



BOLETÍN DE DIVULGACIÓN

Facultad de Ciencias Químicas. UCM



Diciembre, la Quimi-Navidad

Belén Yélamos

Vicedecana de Ordenación Académica, Biblioteca y
Divulgación

Terminamos 2023 con nuestro número especial de Navidad en el que cuatro profesores de la facultad nos hablan de la química que hay en Navidad.

Entre nuestras actividades de divulgación, se puede acceder al resumen de la Semana de la Ciencia de 2023 y al vídeo ganador del concurso de divulgación de vídeos científicos en el que se evalúa el riesgo tóxico del uso de envases alimentarios antimicrobianos.

Y seguimos repasando la investigación que se hace en la facultad con una relación de recientes publicaciones.

Terminamos deseándote una muy Feliz Navidad y esperando que el próximo año de nuevo esté lleno de actividades de divulgación para dar a conocer la Química. De momento, ya estamos preparando la celebración del **50 aniversario** de la creación de la Facultad de Ciencias Químicas.

iFeliz 2024!

EN ESTE NÚMERO

**LA QUÍMICA DE LA
NAVIDAD.....2**

**ACTIVIDADES DE
DIVULGACIÓN.....11**

**LA INVESTIGACIÓN EN LA
FACULTAD14**

**DIVULGAR PARA
EDUCAR.....17**



LA QUÍMICA DE LA NAVIDAD

¿DE QUÉ MATERIAL ESTÁ HECHA LA NAVIDAD?

Marta Mohedano Sánchez

Ud. Docente de Ciencia de Materiales e Ingeniería Metalúrgica
Dpto. Ingeniería Química y de Materiales

Aunque hay muchos símbolos carismáticos de esta época maravillosa, creo que hay uno que la representa en toda su grandeza y es el **Árbol de Navidad**. Se cuenta que el árbol original era un pino que, por ser perenne, simbolizaba el amor de Dios. Además, se adornaba con manzanas y velas que representaban las tentaciones y la luz respectivamente.

La verdad es que sería muy bonito tener un pino real dentro de mi casa, pero mi pequeño piso de Madrid creo que no está de acuerdo con esa idea. Afortunadamente, la evolución y el progreso de los materiales ha permitido el que podamos disfrutar en nuestros hogares de árboles artificiales muy dignos que nos duran de un año para otro y a los que sólo hay que limpiarle un poquito el polvo. El material que nos acompaña en nuestras casas y que recibe a sus pies los regalos no es nada más ni menos que un tipo de plástico denominado **policloruro de vinilo (PVC)**. Este polímero termoplástico se forma por la polimerización del monómero de cloruro de vinilo y se caracteriza por su capacidad de cambiar su forma física bajo la influencia del calor. Además, es el cuarto polímero más producido en el mundo, después del polietileno, el polipropileno y el poliestireno.

¿Y qué ha pasado con las manzanas y las velas que decoraban el árbol en sus orígenes? Pues que también han evolucionado y se han convertido en bolas de Navidad, guirnaldas y lucecitas. Los primeros adornos que superaron a las manzanas fueron de vidrio y hechos por primera vez en Lauscha, Alemania, por **Hans Greiner** (1550-1609), quien produjo guirnaldas de cuentas de vidrio y figuras de hojalata que podían ser colgadas en los árboles. Con los años los materiales de los adornos han progresado y hoy en día nos encontramos de vidrio soplado, metal, madera, plásticos soplados, poliestireno expandido o cerámica. Y bueno, seguro que has testado sin querer su resistencia al impacto porque más de un adornito se te habrá caído al suelo...una manera de comprobar que los plásticos tienen una resistencia al impacto mucho mayor que el vidrio o el cristal.

LA QUÍMICA DE LA NAVIDAD

Independiente del material que hayas elegido para montar tu Navidad, recuerda que Papá Noel o los Reyes Magos (no voy a entrar en debate) están siempre vigilando para que celebres una Navidad sostenible y no se te olviden las **3R: reducir, reutilizar y reciclar** en tus decoraciones. Si no lo cumples, ya sabes que habrá carbón de regalo...y no... no me refiero al diamante como alótropo del carbono, que por cierto... no sé qué pasa con ese alótropo en concreto que aunque siempre lo pongo en mi carta nunca me llega!.



LA QUÍMICA DE LA NAVIDAD

UN BRINDIS POR LA NAVIDAD

José L. Priego Bermejo
Dpto. Química Inorgánica

Seguramente sea la Navidad la época del año en la que más brindamos y solemos hacerlo con una copa de vino o cava. Cuando tratamos de averiguar que hace de especial a estas bebidas, quizá, en lo primero que pensamos sea en saber su composición. Sin embargo, su análisis nos puede alejar del romanticismo que envuelve a este producto milenario unido a nuestra cultura.

