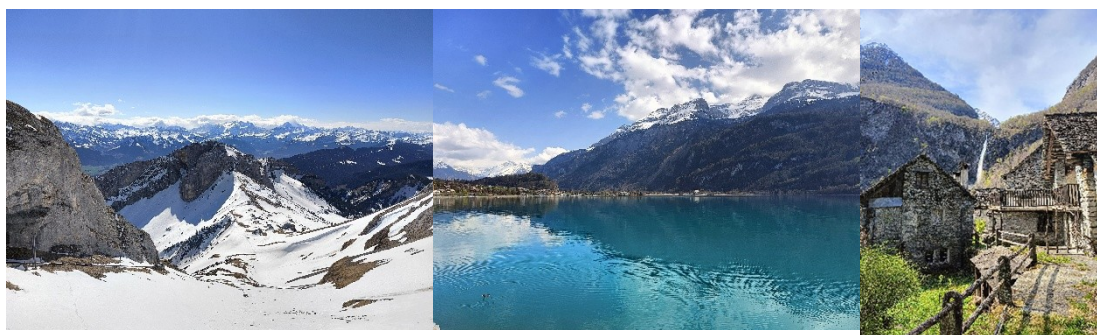
Más allá de los buenos resultados, esta estancia ha sido un aprendizaje vital en todos los sentidos. Desde el primer día me encontré con compañeros maravillosos que me recibieron con los brazos abiertos y me hicieron sentir parte del grupo. La diversidad cultural del equipo convirtió cada día en una oportunidad de aprender y compartir, y el uso del inglés como lengua común facilitó una integración total. Igualmente, Fribourg, con su encanto medieval y su ubicación en pleno corazón de Suiza, me ofreció un entorno único para vivir.



# ESTANCIAS

Durante estos meses no todo fue laboratorio: también tuve la oportunidad de viajar. Tuve la suerte de poder llevar mi propio coche, lo que me permitió no solo descubrir a fondo Suiza, con ciudades y cantones como Berna, Lucerna o Thun, sino también cruzar fronteras y visitar lugares cercanos. Recorrí la Selva Negra y me perdí por el Friburgo alemán; en Francia disfruté de la belleza de Carcasona y Colmar, e incluso tuve la oportunidad de contemplar de cerca el Mont Blanc; y en Italia conocí ciudades tan especiales como Florencia y Pisa.

En cuanto a la naturaleza, Suiza me dejó recuerdos inolvidables, con paisajes tan espectaculares que parecían sacados de una postal. El lago de Brienz me sorprendió por la intensidad de sus aguas turquesa, mientras que en Berna viví la experiencia única de bañarme en el río Aare. También ascendí al Monte Pilatus, con sus impresionantes vistas de los Alpes, y recorrí el valle de Lauterbrunnen, famoso por sus cascadas entre montañas verdes. Otro de los momentos más emocionantes fue visitar el Top of Europe, en Jungfraujoch, desde donde se aprecia la grandeza de los glaciares suizos. Y no puedo dejar de mencionar la región de Ticino, con sus paisajes donde los saltos de agua y las montañas se mezclan con un aire mediterráneo, mostrando otra cara distinta pero igualmente preciosa del país.



Para concluir, solo puedo agradecer a todas las personas que me han apoyado desde España a lo largo de esta gran experiencia, así como a todas las que conocí en Suiza y que hicieron de esta etapa algo tan especial. De cada una de ellas me llevo aprendizajes, recuerdos y amistades que guardaré siempre.

## Institut de Recherches sur la Catalyse et l'Environnement (IRCELYON-CNRS), Lyon, Francia. Clara Inés Alcolado Olivares.



Me llamo Clara Inés Alcolado Olivares y actualmente estoy realizando mi tesis doctoral en la Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas de la Universidad de Castilla-La Mancha (UCLM) y en el Instituto de Investigación en Combustión y Contaminación Atmosférica (ICCA), dentro del Departamento de Química Física y en el grupo FOTOAIR, bajo la dirección del Dr. Francisco Javier Poblete Martín, la Dra. Elena Jiménez Martínez y el Dr. Luis García Río.

