



BOLETÍN DE DIVULGACIÓN

Facultad de Ciencias Químicas. UCM



Enero, comienza el año cuántico

Belén Yélamos López

Vicedecana de Ordenación Académica, Biblioteca y
Divulgación

Hace 100 años se empezó a desarrollar la mecánica cuántica. Por ello, 2025 ha sido elegido como el Año Internacional de la Ciencia y Tecnología Cuántica. Estamos preparando algunas actividades relacionadas con la Química Cuántica, pero, mientras tanto, tendremos más eventos divulgativos y de investigación en la facultad. Te adelantamos algunos de ellos en este boletín.

En el apartado de Noticias, contamos con la contribución de un antiguo estudiante de la facultad, Cristian Prieto, que ha descubierto un nuevo mecanismo que puede explicar la aparición de la retinitis pigmentosa y que abre nuevas vías terapéuticas para su tratamiento. Y otra estudiante de la facultad, Hongyu Xu, ha sido elegida como investigadora destacada en el Concurso de Impacto de Doctorado de Una Europa. Conoceremos en qué consiste su investigación.

Y ya está en marcha el II Congreso de Ciencias Experimentales en el Campo de la Salud. En unos días se abre el plazo para que los estudiantes de los diferentes grados impartidos en la facultad se inscriban en este congreso.

Y para los más jóvenes, un ChemEscape en el que la realización de seis sencillos experimentos de química, un investigador hallará el código que necesita para acceder a los resultados de su investigación.

EN ESTE NÚMERO

NOTICIAS.....2

**ACTIVIDADES DE
DIVULGACIÓN.....11**

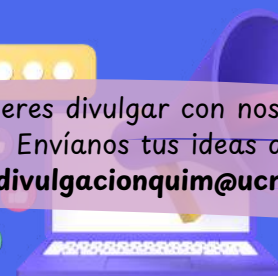
**LA INVESTIGACIÓN EN LA
FACULTAD14**

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

¿Quieres divulgar con nosotros?

Envíanos tus ideas a

vddivulgacionquim@ucm.es



NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



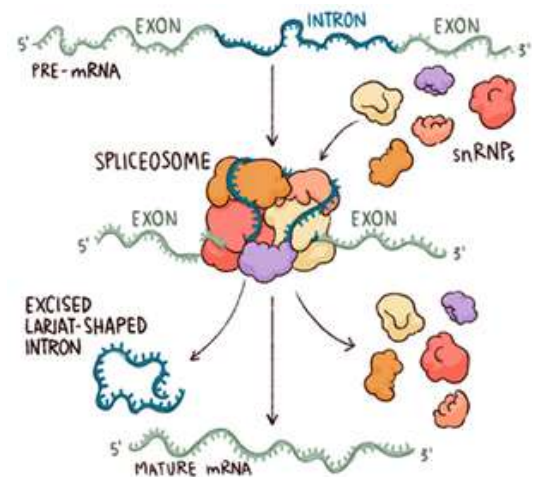
NUEVO MECANISMO MOLECULAR EXPLICA LA APARICIÓN DE LA RETINITIS PIGMENTOSA Y ABRE NUEVAS VÍAS TERAPÉUTICAS PARA EL FUTURO

Cristian Prieto García

Institute of Biochemistry II-Goethe-Universität Frankfurt am Main

El papel del *splicing* en la generación de proteínas

Los **genes**, compuestos por secuencias de ADN, contienen las instrucciones esenciales para la producción de las proteínas necesarias para el correcto funcionamiento de las células. Aunque los genes son idénticos en todas las células del cuerpo, ¿cómo es posible que una neurona y una célula ósea tengan formas y funciones tan distintas? Esto ocurre gracias a la capacidad de cada tipo celular para producir un conjunto específico de proteínas adaptadas a su función.



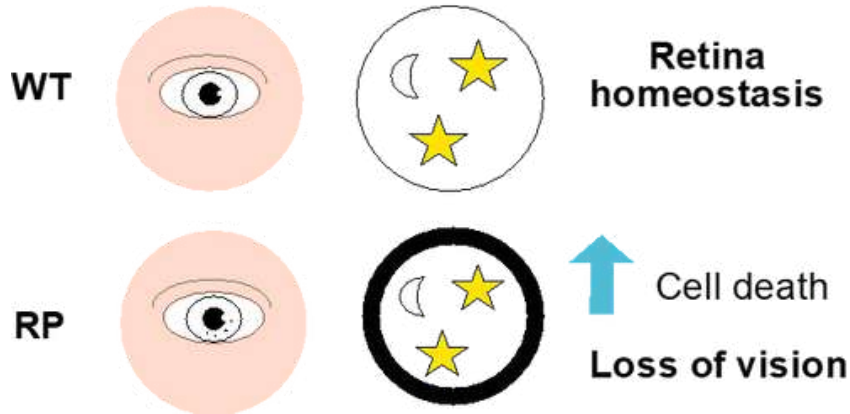
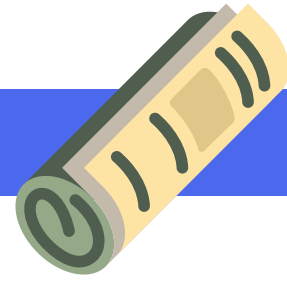
Esquema realizado por Claudia Fandoli

El ADN se transcribe en ARN, un mensajero que lleva las instrucciones genéticas hacia los ribosomas, los “fabricantes” de proteínas. Sin embargo, antes de cumplir esta función, el ARN debe ser procesado mediante un mecanismo de “corte y empalme” (**splicing**), en el que se eliminan ciertas secciones y se ensamblan otras, como en un rompecabezas molecular. Este proceso, llevado a cabo por un complejo llamado **espliceosoma**, permite que, a partir de unos 20,000 genes, el cuerpo humano genere más de 100,000 tipos diferentes de proteínas. Sin embargo, cualquier alteración en este mecanismo puede tener consecuencias graves y producir enfermedades.