Aunque se estima que tiene cerca de 1.000 componentes, no debemos olvidar que el vino es fundamentalmente **agua**, 75-90%, y **etanol**, 10-22%. Seguramente no nos hemos parado a pensar en ello, pero en ese pequeño porcentaje que dejan estos dos compuestos está la diferencia entre tener un producto sublime o uno peleón. El tercer componente en cantidad es el **glicerol**, que se genera en la fermentación gliceropirúvica por la presencia de sulfitos. Su cantidad oscila entre los 5-10 g/l y aporta estructura, untuosidad y dulzor al vino. También hay otros alcoholes, por debajo del gramo/litro, como metanol, butanodiol o sorbitol.

Los **ácidos** que provienen de la uva son el **tartárico**, **málico** y **cítrico** y se encargan de aportar frescor al vino, así como ayudar a su conservación y crianza. La fermentación maloláctica permite, por acción de la bacteria *Oenococcus oeni*, transformar el ácido málico en láctico, que da suavidad y complejidad a su sabor. Además, están presentes otros ácidos, como el succínico o el acético, así como ésteres y aldehídos que juegan un papel fundamental en los aromas.

Las **sales** se encuentran en pequeña proporción en forma de **tartratos**, **cloruros**, **sulfitos**, **lactatos** o **fosfatos**, siendo las de potasio las más habituales, y dan salinidad y mineralidad. Mientras que el azúcar residual, excepto en vinos dulces o licorosos, es muy pequeño y suele estar en forma de fructosa.

LA QUÍMICA DE LA NAVIDAD

Los **polifenoles**, especialmente los **antocianos** y los **taninos**, influyen de manera relevante en las características organolépticas de los vinos. Las mayores concentraciones provienen de los hollejos y las pepitas y son los principales responsables del color, astringencia, cuerpo y aromas, así como de las diferencias entre tintos y blancos. Los taninos también se encuentran en las barricas y cuanto más tiempo pase el vino en ellas su evolución y complejidad será mayor. Un polifenol presente en el vino, pero en cantidades pequeñas para ser beneficioso para la salud, es el resveratrol, que como nos dice el Profesor Álvaro Martínez en el [Quimicalendario de Adviento](#), tiene propiedades antioxidantes y antiinflamatorias.

Los **terpenos**, como el **geraniol**, el **nerol** y el **linalool**, originan en muchos casos los aromas florales en el vino y, debido a su volatilidad, permiten identificar fácilmente notas de cata, como la rosa en los gewürztraminers o en los moscateles. Como comenta *Francois Chartier*, en su excelente libro “Papilas y Moléculas”, estos terpenos están presentes también en muchas hierbas aromáticas como el romero, lo que facilita su maridaje en recetas con este ingrediente. En cualquier caso, hay que tener en cuenta que el vino no debe considerarse un alimento del cuerpo, pero sí del alma.

Es muy probable que en estas fiestas muchos de nosotros tomemos cava, champagne o un espumoso, que se caracterizan en su elaboración por una segunda fermentación en botella, tras convertir el azúcar añadido en alcohol, para generar gas carbónico de manera endógena y natural. Un gas que no desaparece y que permanecerá como cualidad esencial del producto en forma de burbujas.

Para finalizar, si por lo que sea, en estas navidades vuestro *cuñao* se pone más pesado de lo habitual podéis entretenerle un rato preguntándole **¿cuántas burbujas tiene la copa de cava que estás tomando?** Tenéis la solución en este didáctico artículo de Gérard Liger-Belair en *J. Phys. Chem. B*, 2014, 118, 11, 3156-3163, de título “How Many Bubbles in Your Glass of Bubbly?”

LA QUÍMICA DE LA NAVIDAD

LOS FUEGOS ARTIFICIALES Y SU QUÍMICA

Eduardo Díez Alcántara

Dpto. Ingeniería Química y de Materiales

Llegan las navidades. Es tiempo de buenos momentos y celebraciones; y, claro, ¿quién no ha presenciado un espectáculo de fuegos artificiales en el cielo?, ¿quién no ha sonreído mientras observaba las caras absortas de los niños mirando un espectáculo de luz y colores en el firmamento? Pues resulta que si uno bucea entre los entresijos de un espectáculo de fuegos artificiales enseguida se da cuenta de que todo es una cuestión de química.

Pero comencemos por el principio: para que tenga lugar un espectáculo de fuegos artificiales, lo primero que se necesita es un elemento que impulse los propios fuegos hacia arriba; es lo que se conoce como **cohete pirotécnico**. Dicho cohete tiene dos compartimentos debidamente separados, con dos cargas explosivas diferenciadas, tal y como se observa en la *Figura 1b*. El primero de ellos tiene una pequeña abertura en forma de tobera en la parte inferior, que permite la salida de los gases resultantes de la explosión a gran velocidad de manera que, de acuerdo con la tercera ley de Newton (acción-reacción), el cohete es impulsado hacia arriba. En el segundo, se aloja otra carga explosiva, junto con sales de ciertos compuestos químicos de manera que, una vez el cohete se haya elevado, se produzca un fuerte estruendo y un estallido de colores en el cielo.