Mi tesis doctoral se centra en el estudio cinético y mecanístico de los contaminantes de preocupación emergente, un conjunto de compuestos químicos de origen sintético o natural (como fármacos, aditivos alimentarios, cosméticos, entre otros) cuya presencia representa una amenaza para la salud humana y los ecosistemas. Estos compuestos se han detectado en aire, agua y suelos, y su eliminación constituye un gran reto. Ante este escenario, mi proyecto busca evaluar la degradación de estos contaminantes en fase acuosa y en fase gas, mediante procesos de oxidación avanzada y oxidantes naturales presentes en la atmósfera. En particular, se investiga la acción de radicales hidroxilo ( $\cdot\text{OH}$ ), dióxido de nitrógeno ( $\cdot\text{NO}_2$ ), peroxinitrito ( $\text{HOONO}/\text{OONO}$ ) y átomos de cloro ( $\cdot\text{Cl}$ ), oxidantes clave en la química medioambiental. Hoy en día, la reactividad en la interfase aire/agua no ha sido tan estudiada, y aún existe un campo de investigación inmenso en esta área.

Gracias a mi estancia predoctoral, pude ampliar este estudio en mayor profundidad trabajando en la interfase y en fase acuosa con el ácido salicílico, un antiinflamatorio no esteroideo ampliamente utilizado y representativo de los fármacos de uso común. La estancia la realicé durante tres meses (abril, mayo y junio) en el Institut de Recherches sur la Catalyse et l'Environnement (IRCELYON-CNRS) en Lyon, Francia, bajo la supervisión del Dr. Christian George y su equipo CARE (Catalytic and Atmospheric Reactivity for the Environment).

# ESTANCIAS

Inicialmente, analicé la degradación fotolítica del ácido salicílico mediante procesos de oxidación avanzada. Realicé un estudio cinético bajo irradiación UV, empleando sistemas oxidativos basados en  $\text{H}_2\text{O}_2/\text{UV}$  y  $\text{NO}_3^-/\text{UV}$ . Posteriormente, identifiqué y cuantifiqué los productos de oxidación mediante cromatografía líquida de ultra alta resolución acoplada a espectrometría de masas (UHPLC/MS). Para trabajar en la interfase aire/agua, diseñamos un sistema experimental innovador que permitió estudiar la oxidación espontánea del ácido salicílico. El montaje experimental permitió controlar la humedad relativa y nebulizar disoluciones de ácido salicílico dentro de un tubo de flujo, con el fin de identificar los productos de la oxidación mediante UHPLC/MS y analizar las partículas generadas con un SMPS (Scanning Mobility Particle Sizer). Los resultados pusieron de manifiesto la producción espontánea de radicales OH en la interfaz de gotas orgánicas en presencia de vapor de agua, esto constituye una vía de oxidación troposférica muy significativa. Por ello, la incorporación de este mecanismo en modelos atmosféricos permitirá una mejor evaluación de la capacidad oxidativa de la atmósfera y del impacto de los procesos multifásicos en la degradación de contaminantes.



Me despido de mi estancia predoctoral en Lyon, una ciudad que ya tiene un lugar en mi corazón. Ha sido una etapa llena de aprendizaje, crecimiento y un ambiente de trabajo increíble. Más allá de lo académico, me llevo la enorme suerte de haber creado un grupo de amigos entrañables en el laboratorio, con quienes he compartido actividades y momentos inolvidables. También he disfrutado de la ciudad al máximo: recorrí sus barrios históricos como el Vieux Lyon, me dejé llevar por el ambiente de sus calles, caminé junto a los ríos Saona y Ródano y descubrí rincones únicos. De todos ellos, mi lugar favorito siempre será la pasarela de Saint-Georges, roja y brillante sobre el río Saona, desde donde se contempla la majestuosa Basílica Notre-Dame de Fourvière dominando la colina, un paisaje que quedará grabado en mi memoria.

# ESTANCIAS



Y para cerrar, dos cosas que me gustaría compartir con vosotros, la primera, esta entrevista que me realizaron estando allí (Une étudiante influenceuse à Ircelyon - IRCELYON) y, por último, nada mejor que una cita de “El Principito”, obra de Antoine de Saint-Exupéry, originario de Lyon:

“Lo esencial es invisible a los ojos.”