El espliceosoma y su relación con la retinitis pigmentosa

Una de las enfermedades asociadas con mutaciones en el espliceosoma y defectos en el *splicing* es la **retinitis pigmentosa**, una patología hereditaria que afecta a las células retinianas, causando su muerte y provocando una pérdida progresiva de visión. Esta enfermedad afecta a 1 de cada 3,000 personas y aún carece de tratamientos efectivos. Aunque se sabe que la mayoría de las mutaciones encontradas en el espliceosoma dificultan su ensamblaje y alteran el *splicing*, no se conoce aún el mecanismo molecular preciso que explique cómo estos errores durante el corte y empalme del ARN desencadenan la muerte de los fotorreceptores retinianos y la pérdida de visión.

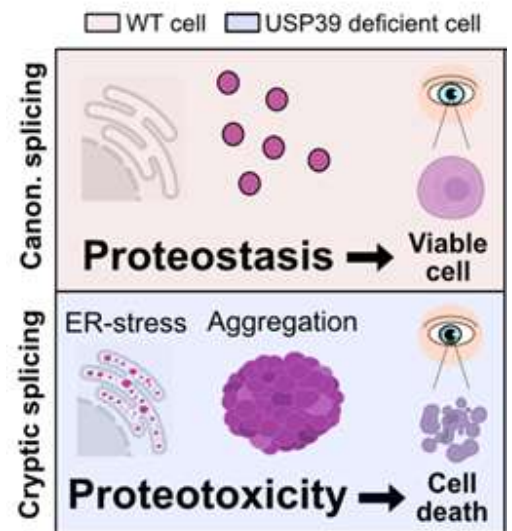
NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



WT= Grupo control; RP = Retinitis pigmentosa. Esquema realizado por Cristian Prieto García

La proteotoxicidad como nuevo mecanismo de muerte celular en la retinitis pigmentosa

Un reciente estudio liderado por los investigadores **Cristian Prieto García** (antiguo estudiante de la Facultad de Ciencias Químicas de la UCM) e **Ivan Dikic**, de la Universidad de Frankfurt, ha arrojado luz sobre cómo las mutaciones en el espliceosoma contribuyen al desarrollo de esta enfermedad. Publicado en la prestigiosa revista **Science**, el trabajo reveló que la pérdida de una proteína clave en el ensamblaje del espliceosoma, la **enzima USP39**, produce errores en el procesamiento del ARN. Estos errores generan proteínas defectuosas, mal plegadas, que se acumulan en las células formando agregados que interfieren con su funcionamiento normal y producen **proteotoxicidad**. Esta acumulación de proteínas incorrectamente plegadas provoca estrés celular, muerte celular y el desarrollo de la enfermedad en modelos animales, como el pez cebra.



Esquema obtenido Prieto-Garcia et al. 2024 (Science)

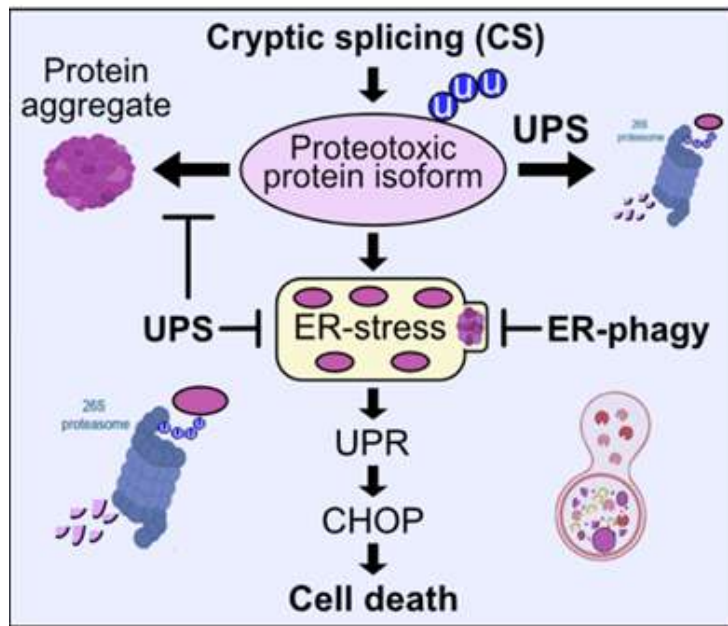
Las células pueden compensar parcialmente la producción de proteínas erróneas

Para investigar en profundidad el mecanismo molecular y explorar por qué las células de la retina en personas de edad avanzada son especialmente vulnerables, los investigadores usaron peces cebra, así como cultivos celulares. Observaron que los mecanismos responsables de la degradación de proteínas, como la degradación proteosómica mediada por ubiquitina y la autofagia, son cruciales para mantener el equilibrio celular y compensar la producción de proteínas erróneas causadas por defectos en el *splicing*.

NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



Sin embargo, la eficacia de estos procesos de degradación de proteínas disminuye con la edad y varía entre tipos celulares. Esto explicaría por qué la retinitis pigmentosa afecta de forma predominante a las células de la retina en personas mayores, incluso cuando la mutación es hereditaria y está presente en todas las células del cuerpo.



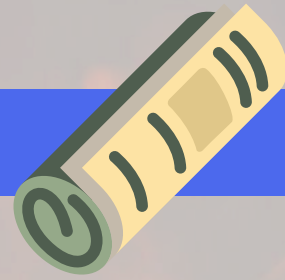
UPS= Ubiquitin-proteasome system; UPR = Unfolded protein response; ER-phagy= Endoplasmic reticulum selective autophagy. Esquema obtenido Prieto-garcia et al. 2024 (Science)

Hacia nuevas terapias

Los hallazgos de este estudio abren la puerta a nuevas estrategias terapéuticas para tratar la retinitis pigmentosa. Intervenciones dirigidas a prevenir la formación de proteínas defectuosas o a potenciar los sistemas celulares de degradación de proteínas podrían evitar la muerte celular y preservar la visión en los pacientes afectados. Este trabajo es un ejemplo de cómo el estudio de mecanismos moleculares básicos puede sentar las bases para el desarrollo de tratamientos innovadores que transformen la vida de las personas.