Figura 1. Espectáculo de fuegos artificiales (a), y esquema de un cohete pirotécnico (b)

LA QUÍMICA DE LA NAVIDAD

Pero ¿alguien ha dicho explosión? Si, claro, la explosión es una parte fundamental del espectáculo pirotécnico. Tradicionalmente, el explosivo utilizado en estos espectáculos fue la **pólvora negra**, que es una mezcla de carbón vegetal, azufre y nitrato de potasio, en proporciones del 15%, 10% y 75% en peso, respectivamente. En dicha pólvora, el carbón vegetal actúa como combustible (“la gasolina del cohete”), mientras que el nitrato actúa como agente oxidante aportando oxígeno, y el azufre estabiliza la reacción. Sin embargo, recientemente los maestros pirotécnicos han reemplazado el nitrato por el perclorato.

De esta manera, cuando mediante una mecha se inicia el proceso en la cámara inferior, tiene lugar una violenta reacción de oxidación-reducción (porque el perclorato tiene mucha tendencia a desprender átomos de oxígeno y el carbono mucha tendencia a captarlos). Los gases resultantes de esta reacción (a veces se añade un elemento propelente adicional), al salir a través del orificio en forma de tobera a gran velocidad, impulsan el cohete hacia arriba.

Bien, llegados a este punto ya tenemos el cohete rumbo al cielo. ¿Cómo se produce entonces el estruendo al que sigue una explosión de luz y color que ilumina el cielo? Para ello, a la carga explosiva situada en el segundo compartimento del cohete, se le añaden diferentes sales metálicas en función del color o colores que se quieran conseguir. El calor desprendido en la explosión excita a los electrones de los cationes metálicos hacia niveles de mayor energía. Como estos estados excitados son inestables, los electrones decaen rápidamente a su estado original emitiendo luz. En la *Figura 2* se muestra un esquema de sales metálicas usadas para cada color.



Figura 2. Compuestos responsables de cada color en los fuegos artificiales (adaptada de <https://www.compoundchem.com/2013/12/30/the-chemistry-of-fireworks/>)

LA QUÍMICA DE LA NAVIDAD

Pero entonces, ¿por qué resulta tan extraño observar el color azul dentro de los fuegos artificiales? La razón es que el **nitrate de cobre** es un compuesto que brilla con luz azul si se quema a baja temperatura, lo cual es extremadamente complicado de realizar. A temperaturas más elevadas, pierde su tonalidad y el brillo es blanco. Se podría usar cloruro de cobre en su lugar, pero en ese caso es preciso alcanzar los 1200 °C, temperatura a la cual dicha sal se descompone.

Ya estamos llegando al final y para terminar querría proponeros una adivinanza: ¿en qué se parece un espectáculo de fuegos artificiales a una tormenta? Vale, ya sé que ambas cosas suceden en el cielo, pero...la respuesta es que primero se escucha el ruido y luego viene la luz. La explicación viene dada por esta sencilla desigualdad: $300.000 \gg 340$. El primer valor representa la velocidad de la luz en el aire en m/s; el segundo, la del sonido. Ahí está la respuesta.



LA QUÍMICA DE LA NAVIDAD

NOCHEVIEJA, FIESTA, DIVERSIÓN...Y RESACA

Begoña Lavín Plaza
Dpto. Bioquímica y Biología Molecular

En estas fechas comenzamos a prepararnos para las próximas Navidades y con ellas llegan los propósitos de año nuevo, las reuniones familiares, las cenas de empresa y en muchos casos el consumo excesivo de bebidas alcohólicas y los efectos no deseados derivados de su ingesta. Pero ¿por qué las bebidas alcohólicas nos provocan desagradables efectos secundarios al final de la noche o al día siguiente? El principal compuesto responsable es el **etanol**, aunque también participan otros compuestos denominados **congéneres**. ¡Descubramos un poco más sobre ellos!

El etanol, también llamado alcohol etílico, es un compuesto orgánico, de la familia de los alcoholes, que se genera a partir de la fermentación de productos que presentan una elevada cantidad de azúcares. El etanol es una sustancia soluble en agua, lo que le permite acceder fácilmente al interior de las células pudiendo alterar sus funciones. A diferencia de los alimentos, que pueden tardar horas en digerirse, el etanol se absorbe rápidamente. Sin embargo, su metabolismo y eliminación es mucho más lenta y requiere de dos pasos que son realizados por las células del hígado. Primero, se produce una reacción metabólica catalizada por la enzima **alcohol deshidrogenasa**, produciéndose **acetaldehído**. El acetaldehído es un compuesto muy tóxico y además un conocido compuesto cancerígeno, por lo que es necesario eliminarlo rápidamente del cuerpo mediante una segunda reacción. El acetaldehído es metabolizado a **acetato** a través de una reacción catalizada por la enzima **aldehído deshidrogenasa**. Para poder llevar a cabo estas dos reacciones es necesario reducir el cofactor **Nicotinamida adenina nucleótido** (NAD) produciéndose una deficiencia de su forma oxidada (NAD⁺). Esta alteración puede resultar muy peligrosa, ya que el NAD⁺ es necesario para el correcto funcionamiento de rutas metabólicas tan importantes como la glucólisis, la β -oxidación de los ácidos grasos y el ciclo de Krebs; encargadas de producir la energía necesaria para que nuestras células funcionen correctamente.