## Fondazione Edmund Mach, San Michele All'Adige, Trento, Italia. Tania Paniagua Martínez.

¡Hola! Mi nombre es Tania, y soy estudiante predoctoral de tercer curso en el Doctorado en Química. En concreto, trabajo en el grupo de Enología y Productos Naturales dentro del área de Tecnología de los Alimentos. El pasado curso académico realicé mi estancia predoctoral durante los meses de Mayo-Julio en el grupo Metabolomics de la Fondazione Edmund Mach. Este centro de investigación se encuentra en un pequeño pueblo llamado San Michele All'Adige, en la provincia de Trento, Italia, y está formado por más de 20 grupos de investigación que tratan diferentes temas de biodiversidad, medio ambiente, alimentación y nutrición, biología computacional, etc., habiendo publicado en la actualidad cerca de 1000 artículos científicos. Sin embargo, y debido también en la zona en la que se encuentra, la mayor parte de esta investigación está destinada al campo de la enología. Centrándonos en el grupo Metabolomics, tuve el placer de trabajar bajo la supervisión de Urska Vrhovsek, la segunda investigadora más importante de toda la Fundación.

Durante los tres meses que duró mi estancia trabajé en el análisis lipídico y de aminoácidos de diferentes muestras de vino. El objetivo de estos análisis, además de aprender a manejar técnicas de UHPLC-MS/MS, las cuáles no disponemos en nuestros laboratorios, fue evaluar el comportamiento de diferentes levaduras no-Saccharomyces durante el proceso fermentativo. Esto nos ayudará a comprender cómo afecta la presencia de estas levaduras en vinificación a la calidad final del vino, ya que numerosos autores defienden la influencia directa del metabolismo lipídico y aminoacídico en la liberación de compuestos volátiles aromáticos. Además, tuve el placer de asistir junto con mis compañeros de laboratorio a dos congresos de investigación enológica que se celebraron en las ciudades de Verona y Bolzano, muy cerca de la Fundación. Ambas experiencias me permitieron conocer de primera mano el estado actual de la investigación enológica a nivel internacional, además de estrechar lazos con mis compañeros de estancia y crear contactos y amistades que espero que perduren a lo largo de mi carrera investigadora.



# ESTANCIAS

Pero no todo ha sido trabajo durante este tiempo... La provincia de Trento se encuentra dentro de la región Trentino-Alto Adige, una de las zonas más imponentes del norte de Italia debido a las famosas Dolomitas. Fue un placer enorme poder trabajar rodeada de tanta belleza natural y descubrir cada rincón de la región durante los fines de semana. Además, también pude disfrutar de algún que otro fin de semana de turismo en compañía de mi pareja y amigos, visitando ciudades como Milán, Verona o Bolonia.

En resumen, esta experiencia ha sido profundamente enriquecedora para mí, tanto en el plano científico como en el personal, y animo a todos los/las futuros/as investigadores/as que leéis esto a dar el paso, ¡os prometo que merece la pena!



## INGENIERÍA QUÍMICA

- J. Serrano-Jiménez, M.P. Caballero, A. Rodríguez-Gómez, A. de Lucas-Consuegra, P. Sánchez, A.R. de la Osa. Optimization of anodic catalysts with preferentially oriented Pt crystallites for ammonia electro-oxidation. *Catalysis Today*, 2025, 460, 115482.  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2025.115482>

- C. Martín, A.R. de la Osa, A. de Lucas-Consuegra, M. Pinzón, P. Sánchez. 2025. Highly active Ni-Co catalysts supported on TiCSiC for ammonia decomposition. *International Journal of Hydrogen Energy*, 174, 151371. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2025.151371>

- Rafael Granados-Fernández, Gerardine G. Botte, Carmen M. Fernández-Marchante, Justo Lobato, Manuel A. Rodrigo. Integrating gas diffusion electrodes in electrochemically assisted gas-liquid absorbers. *Journal of Cleaner Production*, 522, 146321, 2025  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2025.146321>

- Mahmoud M. Gomaa, Iñaki Requena, Rafael Granados-Fernández, Manuel A. Rodrigo, Justo Lobato. Optimizing flow configurations and membrane durability in chlor-alkali reversible electrochemical cells. *Journal of Energy Storage*, 126, 116949, 2025  
DOI: <https://doi.org/10.1016/j.est.2025.116949>