Saber más: [Science](#)

NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



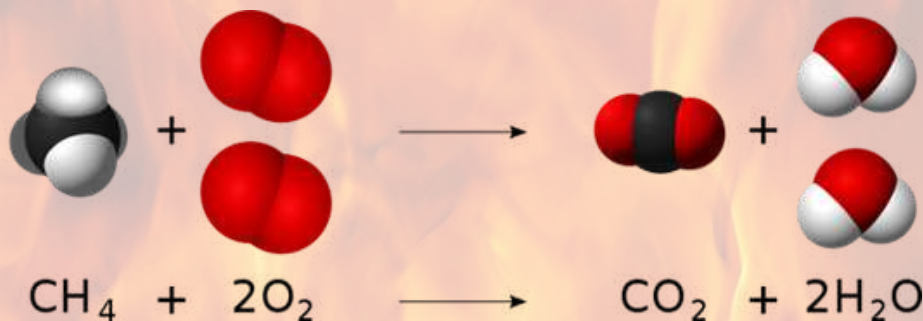
LA QUÍMICA DETRÁS DE LOS INCENDIOS FORESTALES: CÓMO OCURREN Y QUÉ IMPACTO TIENEN

Belén Yélamos. Dpto. de Bioquímica y Biología Molecular

Los incendios forestales como los que están afectando actualmente a Los Ángeles, California, son eventos devastadores que despiertan gran preocupación. Pero ¿qué hay detrás de estos fuegos?

El fuego: una reacción química en cadena

El fuego es el resultado de una reacción química conocida como combustión. Es un proceso de oxidación rápida en el que una sustancia combustible (como la madera) reacciona con el oxígeno del aire, liberando energía en forma de calor. Por eso decimos que es una reacción **exotérmica**. Esta reacción no ocurre de manera aislada, sino que genera radicales libres, moléculas muy reactivas que amplifican el proceso y crean lo que se conoce como una **reacción en cadena**. Es precisamente esta cadena de eventos la que alimenta las llamas y permite que el fuego se propague.



Reacción de combustión del metano.

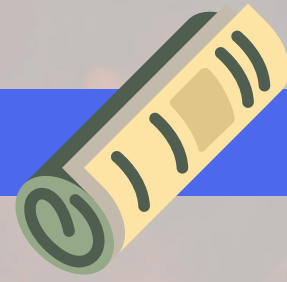
Imagen: <https://chemistrytalk.org/reaccion-de-combustion/>

Para que el fuego se inicie y se mantenga, se necesita lo que se conoce como el "tetraedro del fuego", que incluye:

1. **Combustible:** la madera, la materia orgánica o incluso partículas de polvo.
2. **Comburente:** el oxígeno, presente en un 21% del aire.
3. **Calor:** que activa la reacción inicial.
4. **Reacción en cadena:** que sostiene y amplifica el fuego.



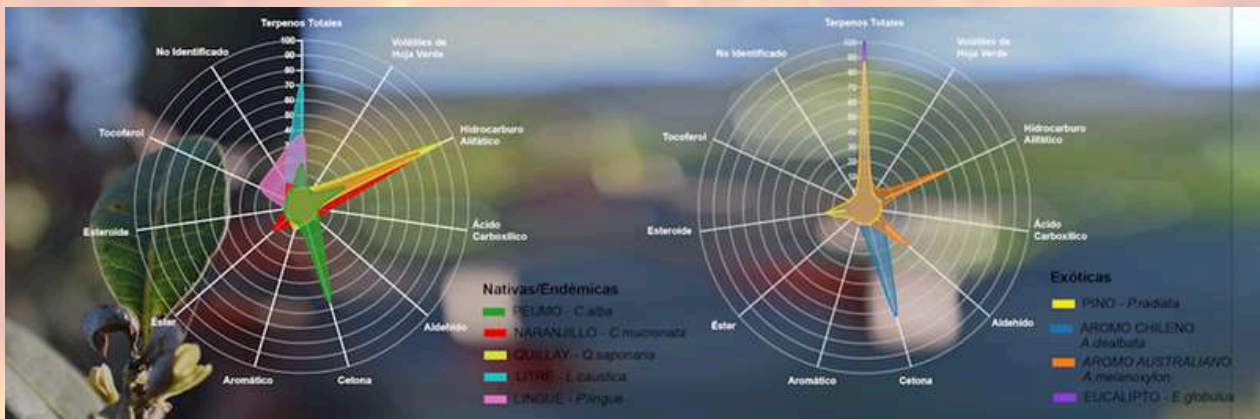
NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



Factores que afectan la propagación del fuego

Los incendios forestales son particularmente difíciles de controlar porque el oxígeno y los combustibles son prácticamente inagotables en estos entornos. La vegetación, por ejemplo, actúa como el principal combustible, y su inflamabilidad depende de:

- **Composición química:** Las plantas producen compuestos como los **terpenos**, que tienen un bajo punto de inflamación y contribuyen al calor del fuego. Sin embargo, no todas las plantas son igualmente inflamables. Además, existen otras sustancias como los **compuestos aromáticos y volátiles de hojas verdes (GVL)**, que arden menos frecuentemente tras acercarle una llama, requieren mucho tiempo para prender y su combustión dura poco tiempo.



Familia de compuestos volátiles orgánicos presentes en diferentes especies de plantas.

Imagen: [The Conversation](#) (autores del artículo).