Además, se produce la acumulación de otros intermediarios metabólicos como el lactato (a través de la fermentación láctica) o la generación de cuerpos cetónicos (al no poderse emplear el acetil-CoA en el ciclo de Krebs). La acumulación de todos estos compuestos ácidos puede provocar una acidosis sanguínea, cuyo principal síntoma es el dolor de cabeza, pero que en condiciones de ingesta de alcohol muy elevada puede producir la muerte.

LA QUÍMICA DE LA NAVIDAD

NOCHEVIEJA, FIESTA, DIVERSIÓN...Y RESACA

Begoña Lavín Plaza
Dpto. Bioquímica y Biología Molecular

Además, el etanol dificulta la transmisión del impulso nervioso, ya que es un compuesto depresor del sistema nervioso central. El etanol puede alterar diferentes sistemas de neurotransmisión como, por ejemplo, potenciando la acción del **ácido γ -aminobutírico** (GABA), principal neurotransmisor con acción inhibitoria estimulando la producción de su receptor GABA_A. Esto provoca un desbalance entre los neurotransmisores con acción excitatoria e inhibitoria que podrían explicar algunos de los efectos típicos derivados de la ingesta de alcohol como las alteraciones en la memoria, la falta de atención, los cambios de humor o la somnolencia.

Por último, pero no menos importante, debemos hablar de compuestos que se generan durante el proceso de producción de las bebidas alcohólicas y que reciben el nombre de **congéneres**. Estos compuestos, se han relacionado con la **resaca**, una de las consecuencias de la ingesta elevada de alcohol, aunque todavía es un proceso que no ha podido entenderse por completo. Como ejemplo de compuestos congéneres cabe destacar el **metanol** ya que se metaboliza en nuestro cuerpo a través de las mismas reacciones enzimáticas que el etanol. Sin embargo, a diferencia del etanol, su metabolismo produce **formaldehído** y **ácido fórmico**, ambos compuestos tóxicos. El metabolismo del metanol solo ocurre una vez que se ha procesado todo el etanol ya que las enzimas implicadas tienen mayor afinidad por etanol. La demora en la eliminación del metanol junto con los compuestos tóxicos derivados de su metabolismo se ha relacionado, en parte, con la dilación en la aparición de la resaca y sus consecuencias.

Estas son solo algunas de las alteraciones que experimentamos al tomar bebidas alcohólicas, por lo que, disfrutemos de las fiestas que se aproximan, pero seamos conscientes del esfuerzo al que sometemos a nuestro metabolismo y a nuestro cuerpo.



ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN

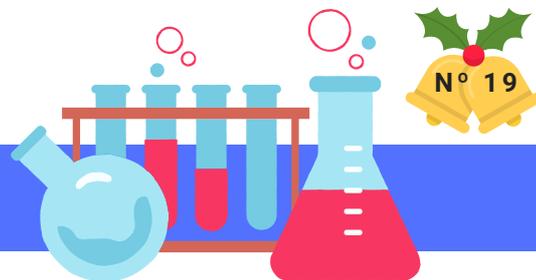
CALENDARIO DE ADVIENTO

Aunque ya estamos muy cerquita de la Navidad, aún puedes disfrutar del Quimicalendario de la Navidad. El profesor Álvaro Martínez del Pozo nos explica 24 moléculas relacionadas con la Navidad en 24 audios que recogen sus intervenciones en el programa de RNE "A hombros de gigantes", dirigido por Manuel Seara. Un espacio que se inició a raíz de la exposición "50 años, 50 moléculas" organizada por la Sociedad Española de Bioquímica y Biología Molecular (SEBBM).



Calendario de adviento 2023





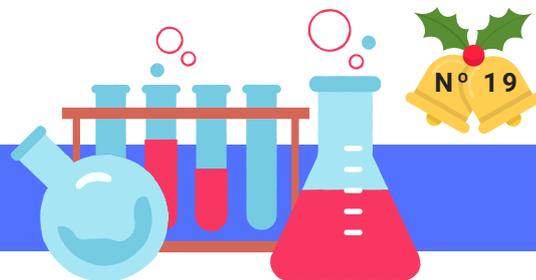
ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN

SEMANA DE LA CIENCIA Y LA INNOVACIÓN 2023

Del 6 al 19 de noviembre de 2023 se celebró en la Facultad de C.C. Químicas la XXIII edición de la Semana de la Ciencia. Se ofertaron más de veinte actividades con una gran asistencia. El resumen de todas ellas lo podéis encontrar en la [página web](#) de la Facultad. El gran éxito de esta edición se debe a los coordinadores y sus colaboradores.