## QUÍMICA ORGÁNICA

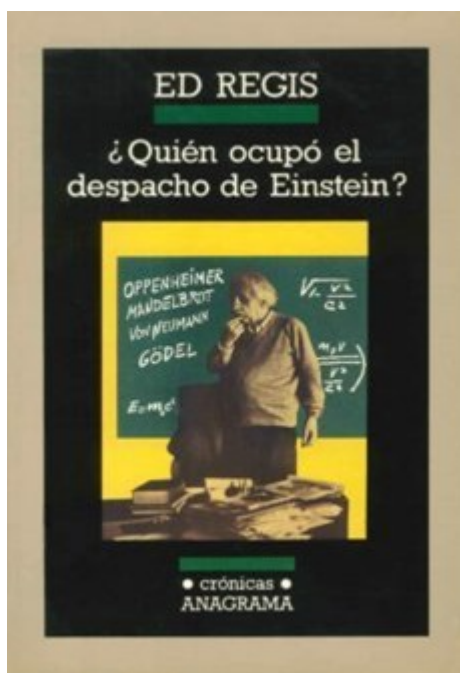
- A. Sánchez-Oliva, V. Montes-García, K. Li, K. Prenger, X. Guo, I. Janica, W. Kukułka, A. Tamayo, P. Prieto, P. Samori, V. Nicolosi, A. Ciesielski. "Surface Engineering of  $Ti_3C_2T_x$  MXenes via Silanol Functionalization for Improved Electrochemical Performance". *Small* 2025, e07744.  
DOI: <https://doi.org/10.1002/smll.202507744>

## QUÍMICA FÍSICA

- Alcolado, C. I., Jiménez, E., García-Río, L., & Pobleto, F. J. Aqueous-Phase Degradation Mechanism of Parabens, Emerging Contaminants, by Peroxynitrite. *ACS ES&T Water*, 2025, 5, 7, 4147-4155, DOI:<https://doi.org/10.1021/acsestwater.5c00362>

- Espinosa, S., Martínez, F., Antiñolo, M., Nielsen, O. J., & Jiménez, E. Updated global warming potentials of inhaled halogenated anesthetics, isoflurane and sevoflurane from new temperature dependent OH-kinetics. *Environmental Science: Processes & Impacts*, 2025, 27, 2410-2421.  
DOI:10.1039/d5em00061k

## ¿Quién ocupó el despacho de Einstein?



Ed Regis  
Editorial Anagrama S.A.U.

Sueldos millonarios, una adecuada y completa infraestructura, lugar de retiro y paz casi monacal, o lo que es lo mismo, el Instituto de Estudios Avanzados de Princeton. Un «hotel intelectual», el hogar por excelencia de la teoría, el paraíso del pensamiento en el cual sus ilustres miembros debían dedicarse sólo a pensar. Y nada más que a eso. Sin laboratorios, sin experimentos, sin soporte técnico, tan sólo lápiz y papel, tiza y pizarra. Con estas premisas singulares se procedió a partir del momento de su creación, en 1933, al fichaje de auténticos pesos pesados de la ciencia, desde Einstein y Gödel hasta Von Neumann, Podolsky, Rosen, Mandelbrot, Oppenheimer y muchos otros, y con ellos se dio paso a un período de florecimiento de sus diferentes disciplinas, todas ellas en voluntaria y voluntariosa confluencia hacia la apasionante Teoría del Todo, siempre al alcance de la mano y siempre inalcanzable.

En este libro inclasificable y fascinante, Ed Regis pasa revista a la historia del Instituto, también a la de sus logros —convirtiendo en asequibles y amenas las más complejas teorías—, pero, sobre todo, a la de sus hombres y las particulares maneras de ser de éstos. A sus manías que, como en el caso de Gödel, podían llevarlos incluso a la muerte, sus divertidas y sofisticadas bromas, su talla humana, en ocasiones gigantesca y admirable y en otras de un enanismo bochornoso. Pero, además, con su disección del universo cerrado y particular del Instituto de Estudios Avanzados —que durante su existencia ha llegado a contabilizar entre sus miembros a 14 premios Nobel—, Ed Regis, al margen de la historia y de la anécdota, y a veces valiéndose de ella, plantea asimismo un problema humano y filosófico: una realización ideal como el Instituto de Princeton, ¿constituye en realidad el sanctasanctórum de la ciencia y el pensamiento puro, la utopía soñada, el Cielo Platónico o, por el contrario, sus ilimitadas ventajas y su aislamiento del mundo han llegado a convertirlo en un cementerio de elefantes? La respuesta, en el despacho de Einstein.

## En el próximo número de Molécula...

El número de Octubre de MOLÉCULA recogerá las actividades de los meses de Septiembre y Octubre. Feliz comienzo del nuevo curso académico 2025/2026.

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