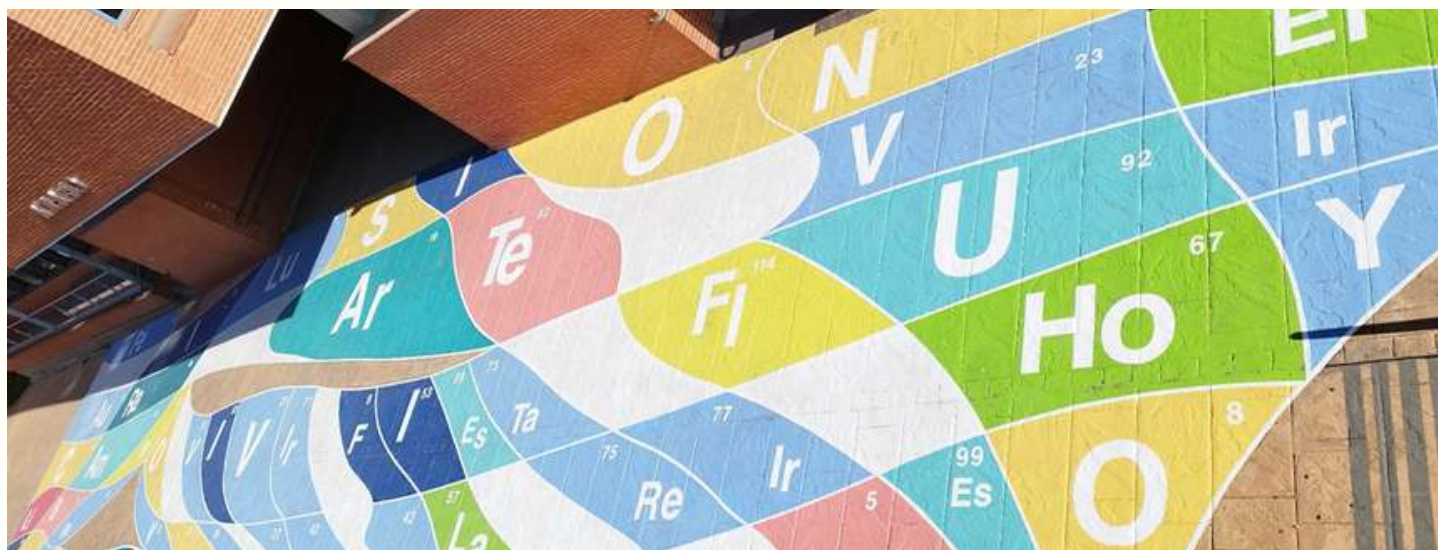


# BOLETÍN DE DIVULGACIÓN

Facultad de Ciencias Químicas. UCM



## Junio, y otro curso más

*Belén Yélamos López*  
Vicedecana de Ordenación Académica, Biblioteca y  
Divulgación

En este número nos hacemos eco de la reciente publicación del grupo de investigación del Prof. Nazario Martín, del Dpto. de Química Orgánica sobre el descubrimiento de una nueva molécula que puede representar un gran avance en el diseño de materiales avanzados.

Un año más hemos celebrado en la facultad la Jornada del II Certamen de Proyectos Educativos de Química, en la que disfrutamos de los proyectos presentados por centros educativos de la Comunidad de Madrid.

Hemos creado una nueva sección, “Historia de la Química”, en la que el Prof. José M. Gómez nos habla esta vez de moda, y de un color que simbolizaba el poder, el negro ala de cuervo.

¡Qué disfrutéis de la lectura!

### EN ESTE NÚMERO

**NOTICIAS.....2**

**LIBROS DE  
DIVULGACIÓN.....4**

**ACTIVIDADES DE  
DIVULGACIÓN.....5**

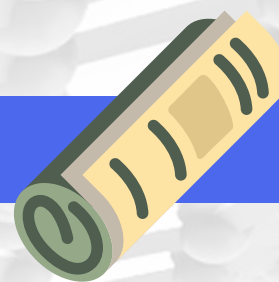
**HISTORIA DE LA  
QUÍMICA.....13**

**LA INVESTIGACIÓN EN LA  
FACULTAD .....17**

**DIVULGAR PARA  
EDUCAR.....25**

¿Quieres divulgar con nosotros?  
Envíanos tus ideas a  
**[vddivulgacionquim@ucm.es](mailto:vddivulgacionquim@ucm.es)**

# NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



## UN GRUPO DE INVESTIGACIÓN DE QUÍMICAS ABRE NUEVAS FRONTERAS EN LA CREACIÓN DE MATERIALES DEL FUTURO

Nazario Martín, Juan Lión-Villar, Jesús M. Fernández-García  
Dpto. Química Orgánica

Un equipo de científicos liderado por **Nazario Martín**, catedrático de Química Orgánica en la Universidad Complutense de Madrid (UCM), ha logrado un avance pionero que podría revolucionar el diseño de materiales avanzados, con aplicaciones en electrónica, energía y nanotecnología. El trabajo, publicado en la prestigiosa revista ***Nature Chemistry***, sitúa a la ciencia española a la vanguardia de la investigación interdisciplinar.

### ¿Qué han descubierto?

El equipo ha diseñado y creado una molécula de grafeno bicapa a escala molecular, algo nunca conseguido. Esta molécula se compone de **dos láminas de nanografeno**, una versión a nanoescala del material grafeno, unidas de forma precisa con un ángulo de giro controlado entre ellas. Lo asombroso es que esta pequeña rotación entre capas permite modular sus propiedades electrónicas de forma extraordinaria, imitando un fenómeno cuántico conocido en los materiales bidimensionales (2D).

En concreto, los investigadores han conseguido que esta molécula pueda mantener una separación estable de carga eléctrica entre capas, algo muy difícil de lograr con compuestos orgánicos. Es como si esta pequeña estructura molecular se comportara como un "mini dispositivo electrónico" programable desde su misma arquitectura.

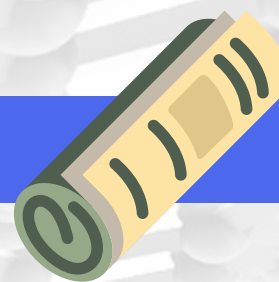
### ¿Por qué es importante el ángulo?

En los últimos años, se descubrió que si se apilan dos capas de grafeno con una ligera rotación entre ellas —lo que se conoce como el "ángulo mágico"—, el material puede adquirir propiedades insólitas como la superconductividad (conducción de electricidad sin resistencia) o convertirse en semiconductores, clave para fabricar chips.

Lo que ha conseguido el equipo español es replicar ese fenómeno en una sola molécula, algo que hasta ahora parecía impensable. Han creado una especie de "grafeno molecular con bisagra", donde se puede controlar el ángulo entre capas y, por tanto, su comportamiento electrónico.

El trabajo ha sido fruto de tres años de colaboración internacional, con participación clave de investigadores de la UCM como **Juan Lión-Villar** —que presentó su tesis doctoral sobre este tema— y **Jesús M. Fernández-García**, además de **Josefina Perles** del CSIC, y laboratorios en Japón y Singapur.

# NOTICIAS DE DIVULGACIÓN



## ¿Qué aplicaciones puede tener este descubrimiento?

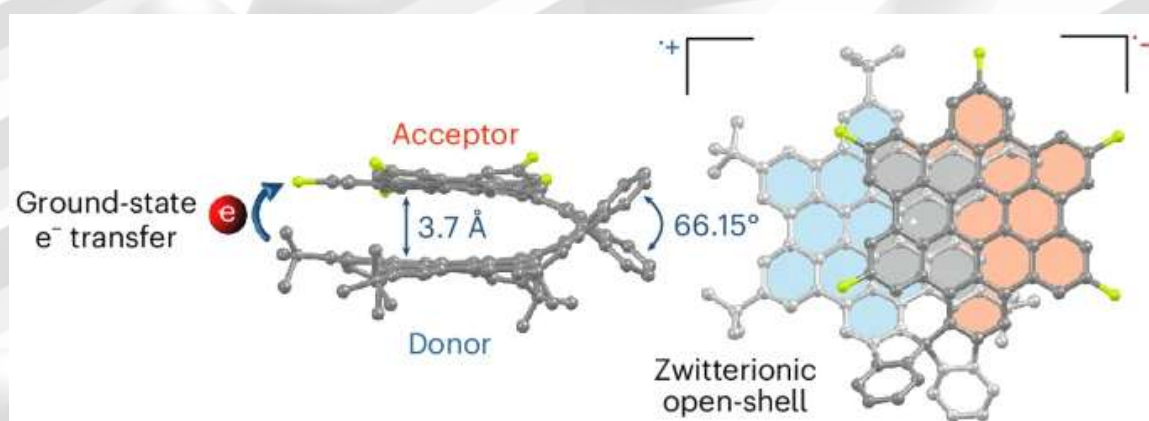
Este descubrimiento tiene enormes implicaciones para el futuro de muchas tecnologías. Algunas posibles aplicaciones son:

- Electrónica molecular: Crear dispositivos a nanoescala con propiedades personalizadas, más pequeños y eficientes que los actuales chips de silicio.
- Baterías y almacenamiento de energía: Diseñar materiales que permitan una mejor gestión de la carga eléctrica.
- Sensores avanzados: Detectores ultrasensibles capaces de captar señales mínimas gracias a su arquitectura electrónica ajustable.
- Nanodispositivos programables: Sistemas que cambian de función según su orientación o estado electrónico, abriendo las puertas a una nueva generación de materiales inteligentes.

## Impacto en la sociedad

Aunque se trata de una investigación básica, su impacto futuro podría ser tan profundo como el del propio grafeno, que ya ha transformado sectores como la electrónica, los materiales compuestos o la medicina.

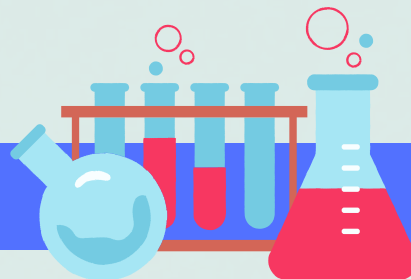
Este tipo de avances sientan las bases para una nueva generación de tecnologías moleculares, donde los materiales se diseñan átomo por átomo, capa por capa, con una precisión impensable hace solo una década. La posibilidad de controlar el comportamiento electrónico de una molécula con semejante exactitud no solo es un hito científico, sino una puerta abierta hacia una era de materiales inteligentes y personalizados.



**Saber más:** Tribuna Complutense; Nature Chemistry.



# ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



## III CERTAMEN DE PROYECTOS EDUCATIVOS DE QUÍMICA



El pasado 30 de mayo, la Facultad de Ciencias Químicas de la Universidad Complutense de Madrid se convirtió en epicentro del talento joven y la divulgación científica con la celebración de la Jornada del III Certamen de Proyectos Educativos de Química. Ocho centros de la Comunidad de Madrid, divididos en dos categorías, ESO y Bachillerato, fueron recibidos por la Decana de la facultad, **M. Teresa Villalba** y presentaron sus trabajos en formato oral y con pósteres científicos ante un jurado experto.

El evento, contó con la participación de la profesora y divulgadora **María Blanch**, de la Facultad de Veterinaria de la UCM, quien ofreció una inspiradora charla titulada "**Tecnología de los alimentos: magia, ciencia y divulgación**". En ella compartió su experiencia como comunicadora científica y las iniciativas que impulsa desde la Unidad de Cultura Científica de Veterinaria.

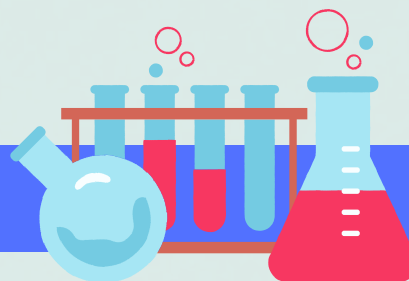


### Química para salvar el planeta

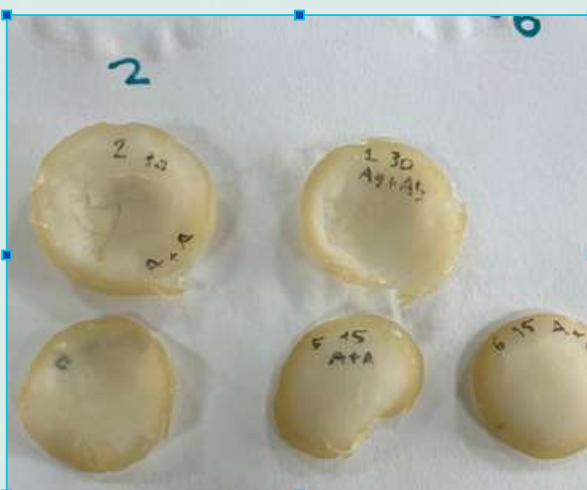
La sostenibilidad y la lucha contra la contaminación protagonizaron muchas de las propuestas presentadas por los estudiantes. Entre ellas destacaron las iniciativas del **IES San Cristóbal de los Ángeles** y el **IES Gerardo Diego**, centradas en la síntesis de bioplásticos como alternativa a los convencionales. Por su parte, el colegio **GSD Las Suertes** propuso el uso de ferrofluidos para purificar el agua, mientras que el **Colegio Gondomar** desarrolló un fotocatalizador capaz de degradar contaminantes atmosféricos.

La versatilidad de la química también se reflejó en otros proyectos. El **IES Francisco Umbral** estudió las propiedades absorbentes de la sepiolita, un mineral común en lechos para mascotas, y el **IES Juana de Castilla** exploró las reacciones químicas responsables de la fluorescencia.

# ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



IES San Cristóbal de los Ángeles



IES Gerardo Diego



GSD Las Suertes



IES Gerardo Diego

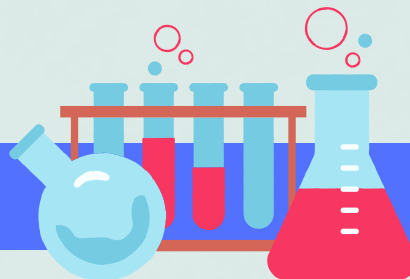


IES Francisco Umbral



IES Juana de Castilla

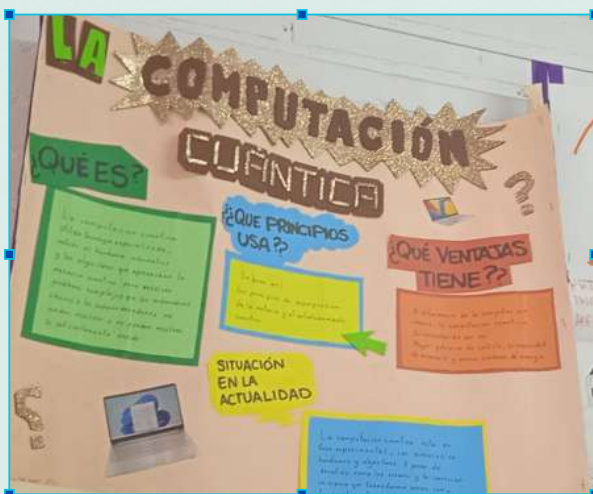
# ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



## La cuántica llega al aula

En un año marcado por la conmemoración del Año Internacional de la Ciencia y la Tecnología Cuántica, el **IES María de Molina** no dejó pasar la ocasión para acercar esta disciplina a los más jóvenes. Sus alumnos de 2º, 3º y 4º de la ESO diseñaron actividades didácticas que explican desde la computación cuántica hasta las comunicaciones seguras que hoy ya forman parte de nuestro día a día.

Por su parte, el **IES Antonio Gala** presentó un interesante estudio sobre los efectos del consumo de bebidas carbonatadas en la salud, cerrando así un programa variado y de gran calidad científica.



IES María de Molina



IES Antonio Gala

## PREMIADOS CATEGORÍA A

### MEJOR PROYECTO



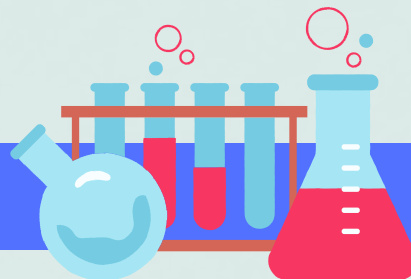
**IES FRANCISCO UMBRAL**  
¿Qué tienen en común la protección del medioambiente y la higiene felina?

### MEJOR PÓSTER



**IES SAN CRISTÓBAL DE LOS ÁNGELES**  
Estudio de la formación de un biopolímero a partir de la caseína de la leche

# ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



## FINALISTAS



**IES MARÍA DE MOLINA**  
Del gato de Schrödinger a la  
computación cuántica"



**GSD LAS SUERTES**  
Atrayendo un mundo más limpio

## PREMIADOS CATEGORÍA B

### MEJOR PROYECTO



**COLEGIO GONDOMAR**  
Síntesis de un fotocatalizador híbrido  
 $\text{TiO}_2$ /biocarbón obtenido a partir de  
residuos de piña

### MEJOR PÓSTER



**IES ANTONIO GALA**  
¿Cómo afecta a la salud el consumo de  
bebidas carbonatadas?

## FINALISTAS

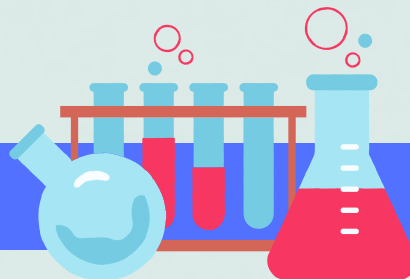


**IES GERARDO DIEGO**  
síntesis de bioplásticos a partir de  
fuentes renovables



**IES JUANA DE CASTILLA**  
Reacciones químicas con luz propia.  
Luz y fluorescencia.

# ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



**Mercedes Echaide**, asesora del Vicerrectorado de Estudiantes para la orientación universitaria y el aprendizaje colaborativo, clausuró esta jornada que fue un auténtico escaparate del talento científico de las nuevas generaciones. El entusiasmo, la creatividad y el rigor con el que los estudiantes presentaron sus proyectos reflejaron el compromiso de profesores y centros educativos por acercar la ciencia a las aulas. Esperamos que muchos de ellos sean parte de la UCM en un próximo futuro.

Muchas gracias a todos los centros participantes en esta tercera edición y os esperamos en la siguiente. Y agradecer a todas las entidades colaboradoras su apoyo para que esta jornada haya tenido lugar y al jurado de esta edición que lo ha tenido francamente difícil por la alta calidad de los proyectos presentados.

*Con el apoyo y la colaboración de:*

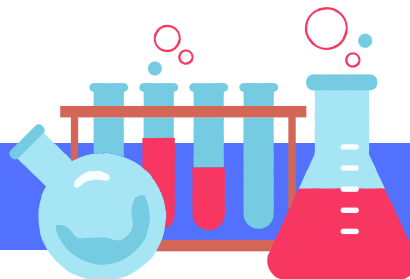


Vicerrectorado de Estudiantes  
Unidad de Orientación y Difusión



**¡Hasta la próxima!**

# ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN

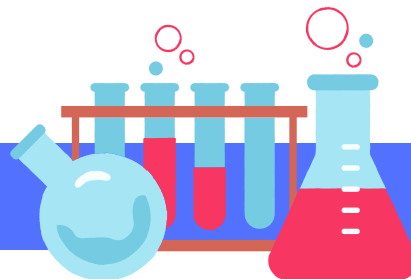


## CONCURSO FOTOCORR 2025 MATERLAND

El proyecto de Divulgación de Materiales [Materland](#) ha convocado el concurso FOTOCORR (fotografías de corrosión por el *Corrosion Awareness Day*) en el que la fotografía «**LAS CADENAS DEL TIEMPO**», realizada por el profesor [Raúl Arrabal](#), del Dpto. de Ingeniería Química y de Materiales, ha conseguido el premio del Jurado.



# ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



## VI SIMPOSIO ACIERTAS-COSCE

**ACIERTAS** (Aprendizaje de las Ciencias por Indagación en Redes Transversales colaborativAS) es un proyecto educativo de la **COSCE** en el que se ofrece un espacio donde docentes de todas las etapas educativas (desde Educación Infantil a Bachillerato) comparten sus experiencias y pueden encontrar recursos elaborados por científicos para llevarlos al aula. El próximo 19 de junio se celebrará el VI Simposio ACIERTAS en el que se entregarán los Premios Aciertas a las experiencias presentadas por los docentes durante este curso. Querido docente: todavía estás a tiempo para presentar tus experiencias en el aula en [aciertas.org](https://aciertas.org) y participar en nuestros . La entrega de premios será en el Simposio Aciertas, 19 de junio a las 16h. Inscripciones para asistir al simposio, de entrada libre, en [aciertasred@gmail.com](mailto:aciertasred@gmail.com)

### VI Simposio ACIERTAS

Entrega de PREMIOS ACIERTAS 2025  
Jueves 19 de junio 2025, 16:00 h  
Salón de Actos. Centro de Ciencias Humanas y Sociales-CSIC. Albasanz, 26-28. 28037 Madrid

#### PROGRAMA

**16:00**  
Presentación a cargo de Juan José Vaquero, Tesorero de COSCE y Belén Yélamos López, coordinadora de ACIERTAS.

**16:10**  
**Proyecto I.amAble: laboratorios inclusivos para un aprendizaje compartido**  
Inmaculada Álvarez Serrano. Dpto. Química Inorgánica. Facultad de C.C. Químicas. UCM

**16:40**  
**La baraja cuántica: entrelazamiento y efecto túnel con una baraja de cartas**  
Ricardo García Muñoz, ingeniero de Telecomunicaciones y profesor de Tecnología en el IES Alameda de Osuna.

**17:10**  
**Presentaciones de las experiencias finalistas**

**18:00**  
**Entrega de premios ACIERTAS**

-  EXPERIENCIA MÁS INNOVADORA
-  EXPERIENCIA MÁS VALORADA POR LA COMISIÓN ACIERTAS
-  EXPERIENCIA CON MAYOR PARTICIPACIÓN DEL ALUMNADO

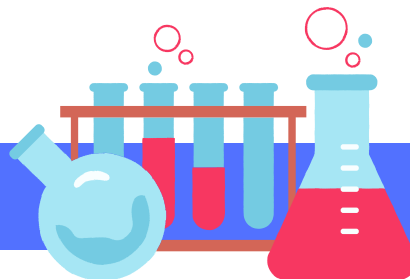
**18:20**  
Clausura del Simposio a cargo de Perla Wahnón, Presidenta de COSCE



INSCRÍBETE EN:



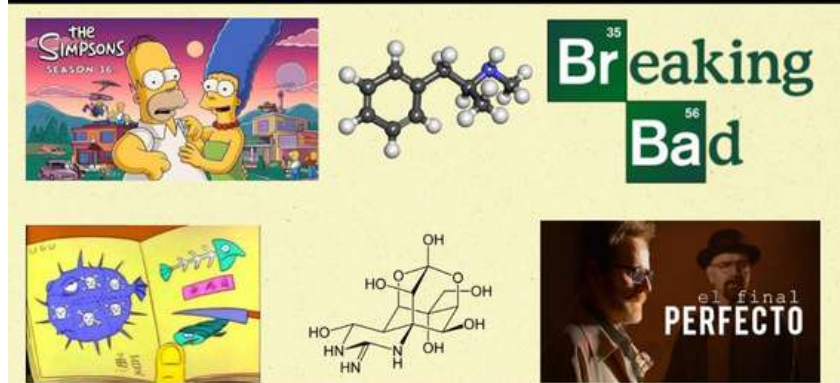
# ACTIVIDADES DE DIVULGACIÓN



## Conferencia LA QUÍMICA EN EL CINE Y EN LAS SERIES DE TELEVISIÓN: DE LOS SIMPSONS A BREAKING BAD.

Bernardo Herradón  
Doctor en Ciencias Químicas UCM-CSIC

**MARTES CULTURALES**

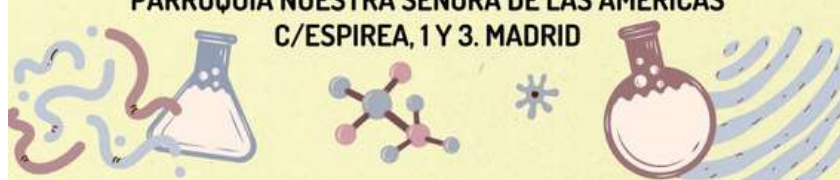


**LA QUÍMICA EN EL CINE Y  
TELEVISIÓN: DE LOS SIMPSONS A  
BREAKING BAD**

BERNARDO HERRADÓN  
INSTITUTO DE QUÍMICA ORGÁNICA GENERAL (IQOG-CSIC)

DÍA 17 DE JUNIO DE 2025  
A LAS 18,00H.

PARROQUIA NUESTRA SEÑORA DE LAS AMÉRICAS  
C/ESPIREA, 1 Y 3. MADRID



# HISTORIA DE LA QUÍMICA



## EL PALO CAMPECHE: LA MODA ESPAÑOLA EN NEGRO DE LA HEMATOXILINA

José M. Gómez

Dpto. Ingeniería Química y de Materiales



Carlos I, Felipe II y Felipe IV (Public domain, via Wikimedia Commons).

La imagen de los monarcas españoles de la Casa de los Austrias, siglos XVI al XVII, especialmente la de **Felipe II** (rey desde 1555 hasta su muerte en 1598), está unida a la sobriedad y austeridad que transmiten sus retratos, debido al color negro de sus vestimentas. Esa oscuridad en los retratos también fue utilizada como justificación de la Leyenda Negra (española, por supuesto). Sin embargo, ese color negro representaba poder económico, distinción social, lujo, exclusividad y elegancia. No todo el mundo tenía los recursos ni los medios para acceder a esas prendas negras, ya que conseguir un color negro tan intenso no era precisamente fácil ni barato. En la antigüedad, los colores eran indicativos del poder adquisitivo de quién los lucía (en la época romana, por ejemplo, el rojo bermellón era más caro que el azul egipcio), a semejanza de lo que ocurre actualmente con las marcas de moda.



La evolución de la vestimenta a través de los siglos: Un reflejo de la cultura y la sociedad. [Educahistoria](#).

# HISTORIA DE LA QUÍMICA



Conseguir ese color negro tan intenso no fue posible hasta la conquista de América, y se debió a un tinte vegetal presente en un árbol: el **Palo Campeche** o **Palo de Campeche**. Este árbol, que presenta un tronco retorcido y que puede llegar a medir hasta 15 metros, ha recibido muchos nombres. Los mayas, que ya lo usaban para tintar ropa y mantas, lo llamaban **ek**, los británicos lo conocieron como palo de tinte o palo de Campeche y para los españoles era el palo de tinta, palo Campeche o simplemente palo. Este árbol debe su nombre a la región en la que se encontró en el siglo XV, la región de Campeche en la península de Yucatán (actual México). Su nombre en la taxonomía linneana es *Haematoxylum campechianum* que significa “árbol sangrante de Campeche”, y se debe al color rojizo que muestra el árbol en su interior, de donde se sacan las astillas que darán lugar al tinte. Estas astillas se hervían para extraer el colorante, que podía ir, según la cantidad de astillas, desde un tono rojizo pasando por marrones y morados, hasta un negro profundo, que teñían las telas con enorme facilidad.



*Palo de Campeche (Kurt Stüber, CC BY-SA 3, via Wikimedia Commons).*

Pero el Palo Campeche no fue solo un tinte, significó mucho más. Apoyado en este tinte vegetal la corte de Felipe II impuso el negro como moda, consiguiendo que el resto de Europa replicara su estilo, que llegó a denominarse *vestir a la española*. El color que se obtenía en las telas era un negro irisado similar al color del ala de un cuervo, de ahí precisamente el nombre que tomó, y por el que ha pasado a la historia, **negro ala de cuervo**. Esta forma de vestir se contraponía al exceso mostrado en Inglaterra por Enrique VIII o por su hija Isabel I. El tinte del Palo de Campeche supuso una revolución en la industria textil europea, ya que su extracción era sencilla y permitía obtener productos de buena calidad y gran durabilidad, siendo muy demandados por las cortes europeas. Sin embargo, detrás de esta decisión en el modo de vestir había un motivo claramente económico, que supo aprovechar muy bien la monarquía hispánica. Si el Palo Campeche solo se encontraba en el Nuevo Continente, en manos de los monarcas españoles, eran ellos quienes tenían el monopolio de su venta y distribución en Europa y, por lo tanto, el desarrollo de la moda del negro ala de cuervo les permitió obtener enormes ganancias con su comercio. Por ello, la corona española lo declaró **producto estanco** (un producto cuya explotación pertenecía al estado) para la corta y distribución en 1556. Solo los barcos españoles tenían permitido su transporte a Europa.

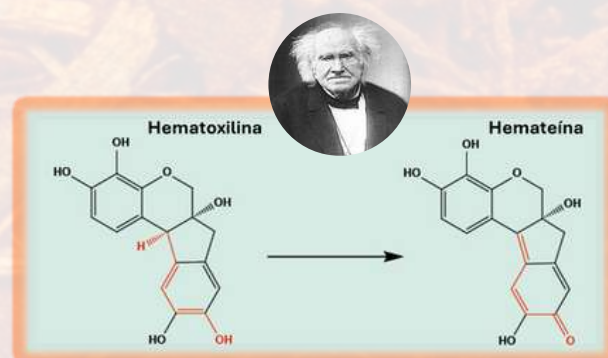
# HISTORIA DE LA QUÍMICA



Posteriormente hubo intentos de renovación del estanco, pero encontraron oposición ya que suponía un perjuicio para el comercio libre. Se produjo una especie de fiebre del Palo Campeche que supuso una tala excesiva y guerras comerciales (y no tan comerciales) con países como Francia, Inglaterra y Holanda que intentaban romper el monopolio español. Durante años fue uno de los productos más codiciado e importado de América. Alrededor de este producto también florecieron el contrabando y la piratería, con piratas que se dedicaban a robar y transportar toneladas de troncos de este árbol (no solo de oro y plata vivía el pirata).

El desarrollo de los tintes industriales sintéticos, como el **negro de anilina**, en el siglo XIX supuso un golpe importante al comercio del Palo de Campeche. No obstante, mantuvo cierta relevancia hasta 1920 como tinte negro para lanas, por su buena compatibilidad con este tipo de fibras. También se han mantenido algunas aplicaciones medicinales por sus propiedades astringentes, ya que se le atribuyen beneficios para tratar la diarrea, los cólicos y las úlceras. Actualmente, el Palo de Campeche es una especie en peligro de extinción debido a la extensa tala o quema que ha sufrido (y sufre) para obtener terrenos destinados al cultivo de caña de azúcar o a la cría de potros. También hay que tener en cuenta que al disminuir su uso no se realizó una reposición adecuada de árboles, a pesar de que son de crecimiento rápido.

El poder tintóreo del palo de Campeche proviene de una molécula llamada **hematoxilina** (del griego *hemato*, sangre y *xylos*, madera). La fórmula centesimal de esta molécula fue establecida por el químico francés **Michel Eugène Chevreul** en 1810. Sin embargo, la hematoxilina para que sea un tinte válido debe ser oxidada a **hemateína** (el verdadero tinte) y luego unida a iones metálicos, denominados **mordientes** (sustancias que sirve para fijar los colores en los productos textiles).



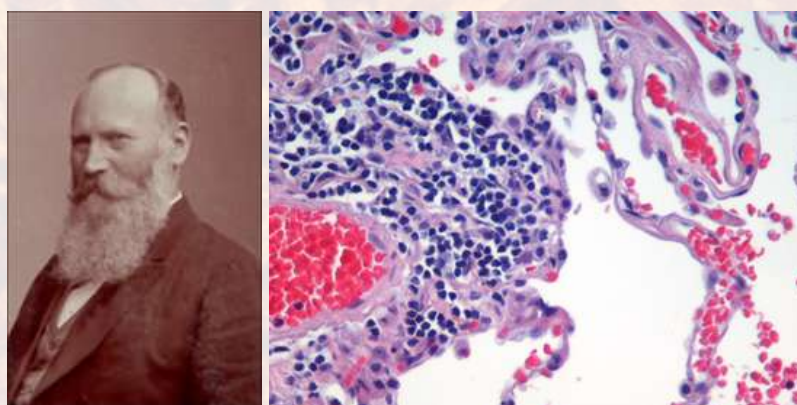
Estructura de la hematoxilina y la hemateína. M. E. Chevreul (Félix Nadar. Public domain)

La madera del corazón del tronco, cortada y triturada era fermentada (y oxidada) mediante ebullición en agua en perolas o pailas, obteniéndose una disolución de color rojizo. La hematoxilina, producida por descomposición de los glucósidos, se oxidaban posteriormente, por exposición al aire o mediante la adición de algún ácido débil, produciéndose hemateína y consiguiendo un color más intenso en la disolución. Finalmente, para obtener el color negro era necesario añadir vitriolo verde o caparrosa verde (sulfato de hierro) como mordiente a la disolución, o directamente a la tela antes de sumergirla en la disolución de hemateína.

# HISTORIA DE LA QUÍMICA



La hematoxilina también se ha utilizado en histología y citología para identificar diferentes tipos de células y tejidos, en la llamada tinción hematoxilina-eosina (**tinción H&E**). Se trata de una tinción en dos etapas: primero, una tinción nuclear con un colorante básico (hematoxilina), y luego una tinción citoplasmática con un colorante ácido xanténico (eosina). El primero en utilizarla fue **Wilhelm Waldeyer**, en 1863, y al que se le atribuye la demostración de que el ingrediente activo de la tinción era la hemateína producida por la oxidación de la hematoxilina. El palo de Campeche es uno de los muchos productos que se importaron de América. Resulta increíble la importancia que tuvo y lo poco conocido que es, llegando incluso a ser una pieza clave en el desarrollo de la biología celular.



Heinrich Wilhelm Gottfried Waldeyer (Julius Cornelius Schaarwächter, Public domain); Tinción hematoxilina y eosina (CC BY 2.0, Wikimedia)

## BIBLIOGRAFÍA

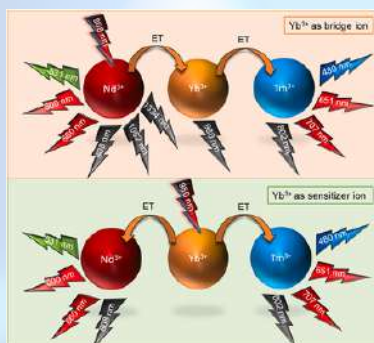
- El “Negro Ala de Cuervo” de la Monarquía Hispánica. Un tinte para la historia. María Isabel Hernández Figueroa.
- La historia contada para que se entienda. El Palo de Campeche: Monopolio textil del Imperio Español. Fran J. Saavedra Bauló, 2024.
- Ana Roquero. Técnicas tradicionales de tintorería en América.
- Los tejidos labrados de la España del siglo XVIII y las sedas imitadas del arte rococó en Minas Gerais (Brasil). Análisis formal y analogías. Tesis doctoral Antonio Fernando Batista dos Santos.
- La hematoxilina, de la sustancia a eje epistémico de las ciencias biológicas. German Isauro Garrido-Fariña.

# LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



## Impact of synthesis methods and coordination agents on the structure, morphology, and luminescent efficiency of triple-doped $\text{Nd}^{3+}$ $\text{Yb}^{3+}$ and $\text{Tm}^{3+}$ yttrium orthovanadate

**María Rapp, Elisa Ortiz-Rivero, Josefa Isasi, Mauricio Alcolea Palafox**

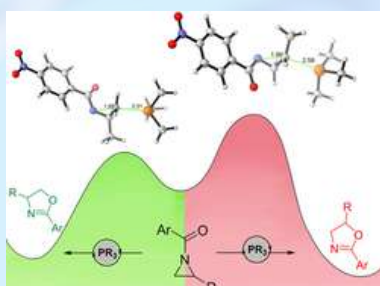


*Ceramics International* 2025, 51, 13  
<https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2025.01.583>

La investigación y el estudio de nuevos nanomateriales fluorescentes basados en iones lantánidos que puedan ser excitados por radiación infrarroja es esencial para el desarrollo de nuevas tecnologías en los campos de la biomedicina, la fotónica y la optoelectrónica. El presente trabajo se centra en el estudio estructural y morfológico de nuevas muestras de ortovanadato. También se analizaron sus propiedades ópticas, incluyendo la evaluación de los mecanismos de conversión ascendente (UC) y descendente (DS) bajo excitación infrarroja a 980 nm y 808 nm. Las muestras se sintetizaron utilizando tanto el método sol-gel como la síntesis hidrotérmica con adición de urea y ácido cítrico (CA) o ácido maleico (MA). Estas muestras se hicieron reaccionar con ortosilicato de tetraetilo (TEOS) para obtener muestras recubiertas de sílice. El análisis por difracción de rayos X (DRX) confirmó la simetría tetragonal compatible con una estructura de tipo circón del patrón de difracción. Los espectros FTIR revelaron bandas correspondientes a los diversos modos vibracionales de los grupos  $\text{VO}_4^{3-}$  y la presencia de sílice en las muestras tratadas con TEOS. El método de síntesis y la adición de CA o MA influyeron en la aglomeración, forma y morfología de las partículas, como evidenciaron las imágenes de microscopía electrónica de transmisión. Los estudios de fotoluminiscencia (PL) de las muestras investigadas tras ser excitadas con radiación infrarroja proporcionaron una descripción detallada de los mecanismos de transferencia de energía implicados en los procesos DS y UC.

## Mechanism and Origin of Regioselectivity in the Phosphine-Catalyzed Heine Reaction

Sebastián Gallardo-Fuentes, Lucas Lodeiro, **Israel Fernández**



*J. Org. Chem.* 2025, 90, 19, 6538–6548  
<https://doi.org/10.1021/acs.joc.5c00416>

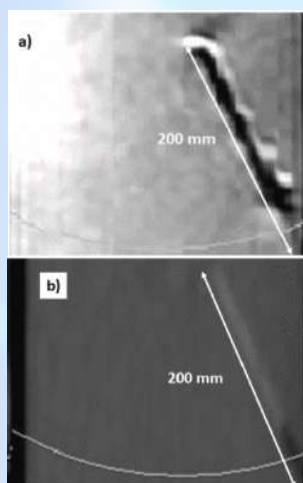
En este trabajo presentamos un estudio computacional exhaustivo del mecanismo de reacción y de los patrones de regioselectividad de la reacción de Heine catalizada por fosfinas en la que intervienen N-benzoylaziridinas. Los cálculos de teoría funcional de la densidad (DFT) revelan que la regioselectividad del proceso tiene lugar bajo control cinético, favoreciendo la formación de los correspondientes derivados de oxazolina 4-sustituidos. El análisis conformacional indica que la conformación predominantemente poblada del estado básico de la aziridina no representa la especie cinéticamente activa. La exploración del espacio conformacional en la región del estado de transición (ET) muestra que la vía preferida para el proceso nucleofílico de apertura del anillo implica una estructura ET en la que la fracción benzoílica adopta una disposición casi coplanar. Además, los principales factores que controlan la regioselectividad observada, así como el impacto de los sustituyentes en la reactividad, se racionalizan cuantitativamente utilizando el modelo de tensión de activación de la reactividad en combinación con el análisis de descomposición de la energía.

# LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



## NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>@SiO<sub>2</sub> superparamagnetic nanoparticles as contrast agents in image-guided adaptive brachytherapy (IGABT)

C. Ferrer, C. Huertas, J. Isasi, P. Arévalo, M. Alcolea, M. Sáez

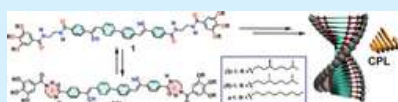


Radiation Physics and Chemistry 2025, 228, 112407  
<https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2024.112407>

Centrándonos en el estudio de muestras superparamagnéticas de óxido de hierro para aplicaciones como agentes de contraste, se describe aquí la utilidad potencial de la muestra NiFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>@SiO<sub>2</sub> como agente de contraste en tratamientos de braquiterapia adaptada guiada por imagen (IGABT). Esta muestra magnética se preparó mediante síntesis hidrotermal controlada con adición de urea y posterior reacción con TEOS utilizando el método Stöber. Los patrones de rayos X muestran máximos de difracción indexados a una simetría cúbica de S. G. Fd-3m con Z=8, compatible con una estructura de tipo espinela inversa. En las imágenes de TEM se observaron partículas de forma poliédrica con un tamaño de unos 21 ± 5 nm, junto con un recubrimiento homogéneo de sílice de 12,7 ± 1 nm de grosor. Se investigaron catéteres y agujas de plástico que contenían la muestra en una mezcla de solución de agarosa. Las imágenes obtenidas por resonancia magnética (RM), tomografía computarizada (TC) y rayos X del aplicador ovoide que contiene la muestra en mezcla de solución de agarosa, sugieren que esta muestra puede ser útil para visualizar la trayectoria de la fuente mediante la realización de una RM ponderada en T2 y sin necesidad de adquirir una imagen de TC. Este proceso reduce las incertidumbres debidas a los movimientos del paciente entre modalidades de imagen, así como el tiempo de procedimiento. Las imágenes de resonancia magnética y tomografía computarizada de las agujas intersticiales rellenas con esta solución a diferentes concentraciones confirman que también es adecuada para su uso como agente de contraste. Por último, la mezcla de muestra y agarosa investigada también se introdujo en un bloque de tejido porcino similar al humano para aproximarse a una experimentación «in vivo». Los resultados sugieren que la muestra estudiada puede ser útil en tratamientos IGABT y BT intraoperatoria en los que se implantan una serie de catéteres en la cavidad quirúrgica. Actualmente, los agentes de contraste utilizados no son visibles en el interior de las agujas de plástico. Nuestro estudio demuestra que no se introduce toxicidad en el sistema ya que la muestra está contenida dentro de los catéteres de plástico y nunca entra en contacto con el tejido.

## Supramolecular Polymerization of Biphenyl-Cyanostilbenes. Triggering Circularly Polarized Luminescence by Self-Assembly

Miguel Fernández, Lucía López-Gandul, Rafael Gómez, Luis Sánchez



Org. Lett. 2025  
<https://doi.org/10.1021/acs.orglett.5c01116>

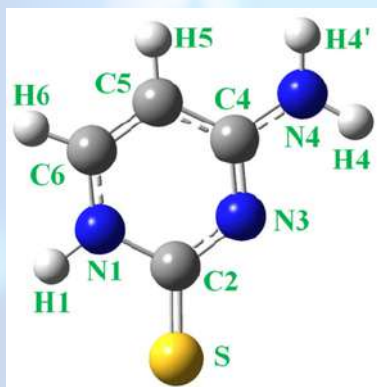
Presentamos la síntesis de una serie de ciano-luminógenos con fragmentos de cianostilbeno, unidades de benzamida y un núcleo de bifenilo no plano. Las unidades de benzamida impulsan la polimerización supramolecular, formando agregados helicoidales H mediante autoensamblaje controlado cinéticamente. Un experimento de sargento y soldado reveló una amplificación frustrada de la asimetría debido a la contaminación del dicroísmo lineal. La planarización de los sistemas centrales π-conjugados mejora la emisión inducida por agregación, dando lugar a agregados helicoidales con luminiscencia circular polarizada.

# LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



## The Effect of Sulphur Atom on the Structure of Biomolecule 2-Thiocytoosine in the Gas-Phase, Solid-State, and Hydrated Forms and in DNA-DNA Microhelices as Compared to Canonical Ones

C. Ferrer, C. Huertas, J. Isasi, P. Arévalo, M. Alcolea, M. Sáez

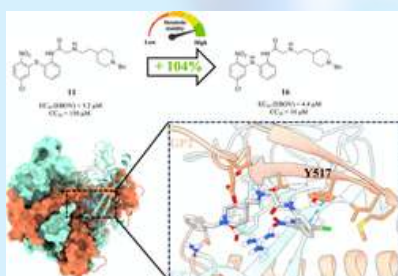


*Molecules* 2025, 30(3), 559  
<https://doi.org/10.3390/molecules30030559>

Este estudio se centra en los efectos del átomo de azufre en la posición 2 de la molécula de citosina, 2-tiocitosina (2TC), sobre los parámetros estructurales moleculares en estado aislado, así como en la hidratación, la disposición en estado sólido, los pares Watson-Crick y las microhélices ADN-ADN, en comparación con la forma canónica. Los seis tautómeros principales se optimizaron en los niveles MP2 y CCSD, y el átomo de azufre no muestra ningún efecto sobre la tendencia de estabilidad de la citosina. La diferencia de energía entre los tautómeros T2b y T2a es dos veces menor en la 2TC (1,15 kJ/mol) que en la citosina (2,69 kJ/mol). Los espectros IR y Raman láser del 2TC se asignaron con precisión utilizando cálculos DFT y simulaciones en estado sólido de la celda unitaria cristalina a través de varias formas de tetrámeros. Los resultados mejoran notablemente los publicados anteriormente por otros autores. Se analizó el efecto de las moléculas de agua explícitas que rodean al 2TC hasta 30, correspondientes a la primera y segunda cáscaras de hidratación, sobre las geometrías y el tautomerismo. Se observó que la estabilidad de los pares de bases Watson-Crick ( $\Delta ECP = -97,458$  kJ/mol) era menor que con la citosina ( $-105,930$  kJ/mol). El momento dipolar calculado también fue menor (4,205 D) que con la citosina (5,793 D). El efecto del 2TC sobre las microhélices optimizadas ADN-ADN 5'-dG-dC-dG-3' y 5'-dA-dC-dA-3' se evaluó a través de sus parámetros helicoidales calculados, lo que indica una clara deformación de la formación de la hélice. El radio (R) con 2TC parece considerablemente más corto (6,200 Å) en la microhélice 5'-dA-dC-dA-3' que con citosina (7,050 Å). Debido a las características especiales de la molécula de 2TC, puede utilizarse como medicamento contra el cáncer.

## From Diarylsulfides to Diarylamines: New Ebola Virus Entry Inhibitors with Improved Metabolic Stability

Marcos Morales-Tenorio, Fátima Lasala, Alfonso García-Rubia, Elnaz Aledavood, Michelle Heung, Catherine Olal, Beatriz Escudero-Pérez, Paola Oquist, **Ángeles Canales**, Covadonga Alonso, Ana Martínez, César Muñoz-Fontela, Rafael Delgado, Carmen Gil



*J. Med. Chem.* 2025  
<https://doi.org/10.1021/acs.jmedchem.5c00615>

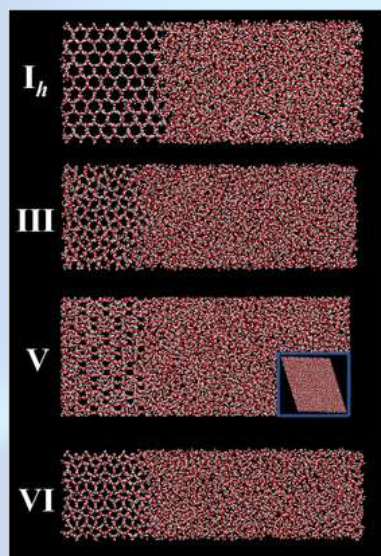
La persistencia de los brotes actuales de la enfermedad por el virus del Ébola (EBOV) y los retos que plantea la producción y administración de vacunas y tratamientos aprobados ponen de relieve la continua exploración de nuevas alternativas terapéuticas. En este contexto, este trabajo se centra en la optimización de diarilsulfuros previamente identificados como inhibidores de entrada del EBOV. Las modificaciones estructurales dieron lugar a derivados de diarilamina, con actividad antiviral confirmada frente al EBOV replicativo y una estabilidad metabólica significativamente mejorada en comparación con los diarilsulfuros. Utilizando diferentes técnicas, se identificó la glicoproteína del EBOV (EBOV-GP) como diana de estos compuestos. El residuo Y517 en GP2 es crítico para la actividad biológica, mientras que T519 (GP2), E100 (GP1) y D522 (GP2) también contribuyen a la unión del ligando. Además, se ha demostrado que la unión de los derivados a EBOV-GP desestabiliza el complejo con el receptor del virus NPC1. En resumen, se ha desarrollado una nueva familia de diarilsulfuros y diarilaminas con actividad antiviral contra el EBOV, y se ha descifrado su mecanismo de acción, allanando el camino para futuros desarrollos farmacéuticos.

# LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



## On the growth rate of ices: Effect of pressure and ice phase

S. Blazquez, E. Sanz

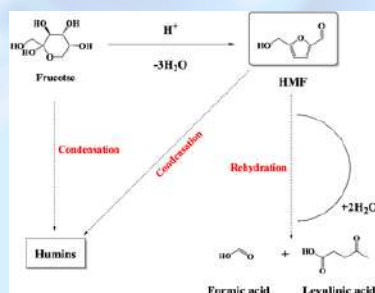


*J. Chem. Phys.* 162, 194501 (2025)  
<https://doi.org/10.1063/5.0265605>

El hielo, la fase sólida del agua, puede adoptar una amplia gama de estructuras, lo que le confiere interés tanto desde perspectivas fundamentales como aplicadas. En este estudio, utilizamos simulaciones de dinámica molecular para calcular las tasas de crecimiento de cuatro fases de hielo: Ih, III, V y VI. Para poder realizar comparaciones a la misma temperatura, se aplicaron diferentes presiones a cada fase. Nuestro análisis de los efectos de la presión sobre la tasa de crecimiento del hielo Ih reveló sólo una influencia menor, lo que nos permitió atribuir las variaciones en las tasas de crecimiento principalmente a diferencias estructurales entre las fases de hielo. Observamos que los hielos Ih y VI presentan tasas de crecimiento similares, mientras que los hielos III y V crecen significativamente más rápido. Las fases de hielo de crecimiento rápido presentan una alta eficiencia de crecimiento, lo que significa que se necesita menos movimiento molecular para formar el sólido. Nuestra hipótesis es que la ordenación protónica puede influir en el crecimiento del hielo, ya que las fases de hielo parcialmente ordenadas (III y V) muestran tasas de crecimiento más rápidas que las fases totalmente desordenadas (Ih y VI). Se descartan explicaciones alternativas para las tendencias de la velocidad de crecimiento del hielo, como la complejidad de la celda unitaria o la entropía de fusión. Por último, evaluamos la capacidad predictiva de la teoría de Wilson-Frenkel. Aunque la teoría no tiene en cuenta de forma inherente la complejidad estructural -lo que da lugar a tasas de crecimiento similares en todas las fases-, hemos observado que la introducción de una longitud característica específica de fase permite reproducir con precisión los resultados de nuestra simulación.

## Sulfonic acid-functionalised zeolites for fructose dehydration into 5-hydroxymethylfurfural

Huaizhong Xiang, Yao Zhang, Xin Zhong, Boji Wang, Charalampos Drivas, Mark A Isaacs, Aina Syahida Jamal, Zhipeng Qie, Qiang Zhang, Shaojun Xu, **Jesús Esteban**, Christopher M A Parlett, Xiaolei Fan



*Sustain. Sci. Technol.* 2 (2025) 034002  
<https://doi.org/10.1088/2977-3504/add7e0>

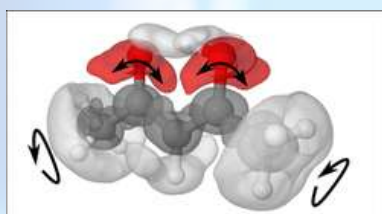
El 5-hidroximetilfurfural (HMF) derivado de la biomasa es un producto químico de plataforma versátil y fundamental para apuntalar una industria química sostenible basada en la biomasa. Este estudio explora el uso innovador de zeolitas y zeolitas jerárquicas, derivadas mediante desilicación alcalina, como materiales catalíticos para la deshidratación de la fructosa. Funcionalizados con sitios de ácido sulfónico, estos materiales demuestran un elevado rendimiento catalítico, en particular maximizando los rendimientos de HMF. El aumento de la mesoporosidad facilita una mayor incorporación de ácido sulfónico, lo que conduce a una mejor conversión de la fructosa. Sin embargo, los rendimientos son sensibles a la duración de la reacción, ya que un mayor tiempo repercute negativamente en la selectividad hacia el HMF debido a las reacciones posteriores en serie. Se obtuvieron resultados óptimos bajo irradiación de microondas en un medio bifásico, alcanzando una selectividad de HMF de 73% a una conversión de fructosa de 88% en sólo 5 min a 170 °C, destacando la eficiencia energética y la accesibilidad del catalizador. Las mejores modificaciones del catalizador conducen a una reducción de la energía de activación de la conversión de fructosa de aproximadamente un 35% en relación con el proceso sin catalizar, junto con mejoras significativas en la sostenibilidad del proceso, que se ajustan a los objetivos de desarrollo sostenible (ODS) de las Naciones Unidas en materia de energía asequible y limpia (ODS 7), industria, innovación e infraestructura (ODS 9), responsabilidad social de las empresas (ODS 10) y responsabilidad social de las empresas (ODS 11). (ODS 9), Consumo y Producción Responsables (ODS 12) y Acción por el Clima (ODS 13).

# LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



## Capturing Ring Opening in Photoexcited Enolic Acetylacetone upon Hydrogen Bond Dissociation by Ultrafast Electron Diffraction

Valeriu Scutelnic, Denis S. Tikhonov, **Sonia Marggi Poullain**, Eric A. Haugen, Andrew Attar, Lou Barreau, Kristina Chang, Ashley P. Fidler, James D. Gaynor, Yen-Cheng Lin, Jie Yang, Elio G. Champenois, Xijie Wang, Xiaozhe Shen, Duan Luo, Fuhao Ji, Stephen Weathersby, Yury V. Vishnevskiy, Melanie Schnell, Thomas J. A. Wolf, Ming-Fu Lin, Stephen R. Leone

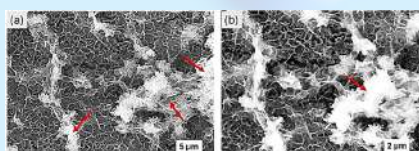


*J. Phys. Chem. Lett.* 2025, 16, 20, 5068-5075  
<https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.5c00285>

Las reacciones biológicas y químicas fotoinducidas se basan a menudo en transformaciones estructurales clave de una molécula impulsadas a través de múltiples estados electrónicos. La acetilacetona (AcAc) es un sistema prototípico para rutas químicas complejas que implican varias intersecciones cónicas (IC) y cruces intersistema singlete-triplete (ISC) caracterizados por geometrías distintas. En fase gaseosa, el AcAc se encuentra predominantemente en una forma enólica planar anular estabilizada por un fuerte enlace de hidrógeno O-H...O intramolecular. En este trabajo se emplea la difracción ultrarrápida de electrones (UED) en la configuración SLAC MeV-UED como sonda estructural directa con una resolución temporal de 160 fs. Junto con simulaciones de saltos superficiales de trayectoria, el análisis de los datos UED proporciona una nueva perspectiva sobre la dinámica nuclear en tiempo temprano en la acetilacetona. En concreto, se observa que el AcAc experimenta la apertura del anillo, la desplanarización y el alargamiento del enlace en los primeros 700 fs tras la fotoexcitación. La dinámica monitorizada se asocia principalmente con el movimiento nuclear en la superficie de energía potencial S1, formada tras una transferencia muy rápida de S2 a S1, que permite al AcAc alcanzar la intersección cónica hasta el cruce intersistema. Tales escalas de tiempo del movimiento nuclear contrastan con las escalas de tiempo de las transiciones electrónicas en AcAc que se caracterizaron previamente con métodos espectroscópicos, específicamente la conversión interna (<100 fs) y el cruce intersistema (1,5 ps).

## In situ-grown CuAl-layered double hydroxide on AA6082: corrosion resistance and Fenton-like catalytic degradation of methyl orange

Humaira Asghar, Valter Maurino, **Muhammad Ahsan Iqbal**



*Discover Electrochemistry* (2025)  
<https://doi.org/10.1007/s44373-025-00031-z>

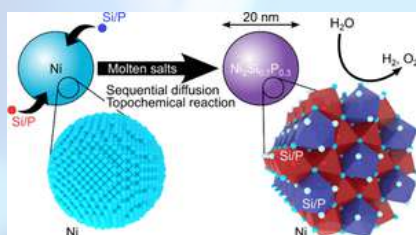
Se sintetizó una fina película protectora basada en doble hidróxido de CuAl (CuAl-LDHs) directamente sobre aluminio AA6082, y se analizó el potencial rendimiento catalítico hacia un sistema de recubrimiento protector multifuncional. Las características estructurales del sistema desarrollado se analizaron posteriormente mediante microscopía electrónica de barrido (SEM) y difracción de rayos X (XRD). La investigación se amplió a estudios de polarización potenciodinámica y análisis de espectroscopia de impedancia electroquímica (EIS) durante 72 h para analizar las propiedades de resistencia a la corrosión. Explotando aún más estas propiedades, se analizaron las propiedades catalíticas de los CuAl-LDHs para la degradación del naranja de metilo mediante un proceso tipo Fenton. Los resultados demostraron la eficacia protectora del CuAl-LDH en una solución de NaCl al 3,5% en peso y su actividad catalítica tipo Fenton en la degradación del naranja de metilo (MO). La eficacia de la degradación de MO se vio influida significativamente por las variaciones en la dosificación de H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> (0-2 mL) y la temperatura de reacción (25-40 °C). En particular, el CuAl-LDH preparado, con su alta concentración de cobre, alcanzó hasta un 60% de degradación de MO en 120 minutos a temperatura ambiente.

# LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



## In and Out: Shuttling Atoms in Covalent Nanocrystals, from Synthesis in Molten Salts to Water-Splitting Electrocatalysis

Yang Song, Anissa Ghoridi, Fernando Igoa Saldaña, Isabel Gómez-Recio, Daniel Janisch, Edouard de Rolland Dalon, Dominique Thiaudière, **María Luisa Ruiz-González, José M. González-Calbet**, Benedikt Lassalle-Kaiser, Andrea Zitolo, Christel Laberty-Robert, David Portehault

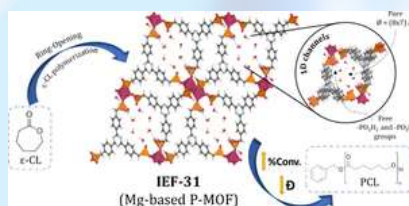


*J. Am. Chem. Soc.* 2025  
<https://doi.org/10.1021/jacs.5c04741>

Las transformaciones postsintéticas son fundamentales para la síntesis coloidal de nanocristales funcionales, ya que permiten obtener formas, heteroestructuras y composiciones químicas complejas. Sin embargo, siguen siendo inaccesibles para familias enteras de sólidos, especialmente los que dependen de enlaces covalentes, que cristalizan a temperaturas que los disolventes comunes no pueden soportar. Aquí demostramos que, en sales fundidas inorgánicas por encima de 500 °C, pueden desencadenarse tales transformaciones para dar lugar a nanocristales metal-covalentes antes inalcanzables. Mediante la incorporación de silicio y fósforo en nanopartículas metálicas, sintetizamos nanocristales de níquel silicofosfuro y demostramos cómo distintos enlaces químicos que implican silicio o fósforo impulsan sus propiedades electrocatalíticas para la oxidación alcalina del agua y la evolución del hidrógeno. Estos enlaces también determinan la vía de síntesis, desde la incorporación secuencial de elementos del bloque p hasta transformaciones topo-tácticas de las que no se había informado antes. La capacidad de llevar a cabo reacciones postsintéticas tan complejas de nanopartículas en sales fundidas allana el camino hacia una complejidad cada vez mayor en las composiciones y los enlaces químicos de los nanocristales para la conversión de energía.

## Triazine Mg-Based Phosphonate Metal-Organic Framework for $\epsilon$ -Caprolactone Polymerization

**Rubén Serrano-Nieto**, Christian Rentero, Pablo Salcedo-Abraira, Catalina Biglione, Agustin M. Cornejo Manrique, Thomas Devic, Valentina Sessini, Marta E. G. Mosquera, Patricia Horcajada



*Inorg. Chem.* 2025  
<https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.5c01174>

Se ha sintetizado con éxito un nuevo marco metalorgánico (MOF) tridimensional basado en magnesio y el ligando trifosfonato de triazina mediante el método solvotérmico y se ha caracterizado completamente. Denominado IEF-31 (IEF son las siglas en inglés de marco energético IMDEA), su estructura cristalina se desveló mediante difracción de rayos X monocristalina, mostrando grupos P-OH libres en dos modos de coordinación y un marco abierto con canales 1D ( $8 \times 7$  Å). Esta robusta estructura muestra una elevada estabilidad térmica y química (en varios disolventes orgánicos relevantes para la catálisis y en agua, pH= 2 a 10). Además, este estudio presenta la prueba de concepto del uso de un P-MOF basado en Mg como catalizador en la polimerización de apertura en anillo de  $\epsilon$ -caprolactona ( $\epsilon$ -CL) con relevancia en la formación de bioplásticos. En concreto, IEF-31(Mg) consiguió notables conversiones de monómeros y pesos moleculares de polímeros con bajos valores de dispersión ( $D \approx 1,1$ ), allanando el camino para un mayor diseño y optimización de P-MOFs de Mg robustos, eficientes y sostenibles para procesos de polimerización limpios.

# LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD



## Biphasic Electron Transfer Arising from Two Non-Interacting Donating States Unambiguously Revealed in C343-Sensitized Mesoporous SnO<sub>2</sub> by Combining Two Complementary Time-Resolved Spectroscopy Techniques

Miguel Ángel Pulido-Lendínez, Marco Ballabio, Andrés Burgos-Caminal, María E. Corrales, Sergio Revuelta, Saül García-Orrit, Víctor Vega-Mayoral, Juan Cabanillas-González, Luis Bañares, Wojciech Gawelda, Enrique Cánovas

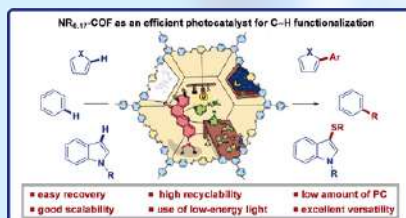


J. Phys. Chem. C 2025  
<https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5c02512>

Las películas mesoporosas de óxido metálico sensibilizadas con colorantes (dye-MO) son componentes prometedores en el campo de la conversión de la energía solar. En la interfaz entre el colorante y el óxido metálico, la competencia cinética entre la transferencia de electrones de donante a receptor (TE) y otros canales de recombinación y relajación determina en gran medida la eficiencia de los dispositivos fotocatalíticos y fotovoltaicos. Siguiendo trabajos anteriores sobre arquitecturas de óxido sensibilizado, demostramos que combinando la información recogida en una muestra al emplear dos métodos complementarios de sonda-bomba, uno sensible a la despoblación de electrones fotoexcitados en el donante de colorante y otro sensible a la población de electrones fotoinducida en el aceptor de MO, es posible eliminar cualquier ambigüedad en la determinación de las tasas de TE en un sistema colorante-MO. En concreto, hemos empleado la espectroscopia de fluorescencia de conversión ascendente y la espectroscopia de terahercios resuelta en el tiempo en una película mesoporosa de cumarina 343-óxido de estaño para resolver sin ambigüedad dos canales independientes de ET no interactuantes con tasas características de ET y amplitudes relativas que coinciden casi cuantitativamente dentro del error. Nuestro enfoque subraya el potencial de la combinación de técnicas espectroscópicas complementarias como procedimiento fiable para la caracterización de ET en sistemas sensibilizados y, por tanto, podría contribuir al desarrollo de eficiencias mejoradas en dispositivos optoelectrónicos.

## Nile Red-Based Covalent Organic Framework as a Photocatalyst for C-H Bond Functionalization

Marta Gordo-Lozano, Diego G. Matesanz, Marcos Martínez-Fernández, Pedro Almendros, Emiliano Martínez-Periñán, José L. Segura, Sara Cembellín



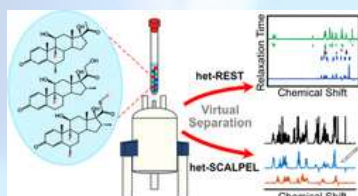
ACS Catal. 2025, 15, 10736-10745  
<https://doi.org/10.1021/acscatal.5c02173>

La búsqueda de fotocatalizadores eficientes basados en marcos orgánicos covalentes (COFs) es un área de creciente interés. Sin embargo, el desarrollo de estos fotocatalizadores heterogéneos se ve obstaculizado por las restricciones de simetría de los enlazadores utilizados para construir estos materiales. En este trabajo se presenta la síntesis directa de un 2D-COF basado en imina, NR0.17-COF, que incorpora una unidad de Rojo Nilo (NR) a través de la postmodificación con un andamiaje NR-alquino. Esta estructura presenta una notable actividad fotocatalítica en varias reacciones de funcionalización C-H fotorreductoras catalizadas por oxígeno, lo que demuestra la capacidad de funcionalizar directamente enlaces prevalentes en moléculas orgánicas en condiciones suaves y con luz de baja energía. Nuestro fotocatalizador heterogéneo supera a los sistemas homogéneos tradicionales abordando retos críticos como la escalabilidad y la reciclabilidad, permitiendo multiplicar por 10 la escala de reacción y posibilitando la recuperación y reutilización hasta seis veces. Este avance aumenta significativamente el potencial de la modificación postsintética del COF para aplicaciones prácticas en síntesis orgánica, lo que supone un avance sustancial en la tecnología fotocatalítica.

## LA INVESTIGACIÓN EN LA FACULTAD

**Cutting Edge NMR: New Tools for Analyzing Mixtures of Fluorinated Species**

Marshall J. Smith, Guilherme Dal Poggetto, Cláudio F. Tormena, Ralph W. Adams, **Laura Castañar**, Gareth A. Morris, Mathias Nilsson



*Anal. Chem.* 2025

<https://doi.org/10.1021/acs.analchem.5c00973>

La incorporación de flúor a los candidatos farmacéuticos ha dado lugar normalmente a una mejora de las propiedades medicinales, aumentando el número de principios activos fluorados en el mercado. Este aumento exige el desarrollo de herramientas analíticas robustas que puedan identificar y caracterizar dichos compuestos, especialmente en mezclas complejas como las formadas por reacciones, contaminación y degradación. La espectroscopia de RMN de protones es muy adecuada para la tarea de proporcionar información estructural; sin embargo, el solapamiento espectral a menudo limita la calidad de la información para mezclas complejas. En este trabajo, explotamos las propiedades de desplazamiento químico, relajación y alta sensibilidad de los núcleos de  $^{19}\text{F}$  para extraer subespectros individuales de RMN de  $^1\text{H}$  de componentes en mezclas sin necesidad de una separación física laboriosa y lenta. En casos difíciles, se utiliza el análisis multivariante para extraer subespectros  $^1\text{H}$  RMN simplificados. La potencia de los nuevos métodos TOCSY selectivo codificado por relajación heteronuclear (het-REST) y SCALPEL heteronuclear (het-SCALPEL) se demuestra en mezclas de corticosteroides que contienen flúor.

## DIVULGAR PARA EDUCAR

**CIANOIMPRESIÓN  
EL ENCUENTRO ENTRE EL ARTE Y LA QUÍMICA**

La química puede verse como una asignatura que implica complejas ecuaciones, reacciones y técnicas de laboratorio. Sin embargo, en este proyecto, la química se combina con el arte, utilizando un proceso químico para crear cianotipos. Dirigido a estudiantes de secundaria, estos preparan papel de cianotipia, que luego utilizan los alumnos más jóvenes para crear bellas obras de arte inspiradas en el mundo natural. A través de esta experiencia, alumnos de diferentes edades trabajan juntos para descubrir tanto la magia de la química como la creatividad inherente a los procesos científicos.



Imágenes de Paula Egan

**Saber más:** [Science in School](#)

# BOLETÍN DE DIVULGACIÓN. Nº 36

Facultad de Ciencias Químicas. UCM

Vicedecanato de Ordenación Académica, Biblioteca y Divulgación



Fotografía: Elena Espada Bernabé



FACULTAD DE  
CIENCIAS QUÍMICAS  
UNIVERSIDAD COMPLUTENSE MADRID