¡Muchas gracias a todos y hasta la próxima edición!





ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN

CONCURSO DE DIVULGACIÓN CIENTÍFICA

Y hay ganador del concurso de divulgación científica organizado por la profesora **Esther Sánchez Tirado** y sus colaboradores/as David Abbasi Pérez, Sara García Linares, Marcos Larriba Martínez, Amparo Luna Costales, Sonia Mato Díaz y Jesús Prado Gonjal.



MIGUEL
KLAIBER
ABOITIZ



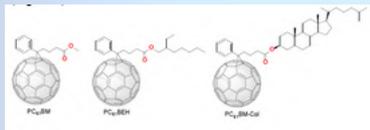
Evaluación del riesgo tóxico del uso de envases
alimentarios antimicrobianos



LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD

Hybrid Steroid-[60]Fullerene as n-Type Material for Organic Photovoltaics

Reinier Lemos, Yoana Perez-Badell, Orlando Ortiz, Luis Almagro, Hortensia Rodríguez, **María Ángeles Herranz**, Margarita Suarez, **Nazario Martin**

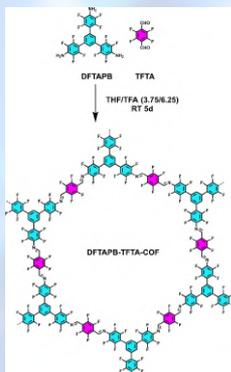


Eur. J. Org. Chem. 2023, e202300863
<https://doi.org/10.1002/ejoc.202300863>

Los derivados del fullereno se han utilizado como aceptores de electrones y materiales de transporte en fotovoltaica orgánica y en células solares de perovskita. Entre ellos, el éster metílico del ácido [6,6]-fenil-C₆₁butírico metiléster (PC61BM) ha sido uno de los más utilizados, en combinación con el poli-3-hexiltiofeno (P3HT) como polímero semiconductor donador de electrones, para la fabricación de células solares orgánicas (BHJ-OSC). En este trabajo se sintetizó un híbrido esteroide-fullereno mediante la reacción de Bingel-Hirsch para comparar sus propiedades con la estructura de referencia PC61BM.

Scalable Synthesis and Electrocatalytic Performance of Highly Fluorinated Covalent Organic Frameworks for Oxygen Reduction

Marcos Martínez-Fernández+, Emiliano Martínez-Periñán+, **Alejandro de la Peña Ruigómez**, Jorge J. Cabrera-Trujillo, Jorge A. R. Navarro, Fernando Aguilar-Galindo, David Rodríguez-San-Miguel, Mar Ramos, Rebecca Vismara,* Félix Zamora,* Encarnación Lorenzo,* **José L. Segura***

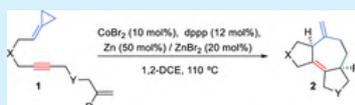


Angew. Chem. Int. Ed. 2023, e202313940
doi.org/10.1002/anie.202313940

En este estudio, presentamos un nuevo enfoque para la síntesis de marcos orgánicos covalentes (COFs) que resuelve las limitaciones comunes de los procedimientos solvotérmicos no escalables. Nuestro método permite la síntesis a temperatura ambiente de un DFTAPB-TFTA-COF altamente fluorado, que presenta hidrofobicidad intrínseca. Nuestros resultados arrojan luz sobre el potencial de los COFs fluorados como prometedoros electrocatalizadores para la reacción de reducción de oxígeno (ORR), así como sus posibles aplicaciones en otros campos.

Cobalt(I)-Catalyzed (3 + 2 + 2) Cycloaddition between Alkylidenecyclopropanes, Alkynes, and Alkenes

Eduardo Da Concepción, Carlos Lázaro-Milla, **Israel Fernández**, José L. Mascareñas*, and Fernando López*



Org. Lett. 2023, 25, 46, 8372–8376
<https://doi.org/10.1021/acscatal.3c04034>

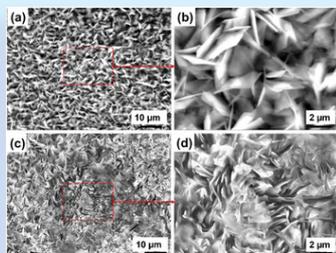
Se describe una dienilación altamente selectiva catalizada por Mn(I) de arenos y heteroarenos con alenos acetilados. La transformación descrita se lleva a cabo mediante un procedimiento sencillo de un solo paso y da lugar a 1,3-dienos lineales como productos individuales con alta estereoselectividad y regioselectividad total. Este protocolo puede aplicarse a una gran variedad de sustratos alénicos con diversos patrones de sustitución, pues se caracteriza por su amplia tolerancia a grupos funcionales y su utilidad a escala preparativa, mostrando una eficacia muy buena en la funcionalización en fase tardía de moléculas complejas valiosas. Además, la importancia sintética del método se pone de manifiesto por las diferentes derivatizaciones de los productos finales, que pueden presentar interesantes propiedades de fluorescencia.



LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD

Development of superhydrophobic layered double hydroxide directly on zinc substrate: structural and corrosion resistance properties

Muhammad Ahsan Iqbal, Humaira Asghar, Marta Mohedano, Michele Fedel

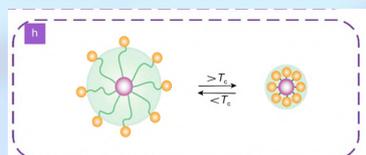
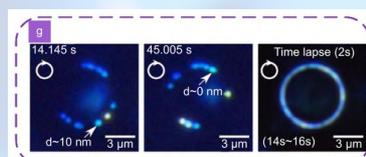


Bulletin of Materials Science volume 46, 215, 2023
<https://doi.org/10.1007/s12034-023-03055-6>

Este estudio tiene como objetivo estudiar la funcionalización de la superficie de zinc metálico con el desarrollo de hidróxidos dobles estratificados (LDHs) y su posterior modificación para desarrollar una película delgada superhidrófoba de LDHs. Se analiza la influencia de los LDH protectores sobre las propiedades físico-electroquímicas y el estado químico de la superficie frente a diferentes reactivos (NaOH, NaCl, solución ácida) para obtener características de autolimpieza. La investigación demuestra que la protección activa y pasiva de la película de conversión LDH contra las especies electrolíticas produce una mejora sustancial de las propiedades de resistencia a la corrosión.

Optical trapping of optical nanoparticles: Fundamentals and applications

Fengchan Zhang, Pablo Camarero, Patricia Haro-González, Lucía Labrador-Páez, Daniel Jaque

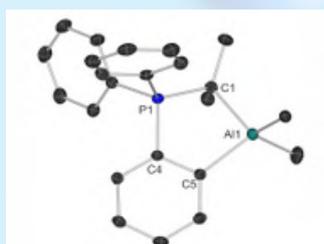


Opto-Electron Sci 2, 230019 (2023)
[doi: 10.29026/oes.2023.230019](https://doi.org/10.29026/oes.2023.230019)

Las nanopartículas ópticas son hoy en día uno de los elementos clave de la fotónica. No sólo permiten obtener imágenes ópticas de una plétora de sistemas (desde células hasta microelectrónica), sino que, en muchos casos, se comportan también como sensores remotos de alta sensibilidad. En los últimos años, se ha demostrado el éxito de las pinzas ópticas a la hora de aislar y manipular nanopartículas ópticas individuales. En un campo de tan rápido crecimiento como éste, es necesario resumir lo que se ha conseguido hasta ahora para identificar el sistema y la configuración experimental adecuados para cada aplicación. En este artículo de revisión resumimos los resultados más relevantes en el campo de la captura óptica de nanopartículas ópticas individuales.

Quo Vadis CO₂ activation: Catalytic Reduction of CO₂ to Methanol Using Aluminum and Gallium/Carbon-based Ambiphiles

Felix Krämer, Jan Paradies, Israel Fernández, Frank Breher



Chem. Eur. J. 2023, e202303380
<https://doi.org/10.1002/chem.202303380>

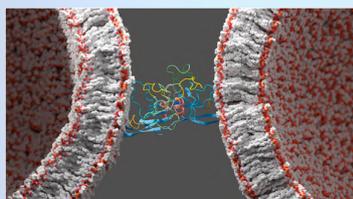
Presentamos los denominados "FLP ocultos" ($F_{\frac{1}{2}}P$: par de Lewis frustrado) que consisten en un yloro de fósforo que presenta un fragmento del grupo 13 en la posición orto de un andamiaje de anillo de fenilo para formar estructuras de anillo de cinco miembros. Sorprendentemente, el 0,3-3,0 mol% de los ambifilos basados en aluminio y galio/carbono descritos catalizan la reducción de CO_2 a metanol con una selectividad y unos rendimientos satisfactorios utilizando borano de pinacol como equivalente estequiométrico de reducción. Estudios computacionales exhaustivos proporcionaron valiosos conocimientos mecanísticos y arrojaron más luz sobre las diferencias de actividad.



LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD

The interaction of the ribotoxin α -sarcin with complex model lipid vesicles

Carmen García-Montoya, Sara García-Linares, Diego Heras-Márquez, Manca Majnik, Diego Laxalde-Fernández, Rafael Amigot-Sánchez, Álvaro Martínez-del-Pozo, Juan Palacios-Ortega

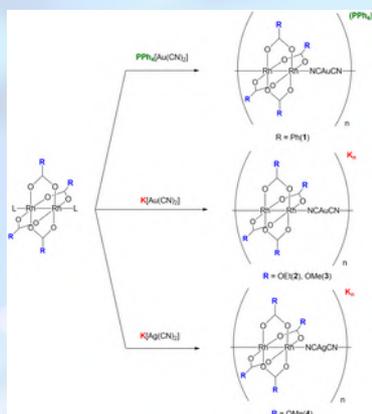


Archives of Biochemistry and Biophysics
(2024), 751, 109836
<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003986123003351>

Las ribotoxinas fúngicas son RNAsas extracelulares que inactivan los ribosomas cortando un único enlace fosfodiéster en el bucle sarcina-ricina universalmente conservado del ARNr grande. Sin embargo, para llegar a los ribosomas, tienen que atravesar la membrana plasmática. Es ahí donde estas toxinas muestran su especificidad celular, siendo especialmente activas contra células tumorales o infectadas por virus. En este artículo se utilizó α -sarcina de tipo salvaje para evaluar su interacción con una variedad de membranas no ensayadas antes, que se asemejan mucho más a las membranas celulares de mamíferos. Los resultados confirman que la α -sarcina es especialmente sensible a la densidad de carga en la superficie de la vesícula. Su capacidad para inducir la agregación de las vesículas depende en gran medida del grupo de cabeza de los lípidos y del grado de saturación de las cadenas de ácidos grasos. De hecho, la longitud de la cadena acilo es especialmente importante para la mezcla de lípidos. Por último, el colesterol desempeña un papel importante en la dilución de la concentración de cargas negativas disponibles y modula la capacidad de la α -sarcina para atravesar la membrana.

Anionic Polymers Formed by Dinuclear Rhodium Units and 1 Dicyanide Silver/Gold Moieties

Laura Abad Galán, Paula Cruz, Estefanía Fernández-Bartolomé, Miguel Cortijo, Patricia Delgado-Martínez, Rodrigo González-Prieto, José L. Priego, Reyes Jiménez-Aparicio

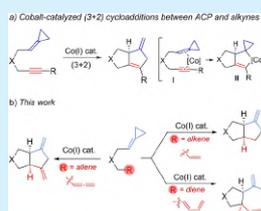


ChemRxiv Home (2023)
[10.26434/chemrxiv-2023-sjdp](https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2023-sjdp)

La síntesis, caracterización y determinación estructural de cuatro complejos de fórmula $(PPh_3)_4[Rh_2(\mu-O)_2 CPh_4 Au(CN)_2]_n$ (1) y $K_n[Rh_2(\mu-O)_2 CR_4 M(CN)_4]_n$ ($M = Au, R = OEt$ (2), OMe (3); $M = Ag, R = OMe$ (4)). En todos los casos, el grupo $[CN-M-CN]^-$ ($M = Au, Ag$) puentea las posiciones axiales de las unidades de dirodio dando lugar a cadenas unidimensionales. El empaquetamiento de las cadenas en estado sólido depende de la naturaleza del grupo carboxilato de la unidad dimetálica, del contraión presente en el complejo y del propio metal. El cambio más llamativo se observa en el complejo 3, $[Rh_2(\mu-O)_2 CCH_2 OMe_4 Au(CN)_2]_n$ (3) donde las cadenas se colocan perpendiculares entre sí con una distancia $Au \cdots Au$ entre cadenas de 2,963 Å. Los estudios de emisión de este complejo al excitarlo a 350 nm muestran una clara banda de emisión ancha centrada en 430 nm, mientras que no se observa luminiscencia para los otros compuestos. La aparición de propiedades de emisión sólo en el caso del complejo 3 puede explicarse por sus cortas interacciones aurófilas.

Cobalt-Catalyzed Intramolecular Cycloadditions of Alkenylenecyclopropanes with Alkenes and Dienes

Eduardo da Concepción, **Israel Fernández**, José L. Mascareñas, Fernando López



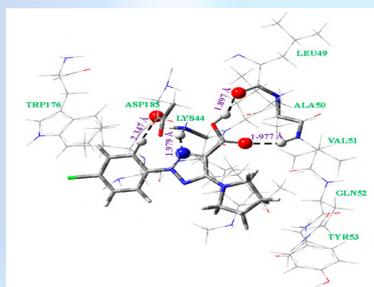
Adv. Synth.Catal.2023,365, 1–7
<https://doi.org/10.1002/adsc.202301040>

Los complejos de cobalto de bajo valor con ligandos de tipo fosforado pueden promover la cicloadición (3+2) intramolecular de alquilenociclopropanos (ACP) con alquenos y alenos. Los dienos también pueden utilizarse pero dan lugar a productos de cicloadición de siete miembros. Las reacciones son totalmente diastereoselectivas y, en algunos casos, también observamos una moderada enantioselectividad, especialmente cuando se utilizan ligandos quirales fosfito.



LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD

Study of the Molecular Architectures of 2-(4-Chlorophenyl)-5-(pyrrolidin-1-yl)-2H-1,2,3-triazole-4-carboxylic Acid Using Their Vibrational Spectra, Quantum Chemical Calculations and Molecular Docking with MMP-2 Receptor



Pharmaceutics 2023, 15, 2686
<https://doi.org/10.3390/pharmaceutics15122686>

Mauricio Alcolea Palafox, Nataliya P. Belskaya, Irena P. Kostova

El esqueleto de 1,2,3-triazol es un bloque de construcción valioso para el descubrimiento de nuevos agentes anticancerígenos. En este trabajo, la estructura molecular de la droga anticancerígena (4-clorofenil)-5-(pirrolidin-1-il)-2H-1,2,3-triazol-4-carboxílico (1b) y su forma aniónica (2b) se caracterizó mediante los métodos de química cuántica B3LYP, M06-2X y MP2, optimizando sus formas monoméricas, el dímero cíclico y forms apiladas mediante el paquete de programas Gaussian16. La estructura molecular resultó estar ligeramente fuera del plano. La buena concordancia entre las bandas IR y Raman observadas experimentalmente en estado sólido con las calculadas teóricamente confirma las estructuras sintetizadas. Mediante cálculos de acoplamiento molecular, se evaluó cómo interactúa la molécula 1b con algunos aminoácidos del receptor de la metaloproteinas MMP-2, utilizando software Sybyl-X 2.0. De este modo, se demostró la importancia de los andamiajes triazólicos en las interacciones de tipo enlace de hidrógeno establecidas.

Diversity in Electronic and Structural Forms as a Function of Metal Ion and Co-ligand in Deprotonated Epindolidione Bridged Dimetallic Set up

Maya Kumari, Sudip Kumar Bera, **Reyes Jiménez-Aparicio**, **José Luis Priego**, Goutam Kumar Lahiri



Eur. J. Inorg. Chem. 2023, e202300611
<https://doi.org/10.1002/ejic.202300611>

El intercambio iónico en condiciones blandas produce nanoplaquetas de bronce de wolframio con una estructura cristalina original dopada con cationes de cobalto, cobre, platino y cesio ($h^+M_xWO_3$). La orientación óptima de la estructura cristalina en forma de túnel, perpendicular al plano basal de las nanoplaquetas, facilita el intercambio de cationes de modo que los cationes dopantes se sitúan en el interior de los canales de $(WO_6)^{2-}$, como demuestran la microscopía electrónica de transmisión de barrido y la espectroscopia de pérdida de energía de electrones. Esta vía sintética permite obtener no sólo materiales dopados sino también nanopartículas metálicas soportadas sobre nanoplaquetas de h^+WO_3 tras la reducción. En consecuencia, este enfoque abre una vía para obtener nuevas composiciones de bronce hexagonal. Hemos utilizado este enfoque para diseñar nanopartículas de Pt soportadas sobre los dos polimorfos hexagonales de WO_3 conocidos: h^+WO_3 y h^-WO_3 . Utilizando la catálisis de la oxidación de CO como sonda, destacamos diferencias en la interacción metal-soporte en estas heteroestructuras Pt- WO_3 , especialmente una mayor transferencia de electrones desde el recién descubierto marco h^-WO_3 .

DIVULGAR PARA EDUCAR



II CERTAMEN DE PROYECTOS EDUCATIVOS EN QUÍMICA

Si eres docente de ESO o Bachillerato, ya puedes presentar tu proyecto en el II Certamen de Proyectos Educativos en Química.

FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS

II CERTAMEN DE PROYECTOS EDUCATIVOS DE QUÍMICA

Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Complutense de Madrid

Bases e Inscripciones

Con el apoyo y la colaboración de:

- ANAYA
- SEBBM
- feiQue Federación Empresarial de la Industria Química Española
- UNIVERSIDAD COMPLUTENSE
- Vicerrectorado de Estudiantes
Unidad de Orientación y Difusión
- QUIMICA y SOCIEDAD
- Real Sociedad Española de Física
- Real Sociedad Española de Química
- Real Sociedad Española de Física y Química
- Real Sociedad Española de Química
- Sección Territorial de Madrid

Bases e inscripción

BOLETÍN DE DIVULGACIÓN. Nº 19

Facultad de Ciencias Químicas. UCM
Vicedecanato de Ordenación Académica, Biblioteca y Divulgación



*Entrada
martillo norte*



Biblioteca



*Entrada
martillo sur*



Fotografías: Elena Espada Bernabé, Josefa Isasi, Paloma Sánchez, Rocío Rodríguez



FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID



Imágenes: Canva, Freepik