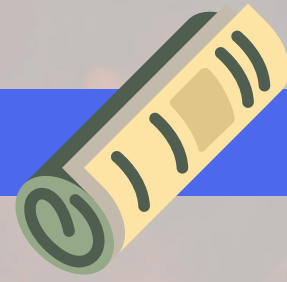
- **Estado físico:** La madera seca y en pequeños trozos se quema más rápido porque requiere menos energía para liberar los gases combustibles.
- **Características de las especies:** Algunas plantas, como el eucalipto y el pino, son conocidas por favorecer la propagación del fuego debido a su abundante hojarasca y ramas muertas.

Impactos químicos del fuego en el ambiente y la salud

Además de destruir ecosistemas y causar pérdidas humanas, los incendios generan efectos químicos que pueden ser peligrosos para la salud. Por ejemplo:

- **Metales transformados:** el calor extremo puede convertir metales presentes en el suelo, como el cromo, en formas tóxicas como el cromo hexavalente, un carcinógeno que puede afectar a los bomberos que intentan apagar el fuego o a los residentes cercanos a la zona del incendio, según un estudio realizado por **Scott Fendorf**, profesor de la Escuela de Sostenibilidad Doerr de Stanford y publicado en ***Nature Communications***.

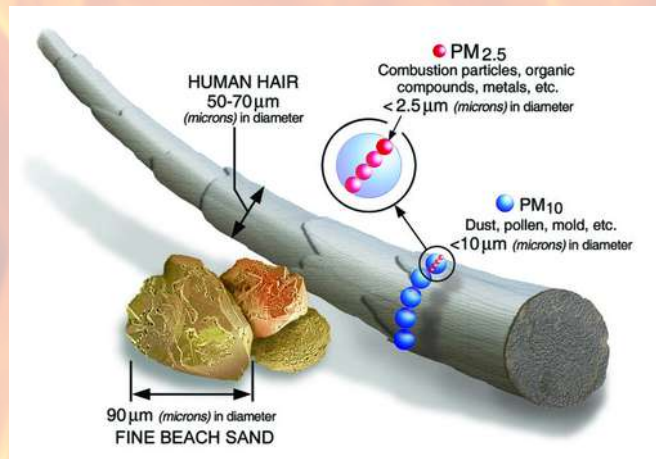
NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



Para realizar el estudio, recolectaron muestras de suelos ricos en cromo de cuatro reservas ecológicas en la cordillera costera del norte de California que habían sufrido incendios en 2019 y 2020. Compararon el suelo de las zonas quemadas con el de áreas cercanas que se salvaron del fuego. Los resultados fueron sorprendentes: en los suelos de las áreas quemadas, los niveles de cromo tóxico eran hasta siete veces más altos que en los suelos no afectados por el fuego.

Aunque este riesgo tiende a disminuir con la llegada de lluvias, ya que estas arrastran los metales, el problema persiste en las semanas o meses que pueden pasar antes de que llueva, especialmente en un contexto de cambio climático donde las sequías son más frecuentes y prolongadas. Esta investigación subraya cómo los incendios no solo destruyen ecosistemas, sino que también generan peligros ocultos que afectan la salud humana y ambiental a largo plazo.

- **Partículas peligrosas:** el humo transporta partículas finas conocidas como **PM 2.5**, capaces de penetrar profundamente en los pulmones y causar problemas respiratorios, enfermedades cardíacas y otras afecciones graves.



Comparación del tamaño de una PM_{2.5}, en relación con un pelo humano y con un grano fino de arena de la playa.

Imagen: [Wikipedia](#)

Hacia una mejor prevención y detección

Comprender la química detrás de los incendios puede ayudarnos a mejorar los sistemas de prevención. Por ejemplo, el desarrollo de sensores que detecten compuestos volátiles en el aire, como terpenos o aldehídos, podría anticipar áreas de alto riesgo. Este conocimiento también es clave para diseñar estrategias más efectivas de gestión forestal que reduzcan la propagación del fuego.

Los incendios forestales son un recordatorio de la compleja interacción entre la química, el clima y los ecosistemas. La investigación continúa siendo esencial para mitigar sus impactos y proteger tanto a las personas como al medio ambiente.

NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



La química de los incendios

El fuego es una reacción de oxidación muy violenta y exotérmica. Un ejemplo es la combustión, en la que se desprende una gran cantidad de calor y tiene dos ingredientes básicos: el comburente y el combustible.

Comburente
Aviva la llama (O_2)

Combustible
Material que se quema

Los enlaces químicos almacenan gran cantidad de energía. Estos se rompen cuando se queman, liberando energía en forma de calor.

Ricos en carbono e hidrógeno

Retardante
Aplicado a la vegetación antes de un incendio, el retardante reacciona con la celulosa de la materia orgánica, formando unos compuestos que al descomponerse por el calor dan lugar a un carbón protector que frena la propagación de incendios forestales.

$(NH_4)_2HPO_4$
Fosfato diamónico

$(NH_4)_2SO_4$
Sulfato diamónico

Deben mezclarse con agua en una relación de 1:4 o 1:5

Según el informe *Los incendios forestales en España* ante el cambio climático, el clima futuro y otros cambios socioeconómicos y globales ocasionarán situaciones extremadamente adversas, que se extenderán por más zonas del país de manera simultánea y más frecuente.

¿Son los retardantes perjudiciales para el medio ambiente?

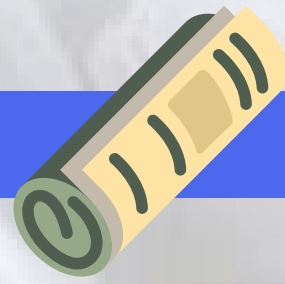
Los ecologistas afirman que contienen sales de fósforo y nitrógeno dañinos, mientras que los encargados de utilizarlo indican que no tiene impacto sobre el medio natural. Los investigadores coinciden en limitar su uso a casos extremos, y en lugares alejados de humedales y ríos.

La Química de los incendios. [Infografía de la Fundación Descubre](#)

Bibliografía

- Artículo *The Conversation: ¿Por qué algunas hojas arden más rápido que otras? La química detrás de los incendios forestales.*
- [La química del fuego.](#) Fundación Descubre.
- [Nature Communications.](#)

NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



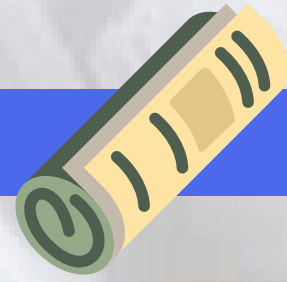
PRODUCCIÓN SOSTENIBLE DE FIBRAS DE NANOCELULOSA Belén Yélamos

La investigadora en formación, **Hongyu Xu**, del Grupo de Celulosa, Papel y Tratamientos Avanzados de Aguas, del Dpto. de Ingeniería Química y de Materiales ha sido reconocida como investigadora destacada en el Concurso de Impacto de Doctorado de Una Europa. Este concurso tiene como objetivo reconocer y celebrar tanto el impacto actual como el potencial de la investigación y de los investigadores dentro de esta prestigiosa alianza universitaria. Este año, el concurso se centró en el área de Materiales del Futuro, y Hongyu presentó un innovador tema de investigación relacionado con el desarrollo de un proceso más rápido, asequible y respetuoso con el medio ambiente para producir nanofibras de celulosa.

Las **nanofibras de celulosa** (CNFs) son fibras extremadamente pequeñas de celulosa que tienen un impacto social considerable debido a sus propiedades excepcionales, las cuales mejoran productos en diversas aplicaciones. Su impacto ambiental es positivo, ya que son biodegradables, livianas y provienen de fuentes renovables, lo que las convierte en una alternativa ecológica a los materiales sintéticos y un recurso con gran potencial económico en los sectores de tecnología verde. Las CNFs ofrecen una opción sostenible para reemplazar plásticos. En la industria del envasado de alimentos, podrían prolongar la vida útil de los productos y mejorar la seguridad alimentaria al proporcionar barreras contra contaminantes. También tienen el potencial de transformar el almacenamiento de energía con el desarrollo de nuevas baterías, supercapacitores y dispositivos electrónicos flexibles. En el ámbito médico, sus aplicaciones incluyen apósitos para heridas, estructuras para ingeniería de tejidos y sistemas para la liberación controlada de medicamentos.

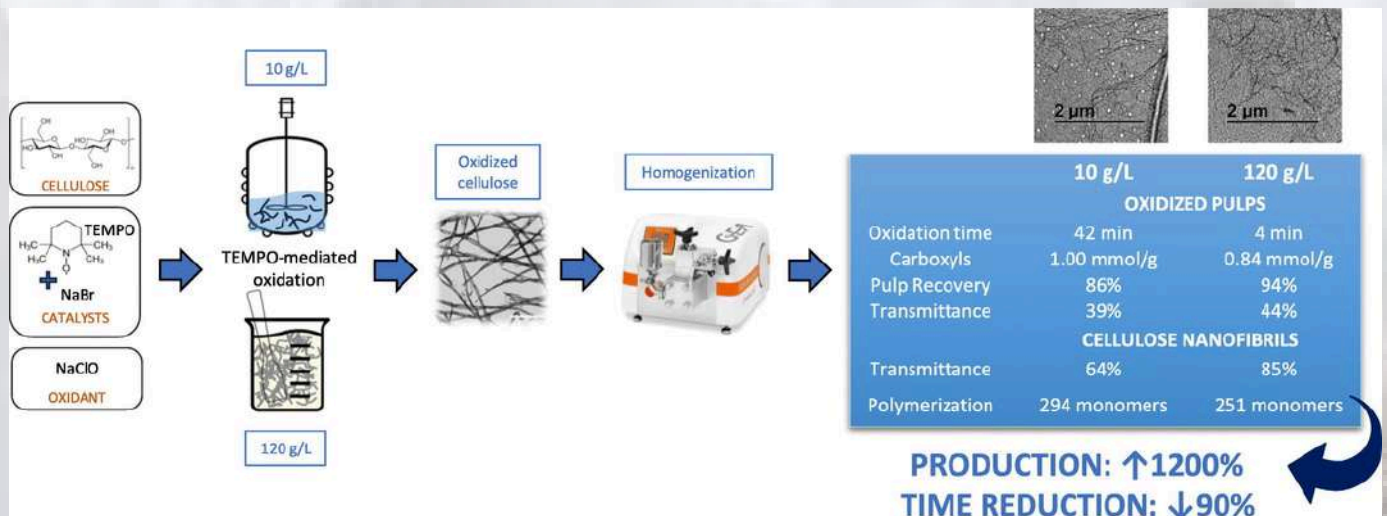
La investigación de esta doctoranda tiene como objetivo hacer que el proceso de producción de CNF sea más rápido y barato y minimizar su impacto ambiental, facilitando su implementación a gran escala. Las CNFs pueden ser producidas a partir de subproductos agrícolas y forestales. Se producen a través de procesos mecánicos como la homogeneización a alta presión, que descomponen la estructura de celulosa de macro a nanoscale. Este proceso intensivo en energía requiere pretratamientos como la oxidación mediada por **TEMPO (TMO)**. TMO reduce el consumo de energía, pero el TEMPO es costoso y es una sustancia peligrosa que puede causar daño a los ecosistemas acuáticos.

NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



Uno de los logros más destacados es la reducción de las dosis de catalizador en un 75% para TEMPO y un 50% para NaBr, lo cual es clave para disminuir tanto los costos como el impacto ambiental. Además, la eficiencia del proceso ha mejorado considerablemente, reduciendo el tiempo de reacción de 2 horas a solo 50 minutos o incluso 4 minutos, sin afectar la calidad de la CNF medida a través del grado de fibrilación.

Otro avance importante ha sido la reutilización del 75% del medio de reacción en el proceso TMO, lo que contribuye a minimizar los efluentes residuales y hace que el proceso sea más sostenible. Para mejorar aún más la sostenibilidad, se desarrolló un catalizador magnético, lo que permite recuperar fácilmente el catalizador TEMPO del medio de reacción mediante un campo magnético externo.



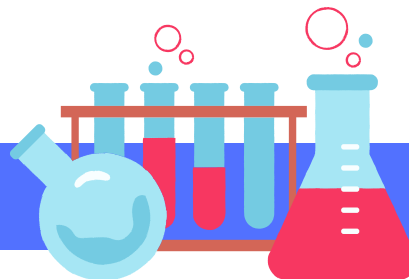
Enhancement of the production of TEMPO-mediated oxidation cellulose nanofibrils by kneading.

Sánchez-Salvador et al. *Int. J. Biol. Macromol.* (2024)

Y ¿qué impacto tendrá esta investigación?

El uso de la tecnología CNF en diversas aplicaciones tiene el potencial de generar beneficios económicos al aumentar el valor y la funcionalidad de los productos. Los resultados obtenidos muestran una reducción significativa en la cantidad de productos químicos necesarios en el proceso TMO, lo que no solo reduce los costos de producción, sino que también disminuye el consumo de energía, haciendo que la producción de CNF a gran escala sea más económicamente viable.

ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



CONGRESO DE INVESTIGACIÓN DE ESTUDIANTES



XVII Congreso de Investigación de Estudiantes de Grado en Ciencias de la Salud
 XXI Congreso de Ciencias Veterinarias y Biomédicas
 II Congreso de Ciencias Experimentales en el Campo de la Salud

3 al 5 de abril de 2025

Lugar de celebración: Facultades de Enfermería, Fisioterapia y Podología, Medicina, Farmacia y Odontología




CREAR CONOCIMIENTO IMPULSA FUTURO

El 25 de enero se abrirá el plazo de inscripciones para el XVII Congreso de Investigación de Estudiantes de Grado en Ciencias de la Salud, el XXI Congreso de Ciencias Veterinarias y Biomédicas y el II Congreso de Ciencias Experimentales en el Campo de la Salud. Tendrá lugar del 3 al 5 de abril de 2025. Está dirigido a estudiantes de titulaciones relacionadas con estas áreas de cualquier Universidad.

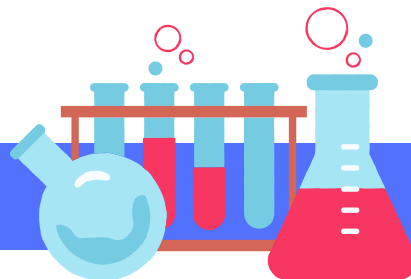
Los estudiantes podrán asistir y/o presentar trabajos de investigación (clínica, básica o revisión bibliográfica) en cualquier tema relacionado con la Salud. Los trabajos deberán ser tutorizados por profesores/as de Universidad.

Este año la lección inaugural será impartida por **Sara García Alonso**, investigadora del CNIO y seleccionada como astronauta por la Agencia Espacial Europea.



Saber más: [Congreso de Estudiantes](#)

ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN EN LA FACULTAD DE CIENCIAS QUÍMICAS (ENERO-MAYO 2025)

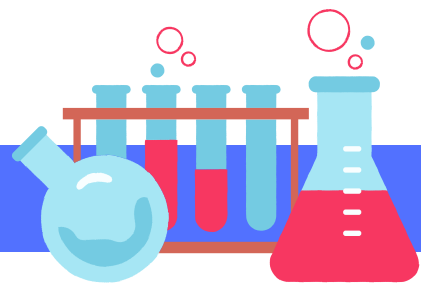


ACTIVIDADES 2025
Facultad de Ciencias Químicas UCM

FEBRERO ☉	"LA QUÍMICA QUE SE LEE" Encuentro con <i>Adela Muñoz Páez</i> , autora del libro <i>"La Tabla periódica"</i>
ABRIL	2ª Feria de Empleo de la Facultad de C.C. Físicas y 1ª Feria de Empleo de la Facultad de C.C. Químicas
ABRIL	II Congreso de Ciencias Experimentales en el Campo de la Salud
ABRIL	Jornada de presentación del Máster "Química de Materiales para el Futuro"
MAYO ☽	"LA QUÍMICA QUE SE LEE" Encuentro con <i>Álvaro Martínez Camarena</i> , autor del libro <i>"Historia de los metales que cambiaron el mundo"</i>
MAYO ☽	III Certamen de Proyectos Educativos de Química Charla divulgativa de <i>María Blanch Rojo</i> , Fac. Veterinaria, UCM


 FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS

ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



EXPOSICIÓN "50 ANIVERSARIO: DE SECCIÓN A FACULTAD"

Coincidiendo con el acto de celebración del 50 aniversario, inauguramos la exposición en la que podrás conocer la historia de la Facultad: los acontecimientos más importantes que se produjeron en el año 1974, el año en que nació la facultad, la evolución de sus edificios, la docencia de antes y de ahora, y curiosidades como las series y películas que se rodaron en nuestras instalaciones o el instrumental de laboratorios que se usaba antiguamente. Y muchas cosas más. Puedes encontrar la exposición distribuida por los pasillos que rodean el Aula Magna y en la sala de exposiciones de la Biblioteca.



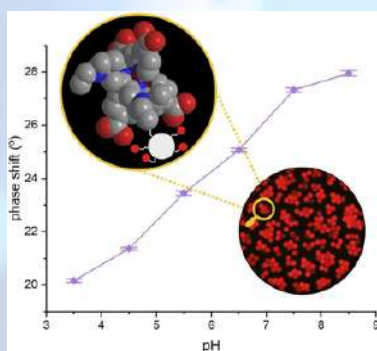
LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



Wide range luminescence lifetime-based pH sensing with covalently immobilized multi-protonatable Ru(II) complexes

Ya Jie Knöbl, Maximino Bedoya, Alexander Farquharson, Patrick Courtney, Guillermo Orellana

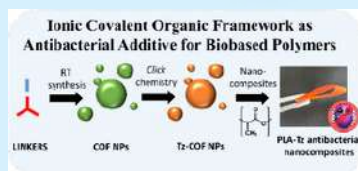
Para superar las limitaciones de los sensores ópticos de pH, cuya respuesta es de sólo una unidad de pH en torno al valor pKa del colorante indicador, y aprovechar las ventajas de los complejos de Ru(II) luminiscentes en el rojo para la detección óptica, se han desarrollado por primera vez miembros de esta familia con múltiples centros ácidos y básicos. Los ligandos bipyridínicos con grupos protonables (aminas y carboxilatos) han sido la base para diseñar y preparar los indicadores de rango extendido (pH 3,5 a 9,0). El complejo $[\text{Ru}(\text{DCB})_2(\text{DEAMB})]$, donde DCB y DEAMB significan 2,2'-bipiridina-4,4'-dicarboxilato y 4,4'-(N,N-dietilaminometil)-2,2'-bipiridina, respectivamente, muestra un cambio monotónico reversible de su longitud de onda de emisión máxima (648 - 634 nm), de su intensidad de luminiscencia (1,40X) y de su tiempo de vida de emisión (335 - 429 ns) en disolución con el aumento de pH. Este complejo y otros similares se fijaron covalentemente a microesferas de polímero TentaGel® M-Br para realizar medidas de pH por desplazamiento de fase de luminiscencia con fibra óptica. El $[\text{Ru}(\text{DCB})_2(\text{DEAMB})]$ inmovilizado muestra la mayor sensibilidad al pH en dicho intervalo. La estabilidad de este sensor fue muy satisfactoria. Los cambios del tipo de regulador del pH, de la concentración del mismo y de su osmolaridad no influyeron significativamente en la respuesta del sensor; sin embargo, grandes variaciones del oxígeno disuelto y, naturalmente, de la temperatura requieren una corrección de la respuesta de los sensores correspondientes. El novedoso y robusto sensor luminiscente de pH se ha probado con éxito para la monitorización de cultivos celulares en biorreactores comerciales, pero su respuesta también sería adecuada para la monitorización in situ de aguas naturales.



Sensors and Actuators B: Chemical 2025, 425, 15, 136960
<https://doi.org/10.1016/j.snb.2024.136960>

Ionic Covalent Organic Framework as Antibacterial Additive for Biobased Polymers

Miguel Jiménez-Duro, Rosa Barranco-García, Marcos Martínez-Fernández, Belén Asenjo-Filgueira, José I. Martínez, Rocío Cuervo-Rodríguez, Alexandra Muñoz-Bonilla, Marta Fernández-García, José L. Segura



ACS Appl. Mater. Interfaces 2024, 16, 51, 70883
<https://doi.org/10.1021/acsami.4c16938>

El aumento de bacterias resistentes a los antibióticos ha creado una necesidad urgente de materiales antibacterianos. Una de las estrategias más extendidas consiste en la unión covalente de moléculas iónicas, lo que, sin embargo, puede comprometer la calidad de los polímeros finales. En este trabajo se presenta la síntesis de nanopartículas de marco orgánico covalente iónico mediante modificación postsintética. El material es altamente dispersable y presenta excelentes propiedades antibacterianas frente a bacterias Gram-positivas y Gram-negativas. Además, se produjeron nanocompuestos de polímero/COF de base biológica mediante compresión por fundición y electrospinning por fundición, conservando las propiedades antibacterianas sin sacrificar la estabilidad térmica de los polímeros. En nuestros laboratorios se está estudiando la posible aplicación de estos compuestos en dispositivos biomédicos.

LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



Structural Snapshots of Reversible Carbon Dioxide Capture and (De)oxygenation at Group 14 Diradicaloids

Falk Ebeler, Beate Neumann, Hans-Georg Stammler, **Israel Fernández**, Rajendra S. Ghadwal

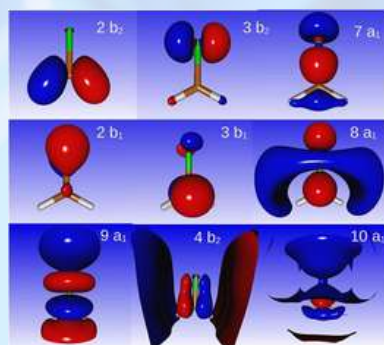


J. Am. Chem. Soc. 2024, 146, 50, 34979–34989
<https://doi.org/10.1021/jacs.4c15062>

Aunque los diradicales deberían presentar una barrera de reacción bastante pequeña en comparación con las especies de cáscara cerrada para activar moléculas cinéticamente inertes, la activación y funcionalización del dióxido de carbono con diradicales estables del grupo principal siguen estando prácticamente inexploradas. En este trabajo, presentamos un estudio exhaustivo sobre la activación, captura reversible y (des)oxigenación de CO_2 mediada por diradicales singlete estables del Grupo 14 (es decir, diradicaloides) $[(\text{ADC})\text{E}]_2$ ($\text{E} = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Sn}$) basados en una estructura de dicarbena aniónico (ADC). Los $[(\text{ADC})\text{E}]_2$ se someten fácilmente a $[4 + 2]$ -cicloadiciones con CO_2 para dar lugar a bis-metalilenos tipo barrileno $[(\text{ADC})\text{E}]_2(\text{OC}-\text{O})$. Las estructuras moleculares de todos los compuestos aislados se han establecido mediante difracción de rayos X, y se ha sugerido una visión mecanicista de su formación mediante cálculos DFT.

Photodissociation of the CH_2Cl radical: A high-level *ab initio* study

F. Charfeddine, O. Yazidi, A. Zanchet, **L. Bañares**, A. García-Vela



J. Chem. Phys. 2024, 161, 234304
<https://doi.org/10.1063/5.0243800>

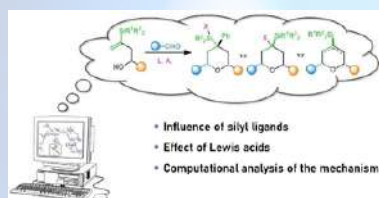
Se investiga la fotodisociación del radical CH_2Cl utilizando métodos *ab initio* de interacción de configuraciones multireferencia de alto nivel, incluyendo el acoplamiento espín-órbita. Se han analizado todas las posibles vías de fragmentación, a saber, $\text{CH}_2\text{Cl} + h\nu \rightarrow \text{CH}_2 + \text{Cl}$, $\text{HCCl} + \text{H}$, y $\text{CCl} + \text{H}_2$. Se han calculado las curvas de potencial-energía del estado básico y de varios estados electrónicos excitados a lo largo de la correspondiente distancia de enlace de disociación de cada vía. La inclusión de los acoplamientos espín-órbita resulta crucial porque determina en gran medida la forma de las curvas de los distintos estados excitados y, por tanto, su comportamiento en la dinámica de fotodisociación. El análisis de las curvas de potencial indica que las vías que producen $\text{CH}_2 + \text{Cl}$ y $\text{HCCl} + \text{H}$ pueden ocurrir a través de un mecanismo rápido de disociación directa, mientras que la vía que conduce a $\text{CCl} + \text{H}_2$ implica mecanismos de disociación mucho más lentos, como la conversión interna entre estados electrónicos, la predisociación o la tunelización a través de barreras de salida. Las principales implicaciones son que se predice que los dos canales más rápidos son dominantes, mientras que se espera que la vía más lenta sea muy poco probable y bastante irrelevante. Existen flujos actínicos apreciables de irradiación solar a altitudes estratosféricas donde abunda el ozono, en el rango de longitudes de onda donde se ha observado experimentalmente la absorción de los primeros estados excitados de baja altitud del CH_2Cl . Nuestros resultados muestran que en este rango de energía de excitación, las dos vías de disociación dominantes mencionadas anteriormente están abiertas y entonces podrían contribuir al agotamiento del ozono estratosférico.

LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



Insight into the Key Factors that Influence the Reaction Pathways in the Silyl-Prins Cyclization of gem-Vinylsilyl Alcohols

Paula González-Andrés, Carlos Díez-Poza, Laura F. Peña, **Daniel González-Pinardo**, **Israel Fernández**, Asunción Barbero

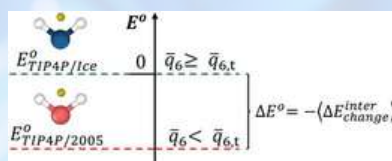


Advanced Synthesis & Catalysis 2024
<https://doi.org/10.1002/adsc.202401437>

Este trabajo proporciona un análisis en profundidad de los factores que rigen las distintas vías de reacción en la ciclización catalizada por ácido de alcoholes gem-vinilsilícicos con aldehídos. El estudio evalúa el impacto tanto de los ligandos unidos al silicio como de la elección del ácido de Lewis en el resultado de la reacción. Además, los estudios computacionales ofrecen información valiosa sobre los mecanismos que controlan estas distintas vías. El proceso permite la formación quimio y estereocontrolada de una variedad de marcos estructurales, ofreciendo un potencial significativo para la generación de una amplia gama de arquitecturas moleculares.

TIP4P^{Ice}₂₀₀₅: Simulating water with two molecular states

Lucía F. Sedano, Carlos Vega, Eva G. Noya, **Eduardo Sanz**



J. Chem. Phys. 2025, 162, 014502
<https://doi.org/10.1063/5.0247832>

Los modelos de agua rígidos y no polarizables son muy eficientes desde el punto de vista computacional, y algunos de ellos tienen una gran capacidad para predecir propiedades experimentales. Sin embargo, hay poco margen de mejora en la simulación del agua con esta estrategia, cuyo principal defecto es que las moléculas de agua no cambian sus parámetros de interacción en respuesta al paisaje molecular local. En este trabajo, proponemos una novedosa estrategia de modelado que consiste en utilizar dos modelos rígidos no polarizables como estados que las moléculas de agua pueden adoptar en función de su entorno molecular. Durante la simulación, las moléculas pasan dinámicamente de un estado a otro en función de un parámetro de orden local que cuantifica alguna característica estructural local. En concreto, las moléculas pertenecientes a entornos de orden tetraédrico bajo y alto se representan con los modelos rígidos TIP4P/2005 y TIP4P/Ice, respectivamente. De este modo, la interacción entre las moléculas de agua se refuerza cuando adquieren una coordinación tetraédrica, lo que puede considerarse una forma eficaz de introducir efectos de polarización. Llamamos al modelo resultante y demostramos que supera a cualquiera de los modelos rígidos que lo construyen. Esta estrategia multiestado sólo ralentiza las simulaciones en un factor de 1,5 en comparación con el uso de un modelo estándar no polarizable y resulta muy prometedora para mejorar las simulaciones de agua y soluciones acuosas.

DIVULGAR PARA EDUCAR



CHEMESCAPE

El "[JungChemikerForum](#)" (JCF) es la organización juvenil de la Sociedad Alemana de Química, cuyo principal objetivo es establecer una conexión entre universidades, escuelas, industrias y el público. El equipo de "Ciencia y Educación" ha creado un [ChemEscape](#) con sencillos experimentos, con el que quieren animar a los jóvenes a estudiar la química.



**¿SERÁS EL
PRIMERO EN
ENCONTRAR LA
SOLUCIÓN?**

BOLETÍN DE DIVULGACIÓN. N° 31

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



Fotografía: Elena Espada Bernabé



FACULTAD DE
CIENCIAS QUÍMICAS
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID