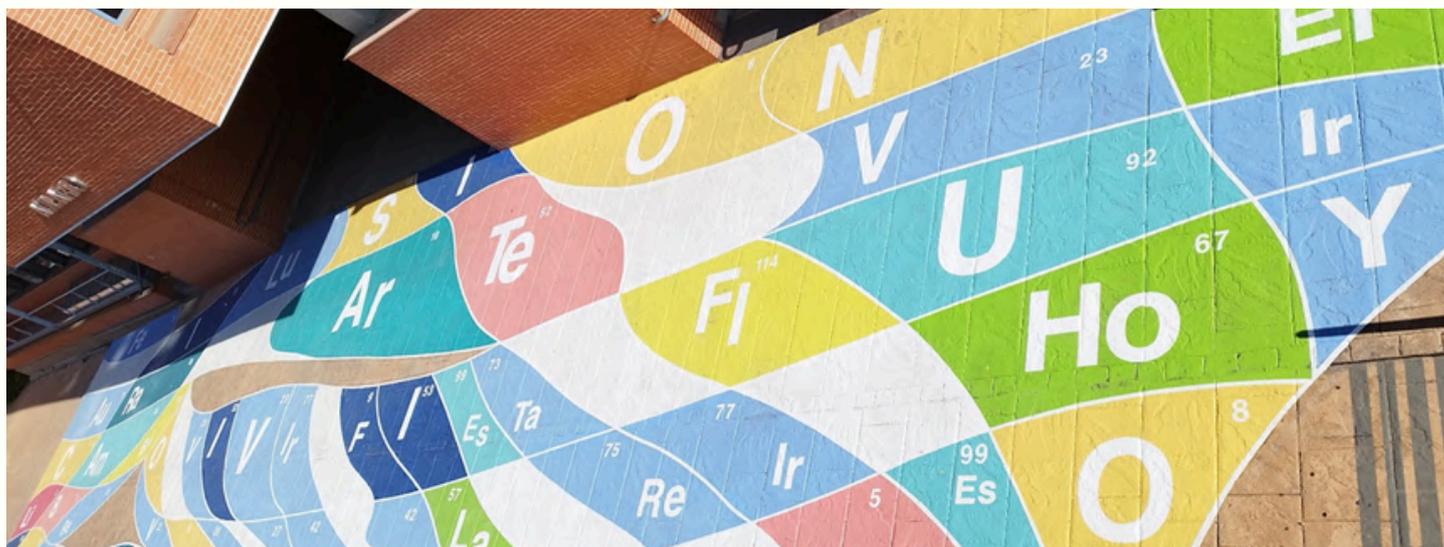




BOLETÍN DE DIVULGACIÓN

Facultad de Ciencias Químicas. UCM



Mayo, terminan las clases, pero no dejamos de divulgar

Belén Yélamos López

Vicedecana de Ordenación Académica, Biblioteca y
Divulgación

El día 10 de mayo se celebró el Día Mundial del Lupus. Para conocer más sobre esta enfermedad, los estudiantes Evelyn Cornejo y Diego Villa han preparado un estupendo artículo en el que nos hablan de las bases químicas y biológicas del Lupus Eritomatoso Sistémico. Álvaro Martínez, profesor del Dpto. de Q. Inorgánica, es autor del libro “Historias de los Metales que cambiaron el mundo”. Él mismo nos hace la reseña de su libro que podéis encontrar en la Biblioteca de la facultad. En la sección de “Actividades” nos hacemos eco de la celebración de la I Edición de los Premios Mendeleiyév, organizada por la DEQ; del I Congreso de Ciencias Experimentales en el Campo de la Salud, en el que dos de nuestros estudiantes fueron premiados; y de la entrevista que hicieron a M. Teresa Villalba y Carlos Pastor en el programa de RTVE “Objetivo Planeta”. Finalizamos con un artículo sobre el descubridor del Platino, Antonio de Ulloa, primero de una serie de artículos sobre los descubridores españoles de elementos químicos, preparado por José M. Gómez.

EN ESTE NÚMERO

NOTICIAS.....2

**LIBROS DE
DIVULGACIÓN.....6**

**ACTIVIDADES DE
DIVULGACIÓN.....7**

**LA INVESTIGACIÓN EN LA
FACULTAD14**

**DIVULGAR PARA
EDUCAR.....19**

NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



LUPUS ERITEMATOSO SISTÉMICO: DE PEQUEÑOS FALLOS A GRAVES DESASTRES.

Evelin Cornejo Fundora y Diego Villa Lázaro
Estudiantes de Grado en Bioquímica
Fac. Ciencias Químicas

“La vida no es justa, pero la justicia siempre es posible” fue la frase que utilizó el expresidente de los Estados Unidos, John F. Kennedy, durante su discurso de inauguración de mandato en 1961. Seguro que alguna vez has escuchado en los medios de comunicación la noticia de algún caso de encarcelamiento por error, de forma injusta. A veces, las pruebas nos conducen a la persona equivocada, pero ¿qué opinarías si te decimos que eso también sucede en nuestro organismo a nivel molecular? Está claro que hay ocasiones que el cuerpo no se hace justicia a sí mismo y ahí es donde entra en juego nuestro sistema inmune.

Cuando una partícula extraña entra en nuestro cuerpo (**Figura 1**), los macrófagos y otros fagocitos la fagocitan. Algunos de estos además son **células presentadoras de antígenos**, llamadas así porque exponen proteínas de este agente en su superficie, como si fueran banderines que son reconocidos por los **linfocitos T colaboradores o CD4+**, que se activan. Imagina que, tras encontrar las pistas de una escena del crimen, los criminólogos las procesan y comienzan a indagar.

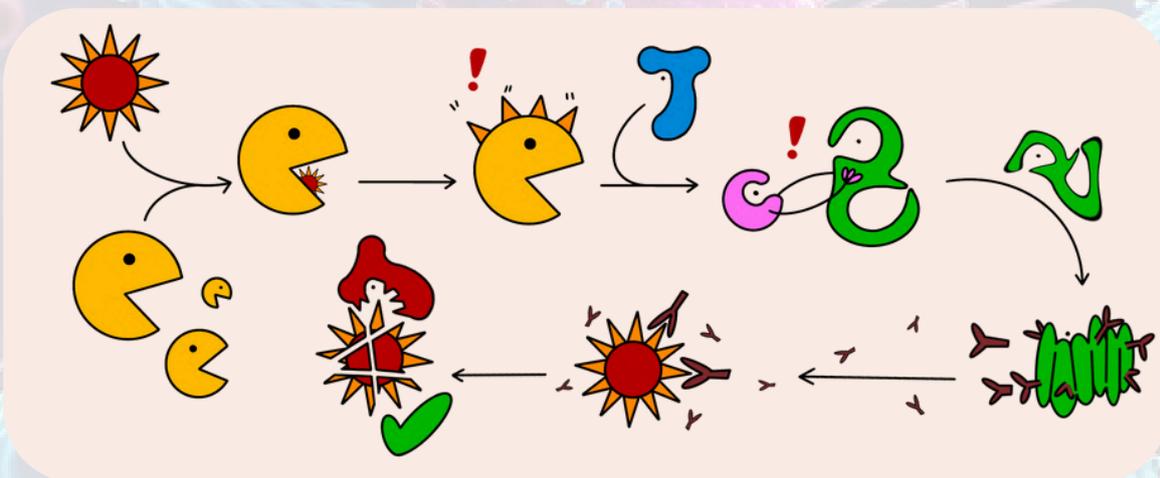


Figura 1. Representación animada de la respuesta inmune tras la detección de una partícula exógena. En **amarillo**, los macrófagos; en **naranja**, el antígeno; en **azul**, los linfocitos T CD4+; en **rosa**, las citoquinas; en **verde**, los linfocitos B, que se transforman en células plasmáticas; en **marrón**, los anticuerpos y en **rojo**, los linfocitos T CD8+.

NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



Estas células CD4+ liberan **citoquinas**, unas moléculas que promueven la inflamación y actúan como activadores de otras células del sistema inmune, entre ellos los **linfocitos B**, que, tras recibir esta señal, se diferencian en lo que conocemos como células plasmáticas y de memoria, que guardan la información. Estas **células plasmáticas** son las encargadas de fabricar los **anticuerpos** que se unen específicamente al antígeno en cuestión, como si los criminólogos se comunicaran con los cuerpos de policía para que estos iniciaran la persecución del sospechoso una vez han encontrado un perfil que se ajuste a este.

Cuando los anticuerpos encuentran y se unen a su antígeno correspondiente, se desencadena la respuesta inmune, que implica la detección de esta interacción por los **linfocitos T citotóxicos o CD8+**, que destruyen la partícula a la que esté unida el antígeno como si, tras localizar al delincuente este fuera detenido y enviado a prisión.

Hasta aquí todo parece un sistema seguro, eficiente y que consigue superar multitud de infecciones que acabarían con nuestra vida en su ausencia. Sin embargo, ¿existe la posibilidad de que ocurra un error? ¿Podrían activarse las células del sistema inmune sin un antígeno exógeno? Ahí es donde entran las cada vez más estudiadas **enfermedades autoinmunes**, situaciones donde nuestros propios linfocitos reaccionan ante los antígenos endógenos, es decir, los presentes en la superficie de nuestros tejidos, atacándolos y provocando graves dolencias: hoy os presentamos una de las enfermedades autoinmunes por excelencia, aunque no la más conocida, el **Lupus Eritematoso Sistémico (LES)**.

Se trata de una enfermedad típica de mujeres (en relación 9:1 al sexo masculino) en edad fértil (aproximadamente 90%), aunque se puede dar en todos los rangos de edad. Tiene una distribución mundial y existe predisposición en todas las etnias, aunque es más frecuente y agresiva en la afroamericana. Su prevalencia varía de 20 a 150 casos por cada 100.000 personas en Estados Unidos, y es de 9 por cada 100.000 personas en España, rozando el límite de lo que consideramos como enfermedad rara. Gracias a los avances en los últimos años, la supervivencia es aproximadamente del 95% a los 5 años, del 90% a los 10 años y del 78% a los 20 años, aunque destaca por ser una enfermedad con un amplio abanico de situaciones posibles entre los que se dan algunas de extrema gravedad.

NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



¿Cuál es el origen de esta enfermedad? Los pacientes con LES han sufrido diversas circunstancias ambientales que, sumadas a una predisposición genética, los han llevado a generar autoanticuerpos que hacen perder la tolerancia frente a antígenos propios. Entre estos antígenos, destacan elementos del interior del núcleo de las células. Los autoanticuerpos que responden frente a estos son conocidos como **ANA (anticuerpos antinucleares)**, los cuales, tras la unión a estos antígenos, activarían tanto la respuesta inmune innata como la adaptativa que previamente ilustramos de forma simplificada, aunque en la realidad es mucho más compleja.

Una vez alcanzada esta respuesta inmune, el curso clínico y la gravedad de la enfermedad son muy variables. Un 85% de los pacientes presenta brotes de forma casi constante, alternando periodos de actividad dañina con otros de remisión. Por otra parte, el daño tisular se produce fundamentalmente por dos mecanismos. El primero de ellos es el depósito de inmunocomplejos, lo que se conoce como **hipersensibilidad tipo III**. De una forma rápida y visual, los anticuerpos tienden a eliminarse una vez realizan su función. Cuando esto no sucede, se forman agregados conocidos como **inmunocomplejos** que pueden viajar por el torrente sanguíneo provocando inflamación y un profundo dolor. El otro mecanismo de daño tisular lo constituye el daño directo por anticuerpos específicos.

Otras formas de daño orgánico en el LES incluyen la trombosis, asociada principalmente al síndrome antifosfolípido o SAF, en el que el ataque autoinmune se produce contra proteínas unidas a fosfolípidos, la vasculopatía, por el mayor riesgo cardiovascular que presentan estos pacientes, aunque pueden producirse otra serie de manifestaciones de la enfermedad que se representan en la **Tabla 1**.

Incidencia (% de casos)	Manifestación	
95	Sistémicas (fiebre, cansancio, pérdida de peso...)	
85	Musculoesqueléticas	
80	Cutáneas	
60	Neurológicas	Cardiopulmonares
50	Renales	
45	Gastrointestinales	

Tabla 1. Principales manifestaciones de la enfermedad del LES en relación con la incidencia en términos del porcentaje de los casos.

NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



En términos de diagnóstico, cabe destacar que es muy complicado especialmente por el amplio abanico de sintomatología de esta enfermedad. Por ello, se crearon unos criterios de clasificación llamados SLICC (*Systemic Lupus International Collaborating Clinics*), que agrupan por un lado criterios clínicos y por otro criterios inmunológicos por detección de autoanticuerpos. Así, se estableció que debía cumplirse un mínimo de 4 criterios (entre ellos al menos uno clínico y otro inmunológico). Sin profundizar demasiado, algunos ejemplos de ellos se muestran en la **Tabla 2**.

Volviendo al origen de este artículo y retomando la frase de Kennedy, “La vida no es justa, pero la justicia siempre es posible”, el 10 de mayo se celebró el Día Mundial del Lupus. Esperamos haber hecho justicia, desde nuestra mera labor divulgativa, para que se conozca un poco más acerca de esta enfermedad que, hasta hace unos años, era prácticamente desconocida. ¿Lograremos hacer realmente justicia descubriendo una cura para esta enfermedad? El destino está en nuestras manos. Los investigadores bioquímicos somos lo más parecido a los jueces de la vida, dictaminando con nuestro trabajo cuánto podemos mejorar y prolongar la calidad de vida de los pacientes cuyas patologías estudiamos.

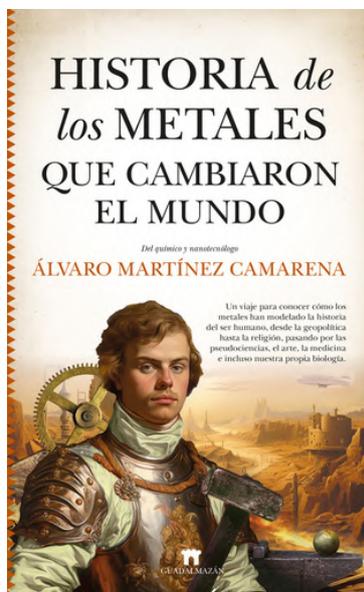
Criterios clínicos		Criterios inmunológicos	
Constitucionales	Fiebre	Anticuerpos antifosfolípido	Anticardiolipina Anti – b2 – glicoproteína 1 Anticoagulante lúpico
Hematológicos	Leucopenia		
	Trombocitopenia Hemólisis autoinmune		
Neuropsiquiátricos	Delirium	Complemento	C3 bajo y/o C4 bajo
	Psicosis		
	Convulsiones		
Mucocutáneos	Alopecia no cicatricial	Anticuerpos específicos de LES	Anti – DNA de doble cadena Anti – Sm
	Úlceras orales		
	Lupus cutáneo subagudo o discoide		
	Lupus cutáneo agudo		
Musculoesqueléticos	Artritis		
Renales	Proteinuria mayor de 0,5g en 24h		
	Biopsia renal con nefritis lúpica		

Tabla 2. Principales ejemplos de criterios clínicos e inmunológicos establecidos para el diagnóstico del LES.

LIBROS DE DIVULGACIÓN



Este y otros
libros de
divulgación los
puedes encontrar
en nuestra
Biblioteca.



“HISTORIA DE LOS METALES QUE CAMBIARON EL MUNDO”

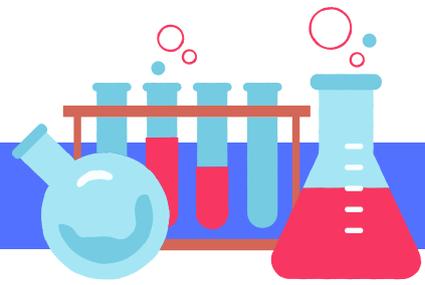
Álvaro Martínez Camarena
Guadalmazán, 2024

¿Por qué el oro es sinónimo de poder? ¿Por qué lo han utilizado la inmensa mayoría de las religiones? ¿Por qué la agricultura ecológica utiliza sales metálicas para evitar plagas en los cultivos? ¿Cuál es el motivo por el que los Estados Unidos, China y las fortunas de Silicon Valley están tan interesados en conquistar Groenlandia, un páramo de hielo y nieve?

Historia de los metales que cambiaron el mundo, (Guadalmazán, 2024) del profesor de Química Inorgánica de la UCM Álvaro Martínez Camarena responde a estas preguntas y a muchas más. Este libro nos enseña que el hierro es el metal que hay detrás del nacimiento de la hipnosis y de muchas de las pseudociencias que aún hoy gozan de buena salud; cómo el plomo es capaz de narrar la historia de la humanidad si es correctamente leído y cómo la plata se convertirá en nuestra herramienta clave para vencer a las pandemias del futuro. Pero, sobre todo, nos enseña que conocer a los metales es tanto como conocernos a nosotros mismos, y que todas las disciplinas humanas están conectadas: la política y la religión; las supersticiones y la medicina; la historia, la tecnología y el arte. Todas beben entre sí, las unas de las otras, y el punto de unión muchas veces es la ciencia, en general, y la química, la física y la biología, en particular.

Álvaro Martínez Camarena.
Profesor Ayudante Doctor. Dpto. de Química Inorgánica

ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



I EDICIÓN PREMIOS MENDELÉYEV

El pasado 11 de abril se entregaron los Premios Mendeléyev 2024, organizados por la Delegación de Estudiantes de Química. En ellos se reconoció la labor docente del profesorado de las diferentes áreas de la química y grados que se imparten en la facultad.



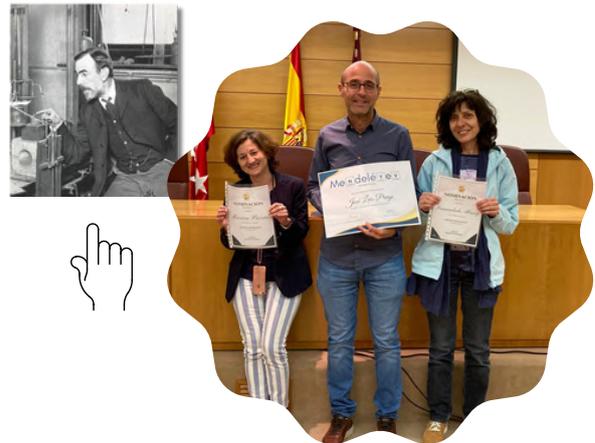
PREMIO DIELS ALDER
QUÍMICA ORGÁNICA



PREMIO HEYROVSKÝ
QUÍMICA ANALÍTICA



PREMIO HÜKEL
QUÍMICA FÍSICA



PREMIO RAMSAY
QUÍMICA INORGÁNICA



PREMIO PASTEUR
BIOQUÍMICA

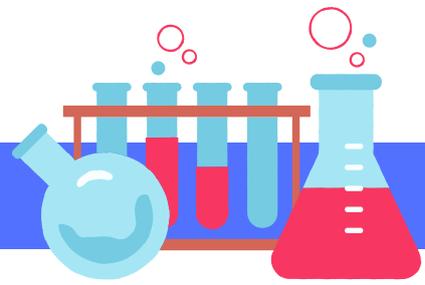


PREMIO DAVIS
INGENIERÍA QUÍMICA



Pincha para
saber más

ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



I EDICIÓN PREMIOS MENDELÉYEV



PREMIO Cinética de Orden II



**PREMIO SEGUNDA
MATRÍCULA
QUÍMICA FÍSICA I**



**PREMIO "Me apunté por
los créditos"
MEJOR DELEGADO/A**



**PREMIO "A por el 10"
ASIGNATURA FAVORITA**

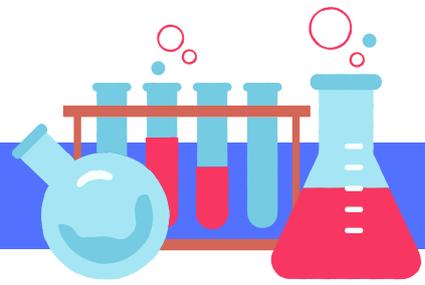


**Equipo de Rugby masculino: Ganador
del Trofeo del Rector 2024**



**PREMIO "Mejor
recogepelotas"
MEJOR EQUIPO DEPORTIVO**

ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



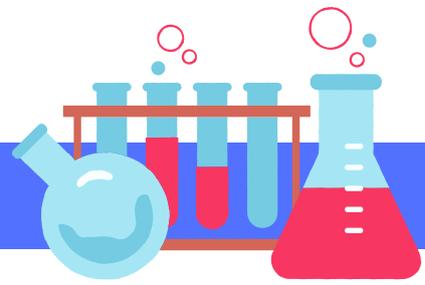
OBJETIVO PLANETA - ALERGIAS, LA EPIDEMIA DEL SIGLO



Como ya vimos en el [BOLETÍN N22](#), estamos en tiempos de alergias, sobre todo alergias respiratorias. En el programa "OBJETIVO PLANETA" de RTVE, presentado por Lorenzo Milá, se han interesado sobre el porqué se produce esta sobreactuación de nuestro sistema inmunitario contra sustancias inocuas, por qué están creciendo las alergias e intolerancias. ¿Hay algo que podamos hacer para frenarlo?. Para resolver estas dudas entrevistaron a nuestra decana, María Teresa Villalba, y a Carlos Pastor, profesor de bioquímica de la Universidad Complutense. Puedes acceder a la entrevista completa en este [enlace](#).



ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



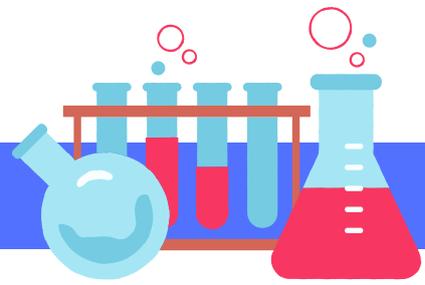
I CONGRESO DE CIENCIAS EXPERIMENTALES EN EL CAMPO DE LA SALUD



Los días 18, 19 y 20 de abril de 2024 se celebró en la Facultad de Farmacia el "**XVI Congreso de Investigación de Estudiantes de Grado en Ciencias de la Salud. XX Congreso de Ciencias Veterinarias y Biomédicas. I Congreso de Ciencias Experimentales en el Campo de la Salud**". Por primera vez la Facultad de Ciencias Químicas participó en este importante evento científico anual, donde se reunieron estudiantes de grado y doble grado de diferentes disciplinas que habían realizado trabajos de investigación relacionados con la salud. Un total de 1296 inscritos, entre estudiantes de la UCM y otras universidades españolas. El total de comunicaciones presentadas fue de 396, de las cuales 37 procedían de nuestra facultad. Además, es importante resaltar la participación de 110 estudiantes colaboradores, sin cuya dedicación y entusiasmo hubiese sido imposible la realización de este evento.



ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



I CONGRESO DE CIENCIAS EXPERIMENTALES EN EL CAMPO DE LA SALUD

El primer día y como apertura del congreso, pudimos disfrutar de la charla inaugural impartida por la Dra. **Margarita del Val** titulada “¿Estamos preparados para próximas pandemias?” en el anfiteatro Ramón y Cajal de la Facultad de Medicina. La Dra. Del Val es un referente en inmunología viral y dirige su grupo de investigación en el Centro de Biología Molecular Severo Ochoa (CBM, CSIC-UAM). A continuación, y durante los siguientes dos días se llevaron a cabo presentaciones de investigaciones realizadas por estudiantes en formato de charla oral y póster y exposiciones de patrocinadores, lo que supuso una plataforma única para el aprendizaje y la colaboración entre los participantes.



Por último, el sábado 20, se realizó el acto de clausura y entrega de premios a los 50 mejores trabajos científicos en el Aula C (Obdulio Fernández de la Facultad de Farmacia, dónde entre los premiados se encontraba el estudiante del Grado en Bioquímica Diego Villa Lázaro y el de Doble Grado de Química y Bioquímica José M. Blasco Losa por sus comunicaciones científicas.



Diego Villa Lázaro



José M. Blasco Losa

ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN

CICLO DE SEMINARIOS DE DIVULGACIÓN
CIENTÍFICA CENIM-DIVULGA

Quinto seminario dentro de la 1ª Edición del Ciclo de Seminarios de divulgación científica CENIM-DIVULGA, que tendrá lugar en la **Sala de Conferencias del CENIM** el día 22 de mayo a las 12:00.

Centro Nacional de Investigaciones
Metalúrgicas (CENIM)



1^{er} Ciclo de Seminarios CENIM-DIVULGA

**“La nanomedicina: cuando
las manzanas saben a fresas”**



Dr. Fernando Herranz

Científico Titular

Instituto de Química Médica
(IQM-CSIC)

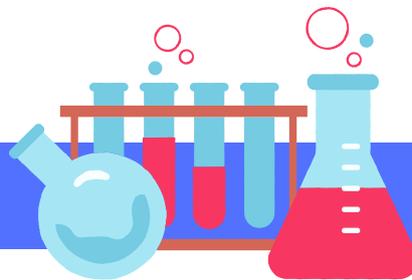
Miércoles, 22 de mayo de 2024
12:00-13:00
Sala de Conferencias del CENIM



www.cenim.csic.es



ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN

XXXVI CERTAMEN LITERARIO ALBERTO MAGNO
DE CIENCIA FICCIÓN (2024)

Certamen literario organizado por la Facultad de Ciencia y Tecnología de la Universidad del País Vasco. Podrán optar todos los relatos originales e inéditos pertenecientes al género de la Ciencia Ficción y Fantasía sobre tema científico.

Saber más: [XXXVI Certamen Literario Alberto Magno](#)

UPV EHU ZIENTZIA ETA TEKNOLOGIA FAKULTATEA FACULTAD DE CIENCIA Y TECNOLOGIA 50 URTE ANOS 1968-2018 Biba Zientzia! Ciencia Viva

**ALBERTO HANDIA
ZIENTZIA FIKZIOZKO
XXXVI. LITERATURA
LEHIAKETA
XXXVI CERTAMEN
LITERARIO ALBERTO
MAGNO DE
CIENCIA FICCIÓN**

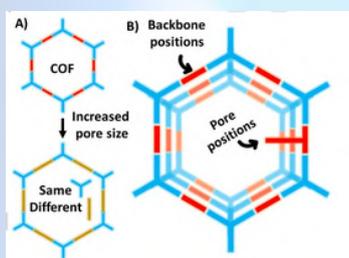
LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



Exploring Advanced Oxygen Reduction Reaction Electrocatalysts: The Potential of Metal-Free and Non-Pyrolyzed Covalent Organic Frameworks

Marcos Martínez-Fernández, Jose L. Segura

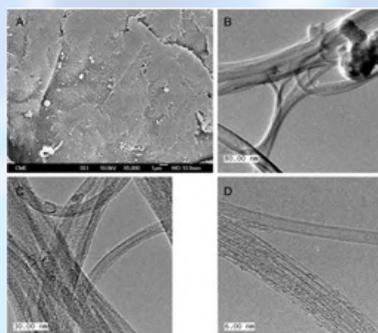
La electrocatalisis de la reacción de reducción de oxígeno (ORR) es un área de creciente interés para la producción in situ de H_2O_2 o el desarrollo de dispositivos relacionados con la energía, como las pilas de combustible de hidrógeno. Aunque los catalizadores pirolizados siguen ofreciendo las mejores prestaciones hasta la fecha en referencia a los catalizadores de base orgánica, los marcos orgánicos covalentes (COFs) libres de metal y no pirolizados destacan como candidatos alternativos prometedores debido a sus características favorables como la cristalinidad, porosidad y composición orgánica, permitiendo el estudio de las relaciones estructura-propiedades. En este trabajo presentamos los principios de diseño y los avances recientes en electrocatalizadores ORR basados en COFs, demostrando cómo la composición influye en la actividad y en la vía electrónica del proceso de reducción de oxígeno.



ChemSusChem 2024, e202400558
<https://doi.org/10.1002/cssc.202400558>

Large hysteretic hydrogen adsorption in Double Wall Carbon Nanotubes bundles

Carlos Cabrillo, Ricardo Fernández-Perea, Francisco J. Bermejo, Claudia Mondelli, Miguel A. González, Felix Fernández-Alonso, **Eduardo Enciso**, Marie-Louise Saboungi



Carbon 219 (2024) 118766
<https://doi.org/10.1016/j.carbon.2023.118766>

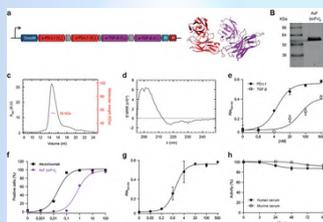
Hemos observado una gran adsorción isotérmica e histerética de hidrógeno en muestras fabricadas con haces de nanotubos de carbono de doble pared (DWCNTs) a 50 K, 77 K y 150 K y hasta 1,3 MPa de presión. Para obtener información sobre los mecanismos microscópicos responsables de este notable fenómeno, realizamos una serie de dispersión inelástica de neutrones a distintas temperaturas y cargas de H_2 . El componente elástico de las señales (difracción) observadas a diferentes cargas son consistentes con la captación de las moléculas de H_2 dentro de los intersticiales de los haces. La parte cuasielástica, es decir, la centrada en la transferencia de energía nula, muestra una dependencia de la transferencia de momento que es reproducida por un modelo de difusión dimensional 1D, tal y como se espera para el confinamiento intersticial del fluido H_2 . Por último, las señales inelásticas revelan espectros rotacionales que impiden la posibilidad de quimisorción en las impurezas metálicas de la muestra. Hasta donde sabemos es la primera observación de adsorción histerética de H_2 supercrítico en carbones nanoestructurados que no se atribuye a quimisorción en centros metálicos. En su lugar, los resultados apuntan a la jerarquía de barreras energéticas y entrópicas asociadas con la adsorción en los intersticiales del haz a través de las ranuras externas como el origen microscópico de la adsorción metaestable observada en el carbón nanoestructurado.

LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



Combination of T cell-redirecting strategies with a bispecific antibody blocking TGF- β and PD-L1 enhances antitumor responses

Antonio Tapia-Galisteo, Iñigo Sánchez-Rodríguez, **Javier Narbona**, Patricia Iglesias-Hernández, Saray Aragón-García, Anaïs Jiménez-Reinoso, Marta Compte, Shaukat Khan, Takeshi Tsuda, Patrick Chames, **Javier Lacadena**, Luis Álvarez-Vallina, Laura Sanz

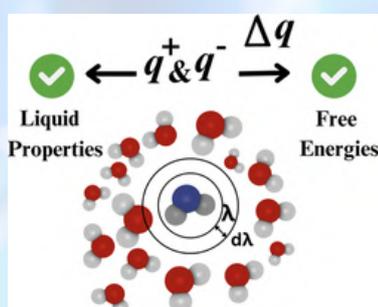


Oncimmunology 13, 2024 - Issue 1
<https://doi.org/10.1080/2162402X.2024.2338558>

Las inmunoterapias basadas en células T para tumores sólidos no han logrado el éxito clínico observado en las neoplasias malignas hematológicas, en parte debido al efecto inmunosupresor promovido por el microambiente tumoral, donde PD-L1 y TGF- β desempeñan un papel fundamental. Sin embargo, las respuestas duraderas a los inhibidores de los puntos de control inmunitarios siguen limitadas a una minoría de pacientes, mientras que los inhibidores del TGF- β aún no han llegado al mercado. Aquí, describimos un anticuerpo biespecífico para el bloqueo dual de PD-L1 y TGF- β , denominado AxF (scFv)2, bajo la premisa de que la combinación con estrategias de redireccionamiento de células T mejoraría el beneficio clínico. El tratamiento combinado con células T trispecíficas (TriTE) o células CAR-T aumentó significativamente el estado de activación de las células T y la respuesta citotóxica en modelos de cáncer de mama, pulmón y colorrectal (CCR). En resumen, demostramos la viabilidad del bloqueo concomitante de PD-L1 y TGF- β mediante una sola molécula, así como su potencial terapéutico en combinación con diferentes agentes de redireccionamiento de células T para superar la inmunosupresión mediada por el microambiente tumoral.

Accurate Free Energies of Aqueous Electrolyte Solutions from Molecular Simulations with Non-polarizable Force Fields

Parsa Habibi, H. Mert Polat, **Samuel Blázquez**, **Carlos Vega**, Poulumi Dey, Thijs J. H. Vlugt, and Othonas A. Moutos



J. Phys. Chem. Lett. 2024, 15, 16, 4477-4485
doi.org/10.1021/acs.jpcllett.4c00428

Los campos de fuerza no polarizables no consiguen predecir con exactitud las energías libres de los electrolitos acuosos sin comprometer la capacidad de predicción de las densidades y las propiedades de transporte. Se presenta un nuevo enfoque en el que (1) el agua TIP4P/2005 y los campos de fuerza de carga escalada se utilizan para describir las interacciones en la fase líquida y (2) una Superficie de Carga Efectiva (ECS) adicional se utiliza para calcular las energías libres a cero gasto computacional adicional. La ECS se obtiene utilizando un único parámetro de escala de carga por especie independiente de la temperatura. De este modo, el potencial químico del agua y las energías libres de hidratación de varias sales acuosas (por ejemplo, NaCl y LiCl) se describen con precisión (desviaciones inferiores al 5% con respecto a los experimentos), en claro contraste con los cálculos en los que se omite la ECS (desviaciones superiores al 20%). Este enfoque permite predecir con precisión las energías libres de las soluciones acuosas de electrolitos utilizando campos de fuerza no polarizables, sin comprometer las propiedades de la fase líquida.

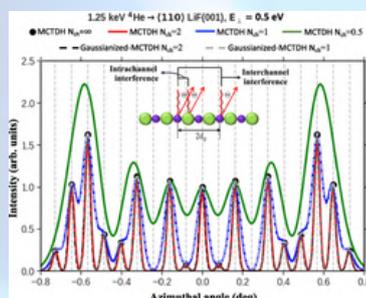
LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



Semiquantum versus quantum methods for grazing-incidence fast-atom diffraction: Influence of the wave-packet size

A. S. Muzas, L. Frisco, G. A. Bocan, **C. Díaz**, M. S. Gravielle

Para aprovechar al máximo las capacidades de la difracción de átomos rápidos por incidencia de rozamiento (GIFAD) como técnica experimental para analizar las superficies y los fenómenos que ocurren en ellas, se necesitan herramientas teóricas versátiles que describan con precisión los experimentos y, al mismo tiempo, permitan una interpretación sencilla pero significativa a un coste computacional razonable. Durante los últimos años, el método semicuántico denominado representación del valor inicial de la superficie (SIVR) se ha postulado para llenar este vacío. Sin embargo, hasta la fecha, SIVR aún no ha sido validado utilizando cálculos cuánticos completos como referencia. Aquí, hemos contrastado las simulaciones GIFAD realizadas con el enfoque SIVR con las obtenidas con el método cuántico completo conocido como Hartree dependiente del tiempo multiconfiguración (MCTDH), teniendo en cuenta la influencia del tamaño del paquete de ondas inicial. Nuestro estudio comparativo, utilizando GIFAD para el sistema He-LiF(001) como referencia, muestra una muy buena concordancia, tanto cualitativa como cuantitativa, entre los espectros de difracción simulados por SIVR y MCTDH, bajo diferentes condiciones de incidencia. Estos resultados apoyan el uso de SIVR como una herramienta teórica versátil para extraer tanta información precisa como sea posible de los experimentos GIFAD.



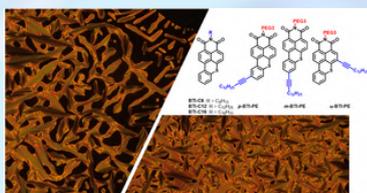
Phys. Rev. A 109, 042823, 2024

<https://doi.org/10.1103/PhysRevA.109.042823>

Harnessing Liquid Crystal Attributes of Near-Unit Photoluminescent Benzothioxanthene Photosensitizers: Photophysical Profiling in Solution, Solid State, and Polymer Matrix Embedding

Frederico Duarte, Korentin Morice, Tatiana Ghanem, Dario Puchan Sánchez, Philippe Blanchard, Clara S.B. Gomes, **Santiago Herrero**, Clement Cabanetos, **Cristian Cuerva**, José Luis Capelo-Martínez, Carlos Lodeiro

Los cristales líquidos (CL) han sido objeto de gran atención por sus propiedades ópticas y eléctricas únicas, lo que los convierte en candidatos prometedores en diversas aplicaciones tecnológicas como pantallas inteligentes, sensores, telecomunicaciones, biomedicina o electrónica vestible. En este estudio, exploramos el potencial de varios derivados de imida de benzotioxanteno (BTI) altamente emisivos como materiales LC, centrándonos en su robustez y en su comportamiento de emisión estable a temperatura. Mediante la personalización de la estructura molecular de las BTI, hemos conseguido propiedades emisivas excepcionales manteniendo las ventajas inherentes de las LC, como su capacidad de autoorganización y su naturaleza receptiva. Describimos la formación de cristales líquidos enantiotrópicos cuyas propiedades mesomórficas dependen de la naturaleza, longitud y posición de la cadena lateral. Además, hemos investigado la estabilidad térmica de sus espectros de emisión en un amplio intervalo de temperaturas, lo que pone de relieve su uso potencial en condiciones exigentes en las que son críticas unas prestaciones ópticas precisas. Nuestros hallazgos subrayan la importancia del diseño molecular para conseguir materiales LC altamente emisivos con mayor robustez y estabilidad térmica, abriendo nuevas vías para el uso de derivados de BTI.



ChemRxiv. Material Science. 2024

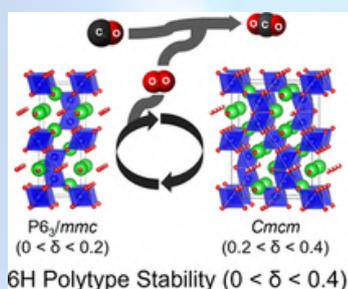
<https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2024-w3kwn>

LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



Exploring Reversible Redox Behavior in the $6H\text{-BaFeO}_{3-\delta}$ ($0 < \delta < 0.4$) System: Impact of $\text{Fe}^{3+}/\text{Fe}^{4+}$ Ratio on CO Oxidation

D. Gutiérrez-Martín, A. Varela, M. Hernando, A. Torres-Pardo, E. Matesanz, I. Gómez-Recio, J. M. González-Calbet, M. T. Fernández-Díaz, J. J. Calvino, M. A. Cauqui, M. P. Yeste, M. Parras

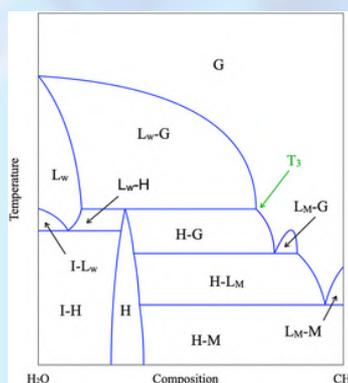


Inorg. Chem., 2024
<https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.4c00917>

Este trabajo está dedicado a evaluar la relación entre el contenido de oxígeno y la actividad catalítica en el proceso de oxidación de CO del sistema $\text{BaFeO}_{3-\delta}$ de tipo 6H. Se aportan sólidas evidencias sobre la mejora del rendimiento catalítico con el incremento del estado de oxidación medio del Fe, sugiriendo así la implicación del oxígeno de red en el proceso catalítico. Los cambios composicionales y estructurales que tienen lugar en las subredes aniónica y catiónica de los catalizadores durante los ciclos redox se han determinado mediante difracción de neutrones resuelta en temperatura. Los resultados obtenidos evidencian una transición estructural de la simetría hexagonal ($P6_3/mmc$) a la ortorrómbica ($Cmcm$). Esta transición está ligada a la distorsión de octaedros cuando la concentración de Fe^{3+} supera el 40% (valores δ superiores a 0,2). El carácter topo-táctico del proceso redox se mantiene en el intervalo $0 < \delta < 0,4$. Esto sugiere que el armazón catiónico sólo sufre ligeras modificaciones estructurales durante el proceso de intercambio de oxígeno que tiene lugar durante el ciclo catalítico.

Three-phase equilibria of hydrates from computer simulation. I. Finite-size effects in the methane hydrate

S. Blázquez, J. Algaba, J. M. Míguez, C. Vega, F. J. Blas, M. M. Conde



J. Chem. Phys. 160, 164721 (2024)
<https://doi.org/10.1063/5.0201295>

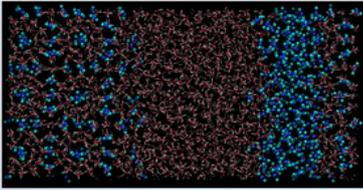
Los hidratos de clatrato son vitales en la investigación energética y las aplicaciones medioambientales. Comprender su estabilidad es crucial para aprovechar su potencial. En este trabajo, empleamos simulaciones de coexistencia directa para estudiar los efectos del tamaño finito en la determinación de la temperatura de equilibrio trifásico (T_3) de los hidratos de metano. Se emplean dos modelos populares de agua, TIP4P/Ice y TIP4P/2005, explorando varios tamaños de sistema variando el número de moléculas en las fases de hidrato, líquido y gas. Los resultados revelan que los efectos del tamaño finito desempeñan un papel crucial en la determinación del T_3 . El estudio incluye nueve configuraciones con distintos tamaños de sistema, lo que demuestra que los sistemas más pequeños, en particular los que conducen a condiciones estequiométricas y a la formación de burbujas, pueden arrojar valores de T_3 inexactos. La aparición de burbujas de metano dentro de la fase líquida, observada en configuraciones más pequeñas, influye significativamente en el comportamiento del sistema y puede dar lugar a estimaciones erróneas de la temperatura. Nuestros resultados revelan efectos de tamaño finito en el cálculo de T_3 mediante simulaciones de coexistencia directa y aclaran la convergencia de tamaño del sistema para ambos modelos, arrojando luz sobre las discrepancias encontradas en la literatura. Los resultados contribuyen a una comprensión más profunda del equilibrio de fases de los hidratos de gas y ofrecen información valiosa para futuras investigaciones en este campo.

LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



Three-phase equilibria of hydrates from computer simulation. II. Finite-size effects in the carbon dioxide hydrate

J. Algaba, S. Blázquez, E. Feria, J. M. Míguez, M. M. Conde, F. J. Blas

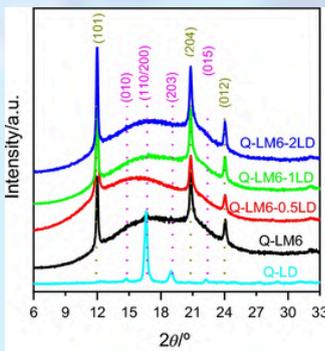


J. Chem. Phys. 160, 164722 (2024)
<https://doi.org/10.1063/5.0201306>

En este trabajo se han estudiado los efectos del tamaño finito en la determinación de la temperatura de coexistencia trifásica (T_3) del hidrato de dióxido de carbono (CO_2) mediante simulaciones de dinámica molecular y utilizando la técnica de coexistencia directa. Según esta técnica, las tres fases implicadas (hidrato-solución acuosa- CO_2 líquido) se colocan juntas en la misma caja de simulación. Variando el número de moléculas de cada fase, es posible analizar el efecto del tamaño de la simulación y la estequiometría en la determinación de la T_3 . En este trabajo, hemos determinado este valor a 8 presiones diferentes (de 100 a 6000 bar) y utilizando 6 cajas de simulación distintas con diferentes números de moléculas y tamaños. Los resultados de simulación obtenidos para el hidrato de CO_2 confirman la sensibilidad de T_3 en función del tamaño y composición del sistema, explicando las discrepancias observadas en el trabajo original de Míguez et al. [*J. Chem Phys.* 142, 124505 (2015)]. Los resultados obtenidos en este trabajo ponen de manifiesto que la elección de una configuración inicial correcta es esencial para estimar con precisión la temperatura de coexistencia trifásica de los hidratos mediante simulaciones directas de coexistencia.

Phase transitions in mixtures based on poly(lactic acid) and two polymeric nucleants processed under a fast or slow cooling from the melt

R. Barranco-García, A. Muñoz-Bonilla, M. L. Cerrada, C. Echeverría & M. Fernández-García



J Therm Anal Calorim (2024).
<https://doi.org/10.1007/s10973-024-13188-3>

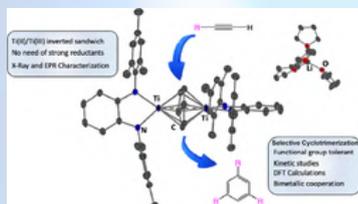
Se prepararon por extrusión mezclas basadas en dos matrices diferentes de poli(ácido láctico) (PLA) y dos agentes nucleantes distintos, incorporados en varios contenidos. Además, se aplicaron dos tratamientos térmicos durante el procesamiento de las películas a partir de la masa fundida: un enfriamiento rápido (Q) y un enfriamiento lento (S). Las características cristalinas de los sistemas poliméricos resultantes estuvieron condicionadas principalmente por la matriz de PLA utilizada y por la velocidad de enfriamiento aplicada, resultando menos importante la naturaleza del nucleante. Así, se desarrollaron cristales estereocomplejos casi exclusivamente en las muestras Q, mientras que se observó la coexistencia de cristalitos homo y estereocomplejos cuando se impuso un enfriamiento lento. El tipo de homocristalitos presentes en las muestras también dependía de la velocidad de enfriamiento aplicada durante el procesamiento de la película. En los sistemas Q, los cristales crecieron al calentarse a través de una cristalización en frío, como se observó mediante calorimetría diferencial de barrido; mientras que se desarrollaron a lo largo de la etapa de enfriamiento en los materiales S. La influencia de estas características estructurales en la respuesta mecánica también se evaluó mediante mediciones de microdureza.

LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



A Mixed-Valence Ti(II)/Ti(III) Inverted Sandwich Compound as a Regioselective Catalyst for the Uncommon 1,3,5-Alkyne Cyclotrimerization

Elena Álvarez-Ruiz, Ignacio Sancho, Marta Navarro, **Israel Fernández**, Cristina Santamaría, Alberto Hernán-Gómez



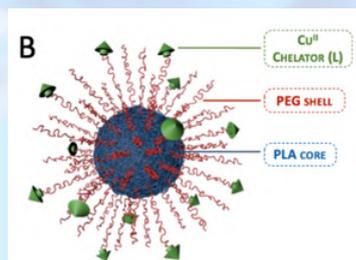
Inorg. Chem. 2024

<https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.4c00149>

En este estudio se presenta la síntesis, estructura y actividad catalítica de un compuesto en sándwich invertido de Ti(II)/Ti(III). La síntesis del compuesto de di-titanio con puente de areno comienza con la preparación de un precursor de titanio(IV) (2). La reducción de 2 con sodio metálico da lugar a una especie (3) en estado de oxidación III. Para alcanzar el estado de oxidación inferior II, 2 sufre una reducción mediante alquilación con ciclopentilo de litio. Este enfoque de alquilación desencadena una cascada de reacciones, incluyendo la abstracción/eliminación del β -hidruro, la evolución del hidrógeno y la reducción química, para generar el compuesto Ti(II)/Ti(III) [Li(thf)₄][TiMesPDA)₂(μ - η^6 : η^6 -C₆H₆)] (4). La caracterización por rayos X y EPR confirma los estados de valencia mixta de las especies de titanio. El análisis computacional del estado de reposo para la cicloadición del trimetilsililacetileno indica una preferencia termodinámica por estabilizar el 1,3,5-areno dentro del espacio entre los dos fragmentos de [TiMesPDA], lo que concuerda con la regioselectividad observada.

Polymeric Nanozyme with SOD Activity Capable of Inhibiting Self- and Metal-Induced α -Synuclein Aggregation

Álvaro Martínez-Camarena, Francesco Bellia, M Paz Clares, Graziella Vecchio, Julien Nicolas, Enrique García-España



Chemistry 2024

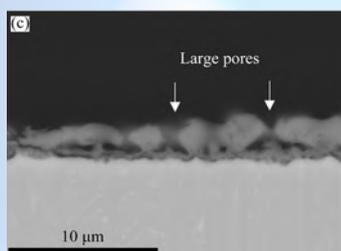
[doi: 10.1002/chem.202401331](https://doi.org/10.1002/chem.202401331)

A pesar de décadas de investigación, la enfermedad de Parkinson sigue siendo una patología idiopática para la que aún no se ha encontrado cura. Esto se explica en parte por el carácter multifactorial de la mayoría de los síndromes neurodegenerativos, en cuya generación intervienen múltiples factores patogénicos. Dos de los más importantes son la agregación de α -sinucleína y el estrés oxidativo. En este trabajo, abordamos ambas cuestiones sintetizando una nanozima multifuncional basada en el injerto de un ligando piridinofano que puede coordinar fuertemente CuII, sobre nanopartículas de poliéster biodegradables PEGiladas. La nanozima resultante presenta una notable actividad superóxido dismutasa junto con la capacidad de inhibir la agregación autoinducida de α -sinucleína en fibrillas de tipo amiloide. Además, la combinación del quelante y el polímero produce un efecto cooperativo por el que la nanozima resultante también puede reducir a la mitad la agregación de α -sinucleína inducida por CuII.

LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD

**Flash plasma electrolytic oxidation and electrochemical behaviour in physiological media of additive manufacturing Ti6Al4V alloy****H. Mora Sánchez, C. Ramos, M. Moledano, B. Torres, R. Arrabal, E. Matykina**

El objetivo de este trabajo es comprender el tratamiento de oxidación electrolítica por plasma (PEO) y el comportamiento electroquímico de una aleación Ti6Al4V fabricada mediante una técnica de fabricación aditiva (AM) por fusión de lecho de polvo láser conocida como sinterizado directo de metal por láser (DMLS). Se produjeron recubrimientos que contenían Ca y P con tratamientos PEO de corta duración (<120 s) (también denominados Flash-PEO) obteniendo recubrimientos de 3-10 μm de espesor tanto en la aleación AM como en una homóloga convencional. Posteriormente, se evaluó el comportamiento electroquímico de las aleaciones desnudas y tratadas en una solución α -MEM modificada mediante polarización potenciodinámica y espectroscopia de impedancia electroquímica (EIS). Se observó que la fina microestructura α -laminar de la aleación AM con pequeñas partículas de fase β en los espacios interlamelares adelantaba el inicio de la formación de chispas promoviendo un crecimiento más rápido del recubrimiento PEO en comparación con la aleación convencional. Los recubrimientos Flash-PEO mejoraron la protección contra la corrosión tanto de las aleaciones convencionales como de las AM, y los recubrimientos más finos (<3 μm) proporcionaron hasta tres veces más protección. Se observó que la aleación AM Ti6Al4V era susceptible a la corrosión localizada por grietas, lo que podría atribuirse a la alta densidad de los límites de grano. Los tratamientos Flash-PEO, incluso de tan sólo 35 s, fueron suficientes para prevenirla con éxito.



Trans. Nonferrous Met. Soc. China 34(2024)
1150-1166
DOI: 10.1016/S1003-6326(23)66460-X

DIVULGAR PARA EDUCAR



ELEMENTOS QUÍMICOS DESCUBIERTOS POR ESPAÑOLES

ANTONIO DE ULLOA (1716-1795) PLATINO

José M. Gómez Martín
Dpto. Ingeniería Química y de Materiales
Fac. Ciencias Químicas

El siglo XVIII supuso el despegue de la química moderna, con los planteamientos de Lavoisier, dejando atrás los enfoques alquímicos. En este siglo comenzaron los descubrimientos de nuevos elementos, contabilizándose 20 elementos nuevos. El número subió a 50 más durante el siglo XIX y así hasta nuestros días. Uno de estos elementos fue el **Platino**, descubierto por **Antonio de Ulloa** en 1735, cuando contaba con apenas 19 años. Este descubrimiento se produjo gracias a que en esa época se desarrollaron numerosas expediciones científicas. Una de ellas fue la misión Geodésica Hispano-Francesa. En aquella época reinaba en España el primer monarca Borbón, Felipe V, quien se había criado en Francia bajo la protección del Rey Sol (Luis XIV), por lo que se vivía un periodo de paz entre ambos países.

Esto hizo posibles diferentes colaboraciones; ente ellas, esta misión, cuyo objetivo era comprobar la forma de la tierra. La misión estuvo formada por un grupo de científicos franceses que tenían que ir a territorios del actual Ecuador, por lo que necesitaban el permiso y la aprobación del Rey Felipe V, quien impuso como condición que los acompañaran dos comisionados españoles. Los elegidos fueron Jorge Juan y Antonio de Ulloa. Se debían obtener los datos que complementarían los obtenidos por otra expedición a la Laponia, y así estimar la longitud del arco del meridiano terrestre y medir la verdadera forma de la Tierra.

M E S U R E DES TROIS PREMIERS DEGRES DU MERIDIEN

DANS L'HEMISPHERE AUSTRAL,
*Tirée des Observations de M.^{rs} de l'Académie Royale
des Sciences, Envoyés par le Roi sous l'Équateur:*

PAR M. DE LA CONDAMINE.

*Fait à Paris
Descripsit radiis mediis qui gombus Orbem. Vngl.*



A PARIS,
DE L'IMPRIMERIE ROYALE.
M. DCCLII

DIVULGAR PARA EDUCAR



Durante esta expedición fue cuando Antonio de Ulloa observó en las minas de oro del **río Pinto**, un pequeño río cerca de **Popayán** en la Nueva Granada de la época, que entre los cuerpos metálicos que acompañaban al oro había uno de color plateado, que denominó **Platina de Pinto**.

En aquellos años, la plata era un elemento muy apreciado, ya que era de lo que estaban hechos los reales de a ocho, la moneda con la que se pagaban las transacciones a lo largo de todo el mundo. El nombre se lo puso, precisamente, por su semejanza con la plata y por el lugar donde lo encontró. Antonio de Ulloa ya realizó algunos análisis que ayudaron a describir más detalladamente este elemento: *"...donde la platina (piedra de tal resistencia, que no es fácil romperla, ni desmenuzarla con la fuerza del golpe sobre el Yunque de Acero), es causa de que se abandonen, porque ni la calcinación la vence, ni hay arbitrio para extraer el metal, que encierra, sino a expensas de mucho trabajo y costo"*.



Provincia de Popayán (Utopía Española)

Se deduce que la platina era un inconveniente para la obtención del oro y su eliminación era complicada, llegándose a emplear incluso la **amalgamación**. Durante esta expedición, Ulloa también describió un fenómeno óptico que observó viendo el amanecer en las cimas de los Andes, y que describió como un iris concéntrico formado en la niebla. Este fenómeno se conoce como **glorias o anillos de Ulloa** y se debe a fenómenos de reflexión y difracción de la luz. La misión científica también permitió explorar, cartografiar y fortificar la costa del Pacífico, desde Panamá a Chiloé (sur de Chile).



Gloria o corona de Ulloa (Fotometeo)

DIVULGAR PARA EDUCAR



El viaje de vuelta a España, en 1745, Antonio de Ulloa y Jorge Juan lo hicieron en barcos separados para evitar la pérdida de la documentación obtenida. Esto resultó premonitorio porque a la altura de las Azores, el barco en el que viajaba Antonio de Ulloa fue capturado por un corsario inglés, y aunque lograron escapar, fueron de nuevo apresados por un navío británico, y trasladados a Londres. En Londres sus conocimientos científicos le permitieron entablar amistad con [Martin Folkes](#), presidente de la Royal Society, siendo tratado con honores de científico y nombrado miembro de dicha sociedad en 1746, a pesar de encontrarse como prisionero. Ese mismo año fue liberado y pudo volver a España con su documentación. Entre 1749 y 1752 fue enviado a varios países europeos (Francia, Suiza, Flandes, Holanda, estados alemanes, Rusia y los países del Báltico) comisionado por Fernando VI para aprender nuevas ciencias y contratar expertos para activar la política de manufacturas reales. Parece que este viaje también incluyó una misión como espía de instalaciones industriales.

De regreso a España ejecutó y desarrolló numerosas ideas como el Canal de Castilla, el Laboratorio Metalúrgico, el Jardín de Plantas de Madrid, encargado de la Real Fábrica de Paños de Segovia, etc. En esa época (1752-1754) también fue impulsor y fundador del Real Gabinete de Historia Natural, que fue predecesor del Museo Nacional de Ciencias Naturales. La institución científica tenía un carácter multidisciplinar incluyendo principalmente geografía e historia natural pero también geología y química. Debido a su amplia experiencia fue nombrado gobernador y superintendente de la mina de mercurio (azogue) de Huancavelica, en Perú (1757-1764).



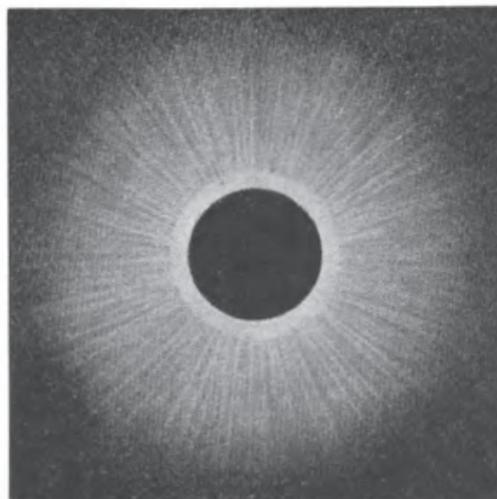
Con su nombramiento, algo novedoso para la época ya que se trataba de un científico, se pretendía modernizar el centro minero desarrollando los nuevos planteamientos ilustrados. El nombramiento no estuvo exento de cierta polémica, ya que chocaba con los intereses del virrey y de los funcionarios que se beneficiaban de la mina, lo que supuso un gran inconveniente a la introducción de cambios tecnológicos.

DIVULGAR PARA EDUCAR



Realizó numerosas modificaciones y cambios en la forma de explotar la mina, pero encontró muchas dificultades para llevarlos a cabo. En su periodo como gobernante de la mina no consiguió que desaparecieran los problemas debido a la escasa cooperación, y gran resistencia, que encontró.

Con el tratado de París de 1763, que daba por terminada la guerra de los Siete Años, España cedió La Florida pero obtuvo Luisiana. Carlos III encargó a Ulloa gobernar el territorio de Luisiana (1766), pero dos años después tuvo que huir expulsado por los colonos franceses (1768). Volvió a España donde se dedicó a la actividad académica como profesor en la Academia de Guardias Marinas. Pero en 1776 se le encargó comandar la última flota de Indias que zarpó de Cádiz hacia Nueva España (Veracruz) con un cargamento que incluía hierro y azogue, entre otros materiales, y que regresó a Cádiz en 1778 con un cargamento de plata y oro, acuñado y en barras, además de cobre, grana y añil. Durante el viaje de vuelta se produjo un eclipse total de sol (24 de junio de 1778, día de San Juan) que coincidió por casualidad (o no tanta) con el paso de Ulloa por la línea entre las Azores y el norte de África, que era la zona donde el eclipse se vería como total o anular (centralidad). Por lo tanto, Ulloa fue un espectador excepcional y pudo observar los cuatro minutos que el sol se oscureció, de los 64 que tardó *"el cuerpo de la luna en correr todo el Sol"*, con todo detalle. Se sintió impresionado por la corona observada durante el eclipse, y su posterior descripción constituye el único testimonio científico representativo, que ha sido publicado, sobre la corona solar del eclipse de 1778. Ulloa destacó la presencia de un *"punto luminoso"* sobre el disco negro de la Luna, una *"rara particularidad"* que nunca se había descrito antes y en escasas ocasiones después.



24th June 1778 (ULLOA)

Eclipse solar de 1778 (Wikimedia Commons)

DIVULGAR PARA EDUCAR



En 1779 fue nombrado teniente general y participó en la guerra contra Inglaterra, sin embargo, su carrera militar no fue tan brillante como su carrera científica.

Antonio de Ulloa falleció en 1795 en Isla de León (Cádiz) después de una destacable carrera científica, donde el descubrimiento del platino fue uno más de sus numerosos logros.



Bibliografía

- La observación por Antonio de Ulloa del “punto luminoso” durante el eclipse de 24 de junio de 1778: rozando lo imposible. Carlos Martín Escorza.
- Antonio de Ulloa: un científico ilustrado y su crítica opinión sobre el indígena americano. Antonio Gutiérrez Escudero Escuela de Estudios Hispano Americanos (Sevilla), CSIC.
- A history of platinum and its allied metals. Donald McDonald & Lesliy B. Hunt (by arrangement with Johnson Matthey).
- Vida y obra científica de Antonio de Ulloa como base para enfoques didácticos contextualizados de ciencia, tecnología, historia y sociedad. Gabriel Pinto. Anuario Latinoamericano de Educación Química, pag. 61-69.
- Huancavelica, «Alhaja de la Corona»: 1740-1790. Alejandro Reyes Flores (2004).

BOLETÍN DE DIVULGACIÓN. Nº 24

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



Fotografía: Elena Espada Bernabé



FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID