ULL

Universidad de La Laguna

Facultad de Ciencias
Sección de Química

XI CONGRESO DE ESTUDIANTES DE LA SECCIÓN DE QUÍMICA

13, 14 y 15 de Abril de 2015

Comunicación y Asistencia: 1 CLE o 2 ETCS ***Asistencia: 1 CLE o 1 ETCS***

Real Sociedad Española de Química

over Sabanda
Expertos en viajes

SERVICIO DE PUBLICACIONES UNIVERSIDAD DE LA LAGUNA

Orvecame
Organización Vehículos Cabrera Medina

CICAR
Canary Islands Car

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

Patrocinado por:

ULL | Universidad de La Laguna
Vicerrectorado de Alumnado

Orvecame
Organización Vehículos Cabrera Medina

Real Sociedad Española de Química

CICAR
Canary Islands Car

Programa Científico

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

PROGRAMA CIENTÍFICO

Lunes, 13 de abril de 2015

16:00 h Registro y recogida de documentación
Colocación de pósteres

17:30 h Acto de Apertura
Conferencia: ***"El periodismo científico y la divulgación como profesión y como investigación académica"***
Dr. Carlos Elías Pérez. Catedrático de Periodismo de la Universidad Carlos III
Conferencia inaugural patrocinada por la Real Sociedad Española de Química-Sección Territorial de Canarias

Martes, 14 de abril de 2015

9:00 h Comunicaciones Orales (O01-O07)
10:30 h Charla: Jóvenes Investigadores de Tenerife
11:00 h Café - Sesión de pósteres
12:00 h Mesa Redonda: Salidas profesionales
- Dr. Sebastián Delgado, Vocal del Colegio Oficial de Químicos de Canarias
- Leticia Rodriguez Sosa, Graduada en Ciencias Ambientales, estudiante del Máster de Biodiversidad terrestre y Conservación en Islas
- Dr. Gabriel García-Llanos, Departamento Comercial de Biosigma S.L.
- Dra. Carolina Mallol, Investigadora Ramón y Cajal (IUBO-AG y Dpto. de Geografía e Historia)
- Dra. Beatriz Gil Hernández, representante de los Jóvenes Investigadores de Tenerife

16:00 h Comunicaciones Orales (O08-O10)
16:45 h Café - Sesión de pósteres
17:00 h Acto de inauguración del Año Internacional del Suelo en la ULL
17:15 h Conferencia: ***"Suelo, Sociedad y Cambio Global"***
Dr. Winfried E.H. Blum (Presidente de la Unión Internacional de Sociedades Nacionales de la Ciencia del Suelo IUSSS, Profesor Emérito de la Univ. of Natural Resources and Life Sciences, Viena)
18:00 h Inauguración de la Exposición sobre el Año Internacional del Suelo

Miércoles, 15 de abril de 2015

9:00 h Comunicaciones Orales (O11-O16)
10:15 h Conferencia: "**La misteriosa química de las estrellas**". **Dr. Eduardo L. Martín Guerrero de Escalante**. Profesor de Investigación del Centro de Astrobiología (CSIC-INTA, Madrid)
11:15 h Café - Sesión de pósteres
12:15 h Comunicaciones Orales (O17-O20)

16:00 h Conferencia: "**La corrosion electroquimica y su impacto ambiental**". **Dra. Lucien Petrova Veleva.** Responsable del Laboratorio de Fisicoquímica del Centro de Investigación y Estudios Avanzados – Unidad Mérida. México
17:00 h Conferencia de clausura: "***La belleza de lo diminuto a través de los más grandes".*** **Dr. Alberto Hernández Creus**. Catedrático de Química Física, ULL
18:00 h Entrega de Certificados, Premios y Clausura

Comités

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

Comité Científico

Ana Isabel Jiménez Abizanda
Área de Química Analítica

Manuel Barrera Niebla
Área de Química Física

Sebastián Delgado
Colegio Oficial de Químicos de Canarias

Candela Díaz García
Área de Ingeniería Química

Fernando García Tellado
Real Sociedad Española de Química

Concepción González Martín
Instituto de Productos Naturales y Agrobiología - CSIC

Isabel López Bazzocchi
Área de Química Orgánica

Pedro Martín Zarza
Área de Química Inorgánica

Candelaria Sánchez Galán
Asociación Canaria de Ingenieros Químicos Superiores

Comité Organizador

Sergio Joaquín Álvarez Méndez

Juan Heliodoro Ayala Díaz

Julián Calero Pérez

Giada Caniglia

Selene Díaz González

Rosa Lelia Dorta Díaz

Pedro Carlos Esparza Ferrera

Marta Fariña Ramos

Andrea Beatriz Favero Giorgis

José Manuel García Fraga

María Teresa García Rodríguez

Rocío Del Carmen Hernández Nieto

María Del Cristo Marrero Hernández

Elena María Pastor Tejera

Miguel Ángel Rodríguez Delgado

Carmen María Rodríguez Pérez

Manuela Sánchez Sarmiento

Sara Tejera Díaz

Listado de comunicaciones

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

Código	Comunicación	Página
O-01	**PLEGAMIENTO DE PROTEÍNAS: ¿UN TEMA DE TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA?** **Alejandro Gutiérrez González y David Santana Rivero** *2º Química* **Tutor: Alberto Hernández Creus** *UD Química Física, Departamento de Química*	27
O-02	**CARBON QUANTUM DOTS, LA QUÍMICA DEL CARBONO EN NANOPARTÍCULAS** **Giada Caniglia y Andrea Favero Giorgis** *3º Química* **Tutores: María del Mar Afonso Rodriguez y José Antonio Palenzuela López** *Departamento de Química Orgánica, Instituto Universitario Bio-Orgánica "Antonio González"*	28
O-03	**USO ALTERNATIVO DEL PAPEL DE FILTRO: ADSORCIÓN DE UN COLORANTE** **Miriam Carolina Pérez Cova** *3º Química* **Tutores: María del Carmen Arévalo Morales y José Morales Marina** *UD Química Física, Departamento de Química*	29
O-04	**MÉTODO PARA LA SINTESIS DE ANTIBIOTICOS DE LA FAMILIA DE LAS OXAZOLIDINONAS** **Claudia Rodríguez Sánchez** *3º Farmacia* **Tutores: María del Mar Afonso y José A. Palenzuela López** *Departamento de Química Orgánica, Instituto Universitario Bio-Orgánica "Antonio González"*	30
O-05	**APLICACIONES BIOTECNOLÓGICAS DE LA IMPRESIÓN 3D** **Alejandra Cardona Correa y Álvaro Santana Mayor** *3º Química* **Tutores: Ricardo Fernández González y Juan Carlos Ruiz Morales** *UD Química Inorgánica, Departamento de Química*	31
O-06	**ESTUDIO QUIMIOMÉTRICO DE SUELOS DE LA MACARONESIA** **Ana Beatriz Carmona Rodríguez** *Graduada en Química* **Tutores: Juan Pedro Pérez Trujillo[a] y Zulimar Hernández** *[a]UD Química Analítica, Departamento de Química (ULL), [b]Departamento de Geología, Geoquímica y Química Agrícola (UAM)*	32
O-07	**SÍNTESIS DE ALCALOIDES INDOLIZIDINICOS DI- Y TRI-SUSTITUIDOS** **Marco Bassetto** *4ºQuímica y Tecnología Farmacéutica (Universidad de Padova)* **Tutores: María del Mar Afonso y José A. Palenzuela López** *Departamento de Química Orgánica, Instituto Universitario Bio-Orgánica "Antonio González"*	33

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

Código	Comunicación	Página
O-08	**PREPARACIÓN DE COMPUESTOS QUINÓNICOS BIOACTIVOS** **Priscila López Rojas** *Máster en Biomedicina* **Tutora: Ana Estévez Braun** *Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González (CIBICAN), Departamento de Química Orgánica*	34
O-09	**SÍNTESIS MULTICOMPONENTE DE DERIVADOS HETEROCÍCLICOS BIOACTIVOS DE EMBELINA** **Pedro Martín Acosta y Rosalyn Peña** *Doctorado en Química en Ingeniería Química* **Tutora: Ana Estévez-Braun** *Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González (CIBICAN), Departamento de Química Orgánica*	35
O-10	**FORMACIÓN DE DERIVADOS DE BODIPYs FLUORESCENTES UTILIZANDO VITAMINA C** **Diego M. Monzón** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Romen Carrillo y Víctor S. Martín** *Departamento de Química Orgánica, Instituto Universitario Bio-Orgánica "Antonio González"*	36
O-11	**CATALIZADORES DE PtCrCo SOPORTADOS SOBRE CARBÓN MESOPOROSO ORDENADO PARA USO COMO CÁTODO EN PILAS DE COMBUSTIBLE DE METANOL DIRECTO** **Luis Miguel Rivera Gavidia** *Doctorando en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Elena Pastor Tejera y José Luis Rodríguez Marrero** *UD de Química Física, Departamento de Química*	37
O-12	**DISEÑO DE UN MODELO MULTICOMPONENTE Y ORGANOCATALÍTICO EN AGUA. SÍNTESIS DE *γ*-NITROCOMPUESTOS** **Mary Cruz Prieto Ramírez** *Doctorado en Química e Ingeniería Química, Departamento de Química Biológica y Biotecnología. Instituto de Productos Naturales y Agrobiología – CSIC* **Tutores: Pedro de Armas y Fernando García Tellado** *Departamento de Química Biológica y Biotecnología. Instituto de Productos Naturales y Agrobiología – CSIC*	38
O-13	**DETERMINACIÓN DE FENOLES EN AGUA EMPLEANDO EXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA DISPERSIVA MINIATURIZADA CON BROMURO DE 1,3-DIDODECILIMIDAZOLIO ACOPLADA A HPLC** **María José Trujillo-Rodríguez** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutoras: Ana M. Afonso y Verónica Pino** *UD Química Analítica, Departamento de Química*	39

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

Código	Comunicación	Página
O-14	**LA IMPORTANCIA DEL OXIDO DE GRAFENO EN LA ELECTROCATALISIS** ***Jonathan Flórez*** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* ***Tutora: Elena Pastor*** *UD Química Física, Departamento de Química,*	40
O-15	**¡LUCES FUERA! VINIL ÉTERES COMO INHIBIDORES DE BIOLUMINISCENCIA EN LA COMUNICACIÓN CELULAR BACTERIANA** **Alberto J. Martín-Rodríguez[a] y Sergio J. Álvarez-Méndez[b]** *[a] Doctorado en Ciencias Biomédicas, [b] Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Celina García[c], David Tejedor[d], Víctor S. Martín[c] y José J. Fernández[c]** *[c]Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González, Departamento de Química Orgánica (ULL), [d]Departamento de Química Biológica y Biotecnología, Instituto de Productos Naturales y Agrobiología, IPNA-CSIC*	41
O-16	**USO DE ENTRAMADOS METALO-ORGÁNICOS EN EXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA DISPERSIVA MINIATURIZADA Y CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA DE ALTA RESOLUCIÓN PARA LA DETERMINACIÓN DE PARABENOS EN AGUA Y PRODUCTOS COSMÉTICOS** **Priscilla Rocío-Bautista** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutorea: Verónica Pino y Ana María Afonso** *UD Química Analítica, Departamento de Química*	42
O-17	**CO-PROCESAMIENTO CATALÍTICO DE ACEITE DE FRITURA Y GASOIL EN UNA PLANTA PILOTO** **Héctor de Paz Carmona [a] y María Ángeles Romero Vazquez[b]** *[a]Doctorado en Química e Ingeniería Química, [b] Centro de investigación de Cepsa* **Tutores: Andrea Brito Alayón[c] y Joana Frontela Delgado[b]** *[c]Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica, [b] Centro de investigación de Cepsa*	43
O-18	**AMINACIÓN Y BROMACIÓN DE ENLACES C(sp^3) –H NO ACTIVADOS PROMOVIDAS POR *N*-RADICALES** **Dionisio J. Rodríguez Sosa** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Concepción C. González y Antonio J. Herrera** *Departamento de Síntesis de Productos Naturales, IPNA-CSIC*	44
O-19	**ALCANOTIOLES SOBRE Au(111), BUSCANDO UN MODELO DEFINITIVO PARA UN SISTEMA "SENCILLO"** **Míriam Candelaria Rodríguez González[a]** *Doctorado en Química en Ingeniería Química* **Tutores: Alberto Hernández Creus y Pilar Carro** *UD Química Física, Departamento de Química*	45

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

Código	Comunicación	Página
O-20	**REACCIÓN DE NICHOLAS SOBRE 1-C-ALQUINILGLICALES: UN PROCESO DE DIVERSIDAD ESTRUCTURAL BASADO EN SUSTRATO**[1] **Fernando Lobo Palacios** *Doctor en Química Orgánica* **Tutores: Ana M. Gómez y J. Cristóbal López** *Instituto de Química Orgánica General, CSIC. Madrid*	46
P-01	**RECTIFICACIÓN EN COLUMNA DE RELLENO** **Jorge González Valle** *Graduado en Ingeniería Química Industrial* **Tutores: Juan M. Rodríguez Sevilla y Manuel F. Álvarez Díaz** *Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica*	49
P-02	**UTILIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS CON RECUBRIMIENTO DE POLIDOPAMINA PARA LA EXTRACCION DE COMPUESTOS CON ACTIVIDAD ESTROGÉNICA DE DIFERENTES TIPOS DE AGUAS** **Bárbara Socas Rodríguez y Javier González Sálamo** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Javier Hernández Borges y Miguel Ángel Rodríguez Delgado** *UD Química Analítica, Departamento de Química*	50
P-03	**DETERMINACIÓN DE MICOTOXINAS CON ACTIVIDAD ESTROGÉNICA EN AGUAS MEDIANTE EXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA UTILIZANDO UN POLÍMERO DE IMPRONTA MOLECULAR Y CROMATOGRAFÍA DE LÍQUIDOS ACOPLADA A ESPECTROMETRÍA DE MASAS** **Javier González Sálamo y Bárbara Socas Rodríguez** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Javier Hernández Borges y Miguel Ángel Rodríguez Delgado** *UD Química Analítica, Departamento de Química*	51
P-04	**IMPRESIÓN 3D DE MARTERIALES CERÁMICOS PARA APLICACIONES MEDIOAMBIENTALES** **Lorena Hernández Afonso** *Máster de Investigación en Química* **Tutores: Ricardo Fernández González, Pedro Esparza y Juan Carlos Ruiz Morales** *UD Química Inorgánica, Departamento de Química*	52
P-05	**APLICACIONES BIOTECNOLÓGICAS DE LA IMPRESIÓN 3D** **Alejandra Cardona Correa y Álvaro Santana Mayor** *3º Química* **Tutores: Ricardo Fernández González y Juan Carlos Ruiz Morales** *UD Química Inorgánica, Departamento de Química*	53
P-06	**SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DEL COMPLEJO BIMETÁLICO** **[RuClCp(PPh_3)-μ-dmoPTA-1κP:2k^2*N*,*N*'-$PdCl_2$]** **Elizabeth Zenaida Mendoza Nozeman** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: [a]Pablo Lorenzo Luis y [b]Antonio Romerosa** *[a]UD Química Inorgánica, Departamento de Química (ULL) y [b]Área de Química Inorgánica, Departamento de Química y Física (UAL)*	54

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

Código	Comunicación	Página
P-07	**OXIDACIONES CON AIRE PROMOVIDAS POR ASCORBATO** **Diego M. Monzón y Gastón Silveira Dorta** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutor: Romen Carrillo** *Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González, Departamento de Química Orgánica*	55
P-08	**ACTIVACION CON MICROONDAS DE PROCESOS SECUENCIALES** **Carmen Carro Sabina** *Máster de Investigación en Química* **Tutores: Alicia Boto** *Instituto de Productos Naturales y Agrobiología - CSIC*	56
P-09	**COMPARACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE ORO OBTENIDAS POR DIFERENTES MÉTODOS** **Adrián Gutiérrez Serpa[a] y Paula Rodríguez Santana[b]** *[a]4º Química, [b]Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Ana Isabel Jiménez Abizanda y Francisco Jiménez Moreno** *UD Química Analítica, Departamento de Química*	57
P-10	**CO-PROCESAMIENTO CATALÍTICO DE ACEITE DE FRITURA Y GASOIL EN UNA PLANTA PILOTO** **Héctor de Paz Carmona [a] y María Ángeles Romero Vazquez [b]** *[a] Doctorado en Química e Ingeniería Química, [b] Centro de investigación de Cepsa* **Tutoras: Andrea Brito Alayón y Joana Frontela Delgado** *Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica*	58
P-11	**PRODUCCIÓN DE REACTIVOS QUÍMICOS FINOS EN CANARIAS** **Carmen Carro Sabina** *Máster de Investigación en Química* **Tutores: Fernando Lobo y Gabriel García-Llanos** *Biosigma SL*	59
P-12	**OBTENCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DEL ACEITE EXTRAÍDO DE TRES ESPECIES DE TÁRTAGO** **Sonia Guerra Rodríguez, Rafael Navarro Soto y Imanol Quina García** *3º Ingeniería Química Industrial* **Tutores: Andrea Brito Alayón y Karina Rodríguez Espinoza** *Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica*	60
P-13	**CLASIFICACIÓN DE SUELOS DE CANARIAS: COMPARACIÓN ENTRE ANÁLISIS DISCRIMINANTE Y REDES NEURONALES ARTIFICIALES** **Patricia Gil Hernández y Paula Rodríguez Santana[a]** *[a] Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Ana Isabel Jiménez Abizanda y Francisco Jiménez Moreno** *UD Química Analítica, Departamento de Química*	61
P-14	**CARACTERIZACIÓN GEOFÍSICA Y GEOQUÍMICA DEL SUBSUELO DE LAS ISLAS CANARIAS A TRAVÉS DEL SISTEMA DE GALERÍAS** **Pedro A. Torres González** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Ana I. Jiménez Abizanda[a], José M. García Fraga[a] y Vicente Soler Javaloyes[b]**	62

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

Código	Comunicación	Página
	[a]*UD Química Analítica, Departamento de Química*, [b]*Estación Volcanológica de Canarias -CSIC*	
P-15	**LÍQUIDOS IÓNICOS PARA LA PRODUCCIÓN DE BIODIÉSEL** **Laura Díaz Rodrígueza** *Doctorado de Química e Ingeniería Química* **Tutora: Andrea Brito Alayón** *Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica*	63
P-16	**TÉCNICAS ANALÍTICAS DE EXTRACCIÓN ASISTIDAS POR ULTRASONIDOS: UNA VISIÓN GENERAL** **Providencia González-Hernández y Priscilla Rocío-Bautista** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Verónica Pino, Juan H. Ayala y Ana María Afonso** *UD Química Analítica, Departamento de Química*	64
P-17	**MICROEXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA DE ESPACIO EN CABEZA ACOPLADA A CROMATOGRAFÍA DE GASES PARA LA DETERMINACIÓN DE SUBPRODUCTOS DE DESINFECCIÓN DE AGUAS** **Providencia González-Hernández** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Verónica Pino, Juan H. Ayala y Ana M. Afonso** *UD Química Analítica, Departamento de Química*	65
P-18	**NUEVOS RECUBRIMIENTOS DE MICROEXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA BASADOS EN POLÍMEROS DE LÍQUIDOS IÓNICOS EN COMBINACIÓN CON CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA DE ALTA RESOLUCIÓN** **Idaira Pacheco-Fernández** *Máster Universitario en Química* **Tutores: Verónica Pino y Juan H. Ayala** *UD Química Analítica, Departamento de Química*	66
P-19	**EVALUACIÓN DE UN MÉTODO ANALÍTICO DE 'SCREENING' PARA LA MONITORIZACIÓN DE LA OXIDACIÓN DE SULFURO DE HIDRÓGENO EN CULTIVOS BACTERIANOS** **Sergio Ramos García** *3º Química* **Tutores: Guillermo González Hernández[a] y José Manuel González Hernández[b],** [a]*UD Química Analítica, Departamento de Química,* [b]*Departamento de Bioquímica, Microbiología, Biología Celular y Genética*	67
P-20	**ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE LAS VARIEDADES LOCALES DE CEBADA (*Hordeum vulgare* L.) DE CANARIAS.** **M Panizo Casado** *Ingeniero Agrónomo* **Tutores: Domingo Ríos [2], Desirée Afonso [3] y Elena M. Rodríguez [4]** [2] *Dpto. Ingeniería, Producción y Economía Agraria,* [3]*Centro de Conservación de la Biodiversidad Agrícola de Tenerife,* [4]*Área de Nutrición y Bromatología*	68

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

Código	Comunicación	Página
P-21	**CONTENIDO DE COMPUESTOS FENÓLICOS EN LAS VARIEDADES LOCALES DE CEBADA (*Hordeum vulgare* L.) DE CANARIAS** **M Panizo Casado** *Ingeniero Agrónomo* **Tutores: Domingo Ríos [1], Desirée Afonso [2], Elena M. Rodríguez [3]** *[1] Dpto. Ingeniería, Producción y Economía Agraria, [2]Centro de Conservación de la Biodiversidad Agrícola de Tenerife,[3]Área de Nutrición y Bromatología*	69
P-22	**TÉCNICAS ANALÍTICAS DE EXTRACCIÓN ASISTIDA POR MICROONDAS: UNA VISIÓN GENERAL** **Idaira Pacheco-Fernández**[1] y **María José Trujillo-Rodríguez**[2] *[1]Máster Universitario en Química, [2]Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Venerando González, Juan H. Ayala y Verónica Pino** *UD Química Analítica, Departamento de Química*	70
P-23	**DISEÑO PARA LA SÍNTESIS DE NUEVOS ANÁLOGOS DE COMPUESTOS ANTILEUCÉMICOS BASADOS EN ESTRUCTURAS PRESENTES EN PRODUCTOS NATURALES** **Marta Fariña Ramos** *Máster de Investigación en Química* **Tutores: Celina García[a] y Ignacio Brouard[b]** *[a] Instituto Universitario de Bio-Orgánica "Antonio González" (IUBO-AG), Departamento de Química Orgánica, [b] Instituto de Productos Naturales y Agrobiología, IPNA-CSIC*	71
P-24	**ORGANOCATÁLISIS CON SULFONILO Y REACTIVO DE NAZAROV CON APLICACIÓN "DOS"** **Samuel Delgado[a], Javier Peña y Gastón Silveira Dorta [b].** *[a]Máster en evaluación y desarrollo de medicamentos, [b]Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutor: David Diez.** *Departamento de Química Orgánica (USAL)*	72
P-25	**ÓXIDO DE GRAFENO: SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y APLICACIONES COMO SOPORTE EN DISPOSITIVOS ELECTROQUÍMICOS DE CONVERSIÓN Y ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA** ***Giovanni Lemes Pacheco y Jonathan Florez Montaño*** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* ***Tutor: Elena Pastor Tejera*** *UD Química Física, Departamento de Química*	73
P-26	**DIGESTIÓN ANAEROBIA DE CULTIVOS ENERGÉTICOS DE MICROALGAS** **Alicia Torres Gil[a], Suleima Padrino Hernández[b]** *[a] Alumna de Tercer Ciclo del Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica, [b] Alumna de 4º curso del Grado en Ingeniería Industrial Química* **Tutores: [c] Andrea Brito Alayón, [d] Raimundo Arvelo Álvarez** *[c] Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica*	74

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

Código	Comunicación	Página
P-27	**CARBON QUANTUM DOTS: LA QUÍMICA DEL CARBONO EN NANOPARTÍCULAS** **Giada Caniglia y Andrea Favero Giorgis** *3º Química* **Tutores: María del Mar Afonso Rodriguez y José Antonio Palenzuela López** *IUBO-AG Departamento de Química Orgánica*	75
P-28	**OXIDACIONES BIOLÓGICAS QUÉ PODEMOS APRENDER DEL SISTEMA P450** **Giada Caniglia y Andrea Favero Giorgis** *3º Química* **Tutor: Pedro Francisco Martín Zarza** *UD Química Inorgánica, Departamento de Química*	76
P-29	**BÚSQUEDA DE MOLÉCULAS BIOACTIVAS: RESULTADOS PRELIMINARES DEL ANÁLISIS ESTRUCTURAL Y FARMACOLÓGICO DEL EXTRACTO EN ACETATO DE ETILO DE *PSEUDONOCARDIA SP*** **Rosalía González Brito** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Ana R. Díaz-Marrero, José M. Padrón, José J. Fernández, Manuel Norte** *Departamento de Química Orgánica e Instituto Universitario de Bio-Orgánica "Antonio González"- (CIBICAN)*	77
P-30	**MICROORGANISMOS DE ORIGEN MARINO COMO FUENTE DE NUEVAS SUSTANCIAS BIOACTIVAS** **Rosalía González Brito** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Ana R. Díaz-Marrero, José M. Padrón, José J. Fernández y Manuel Norte** *Departamento de Química Orgánica e Instituto Universitario de Bio-Orgánica "Antonio González"- (CIBICAN)*	78
P-31	**ESTUDIO QUIMIOMÉTRICO DE SUELOS DE LA MACARONESIA** **Ana Beatriz Carmona Rodríguez** *Graduada en Química* **Tutores: [a]Juan Pedro Pérez Trujillo y [b]Zulimar Hernández** *[a]UD Química Analítica,Departamento de Química (ULL),* **[b]***Departamento de Geología, Geoquímica y Química Agrícola (UAM)*	79
P-32	**UNA APROXIMACIÓN *QUÍMICA* AL ESTUDIO DE MINERALES NO CRISTALINOS EN SUELOS VOLCÁNICOS** **Ana Beatriz Carmona Rodríguez** *Graduada en Química* **Tutores: [a]Zulimar Hernández y [b]Juan Pedro Pérez Trujillo** *[a]Departamento de Geología, Geoquímica y Química Agrícola (UAM), [b]UD Química Analítica, Departamento de Química (ULL)*	80

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

Código	Comunicación	Página
P-33	**PRIMEROS RESULTADOS DEL ESTUDIO FITOQUÍMICO DEL MACROALGA *Laurencia catarinensis*** **Adrián Morales Amador,[a] Margarita González-Tijera[b] y Alberto J. Martín-Rodríguez[c]** *[a]Doctorado en Química e Ingeniería Química, [b]Doctorado en Ecología y Biotecnología. Universidad Veracruzana (Mexico), [c]Plataforma Oceánica de Canarias* **Tutores: José J. Fernández, Manuel Norte y María L. Souto** *Departamento de Química Orgánica, Instituto Universitario de Bio-Orgánica "Antonio González", CIBICAN.*	81
P-34	**EVALUACIÓN DE POSIBLES TRATAMIENTOS DEL LICOR NEGRO PROCEDENTE DE LA FABRICACIÓN DE PAPEL/CARTÓN A PARTIR DE *PENNISETUM SETACEUM*** **J. Rodríguez y L. Delgado** *Proyecto Final de Carrera de Ingeniería Química* **Tutor: Luis E. Rodríguez, Mª Luisa Vera y Carmen Arévalo.** *Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica*	82
P-35	**REDES METALO-ORGÁNICAS COMO PROMETEDORES MATERIALES DE EXTRACCIÓN EN QUÍMICA ANALÍTICA** **Leila Nair Menghini-Peralta[a] y Priscilla Rocío-Bautista[b]** *[a]Licenciada en Química, [b]Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutores: Verónica Pino, Ana María Afonso** *UD Química Analítica, Departamento de Química*	83
P-36	**BIOSENSORES BASADOS EN NANOPARTÍCULAS METÁLICAS: BIOSENSOR PARA DETERMINAR LA CONCENTRACIÓN DE FENOL EN VINO** **Ana Laura López Machado** *5º Farmacia* **Tutoras: Carmen Arévalo Morales y Elena Pastor Tejera** *UD de Química Física, Departamento de Química*	84
P-37	**SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE ÓXIDO DE GRAFENO** ***[a]Pablo Domínguez y [b]Jonathan Flórez*** *[a]4º Química, [b]Doctorado en Química e Ingeniería Química* ***Tutora: Elena Pastor y José Luis Rodríguez*** *UD Química Física, Departamento de Química*	85
P-38	**SÍNTESIS DE TRIAZOLO-AZÚCARES** **Eliet L. Pérez Relvas** *1º Química* **Tutores: Concepción González Martín y Nieves Mª Rodríguez Paz** *Departamento de Síntesis de Productos Naturales. Instituto de Productos Naturales y Agrobiología (IPNA-CSIC)*	86
P-39	**CARACTERIZACION DE CATALIZADORES CATÓDICOS EN UNA ESTACION DE PILAS DE COMBUSTIBLE DE MEMBRANA POLIMERICA DE BAJA TEMPERATURA (PEM)** **Laura Giamporcaro[a] y Luis Miguel Rivera Gavidia[b]** *Estudiante Erasmus[a], Doctorando en Química e Ingeniería Química[b]* **Tutora: Elena Pastor Tejera** *UD de Química Física, Departamento de Química,*	87

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

Código	Comunicación	Página
P-40	**CAPSULAS MOLECULARES DE CALIXARENO PARA LA ENTREGA DE FÁRMACOS** **Marcelle D. Perretti** *Doctorado en Química e Ingeniería Química* **Tutor: Romen Carrillo** *Dpto. de Química Orgánica, Instituto Universitario de Bio-Orgánica "Antonio Gonzalez"*	88

Comunicaciones: Orales

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

PLEGAMIENTO DE PROTEÍNAS: ¿UN TEMA DE TERMODINÁMICA ESTADÍSTICA?

Alejandro Gutiérrez González y David Santana Rivero
2º Química
Tutor: Alberto Hernández Creus
UD Química Física, Departamento de Química

Christian B.Anfinsen (1916-1995), en sus experimentos, llegó a la conclusión de que la secuencia de aminoácidos de una proteína determinaba su estructura secundaria y terciaria; previamente, Linus Pauling y Robert Carey, habían deducido estructuras regulares que podían formar de manera estable las proteínas.

Sin embargo, en 1969 Cyrus Levinthal, había definido una paradoja en torno a la estructura nativa de las proteínas: la función de una proteína viene determinada por una sola distribución espacial, sin embargo, si una proteína relativamente pequeña, en torno a 100 aminoácidos, se plegase de forma aleatoria, las conformaciones posibles alcanzarían cifras astronómicas y los tiempo de plegamiento sería de varias veces la edad del universo.

Es obvio pues, que si existen proteínas funcionales, el tiempo de plegamiento es infinitamente menor como indica Levinthal. Por ello, las proteínas no pueden pasar por todas las conformaciones posibles, sino que han de existir vías irreversibles de plegamiento, en las cuales, la proteína va perdiendo energía progresivamente hasta alcanzar la conformación nativa, de mínima energía.

En la presente exposición se intentará hacer un acercamiento al plegamiento de proteínas desde el punto de vista de la Termodinámica Estadística.

Bibliografía:

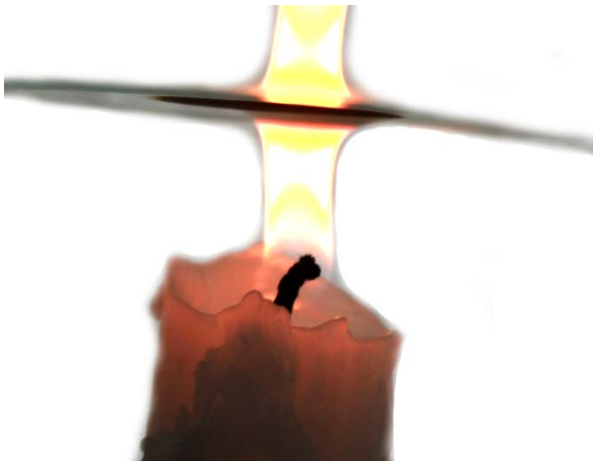
- LEANDRO MARTÍNEZ, *Introducing the Levinthal´s Protein Folding Paradox and Its Solution*, agosto,2014, ACS Publications, Journal of Chemical Education, páginas 1918-1923.
- MILO M.LIN Y AHMED H.ZEWAIL, *Proteing folding-simplicity in complexity,* Annalen der physik ,julio, 2012, páginas 379-391.

CARBON QUANTUM DOTS
LA QUÍMICA DEL CARBONO EN NANOPARTÍCULAS

Giada Caniglia y Andrea Favero Giorgis
3º Química
Tutores: María del Mar Afonso Rodriguez y José Antonio Palenzuela López
Departamento de Química Orgánica, Instituto Universitario Bio-Orgánica "Antonio González"

El trabajo experimental que presentamos está basado en la nanotecnología, concretamente en las nanopartículas de carbono (Carbon Quantum Dots, CQD), que pueden revolucionar nuestra tecnología.

Partiremos de la simple combustión de una vela (parafina) y a través de técnicas experimentales, lograremos extraer, a partir del hollín depositado, nanopartículas de carbono fluorescentes.



Los Quantum Dots que se emplean en la industria actualmente (televisores y pantallas de móviles por ejemplo), están basados en metales como selenio o cadmio, y deben su emisión de luz a su pequeño tamaño que hace que se muestren los fenómenos cuánticos. De hecho, la frecuencia de la luz emitida depende de su tamaño, no de su composición. Se conocen desde 1981.

Los CQD son la nueva generación de nanopartículas compuestas solo de carbono y fueron descubiertos en 2004. Si bien el carbón es un mineral de aspecto negro, poco soluble en agua y de casi inapreciable fluorescencia, los CQD poseen como nanopartículas una alta dispersión en agua, dejando soluciones transparentes y con una elevada fluorescencia.

A diferencia de los Quantum Dots clásicos, que cuentan con una larga trayectoria, los actuales Carbon Quantum Dots no presentan toxicidad en los ensayos realizados hasta la fecha, siendo bio-compatibles y útiles para bio-imagen, ya que se introducen en las células. Otra característica es la facilidad para modificar su superficie y variar su fluorescencia o para proporcionar alta resistencia al photobleaching (destrucción fotoquímica del fluoróforo). En esta presentación se muestra la preparación de CQD y alguna transformación química que muestra su potencial para uso en la industria bio-tecnológica.

USO ALTERNATIVO DEL PAPEL DE FILTRO: ADSORCIÓN DE UN COLORANTE

Miriam Carolina Pérez Cova
3º Química
Tutores: María del Carmen Arévalo Morales y José Morales Marina
UD Química Física, Departamento de Química

A la hora de llevar a cabo experimentos de adsorción, el adsorbente más empleado es, sin duda, el carbón activo, debido a su gran área superficial, su gran porosidad, y su elevada capacidad para adsorber moléculas orgánicas. Sin embargo dicho material presenta ciertos inconvenientes como son la suciedad que genera, lo incómodo que resulta pesarlo y eliminarlo de la disolución, la contaminación microbiológica que puede originar en agua al permitir que proliferen bacterias en su superficie, etc. Aunque menos habitual, en algunos casos es igual de efectivo un material tan común como el papel de filtro. Este presenta grandes ventajas respecto al carbono a la hora de trabajar con él, tanto en el momento de pesarlo como en el de retirarlo de la disolución, sin olvidar su bajo coste. Otra ventaja es que no se necesita un agitador magnético para favorecer que se alcance el equilibrio, reduciendo considerablemente tanto el material como los reactivos a emplear en este tipo de experimentos.

En este trabajo se ha estudiado, mediante una sencilla experiencia, la adsorción de un colorante orgánico, el Procion Red MX-5B, sobre las fibras de celulosa de un papel de filtro. El estudio se ha realizado tanto desde el punto de vista termodinámico, haciendo uso de las isotermas de Langmuir y de Freundlinch para establecer un modelo adecuado que se ajuste a nuestros datos experimentales, como desde el punto de vista cinético, analizado la cinética de reacción del proceso de adsorción superficial. Tanto en uno como en otro caso, las medidas de la concentración, antes, durante y después de haberse alcanzado el equilibrio, se han determinado por medidas de absorbancia en intervalo de longitudes de onda comprendido entre 400 y 650 nm, haciendo uso de un espectrofotómetro.

De esta manera, hemos puesto en práctica un experimento de adsorción reproducible recurriendo al papel de filtro como adsorbente, y probando satisfactoriamente una utilidad diferente para este material tan corriente en cualquier laboratorio.

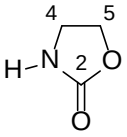
Bibliografía:

-G. Guirado, J. A. Ayllon. (March 11, 2011). A Simple Adsorption Experiment. *Journal of Chemical Education*. Volume 88. Pages 624-628.

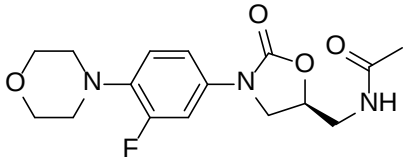
MÉTODO PARA LA SINTESIS DE ANTIBIOTICOS DE LA FAMILIA DE LAS OXAZOLIDINONAS

Claudia Rodríguez Sánchez
3º Farmacia
Tutores: María del Mar Afonso y José A. Palenzuela López
Departamento de Química Orgánica, Instituto Universitario Bio-Orgánica "Antonio González"

Las oxazolidinonas son compuestos orgánicos de cinco miembros que contienen un nitrógeno y un oxígeno en su estructura. Se trata de antimicrobianos, activos contra bacterias grampositivas, que inhiben la síntesis de proteínas. El ejemplo más destacado de esta familia de antibióticos es el Linezolid, usado en clínica para tratar infecciones bacterianas, producidas por agentes resistentes a otros antibióticos.



Estructura 2-oxazolidinona



Linezolid

Estos compuestos no solo resultan importantes en cuanto a su actividad antimicrobiana, sino que también aparecen en el esqueleto de compuestos con diversas actividades biológicas, como inhibidores selectivos de la ciclooxigenasa-2, herbicidas u otras. También se ha utilizado el anillo de oxazolidinona para la preparación de aza-isosteros análogos de compuestos naturales, y por supuesto hay que destacar el uso de las oxazolidinonas como auxiliares quirales en la síntesis de productos naturales. A todo esto, podemos añadir que en los últimos años han aparecido cepas bacterianas resistentes a varios antibióticos por lo que resulta de gran interés la síntesis de nuevos agentes antibacterianos con nuevos mecanismos de acción que sean capaces de vencer los mecanismos de resistencia.

En este trabajo se presenta un nuevo método de síntesis de oxazolidinonas a partir de amino-epóxidos N,N-disustituidos, empleando nitrato cérico amónico y CO_2. Este método permite obtener N-aril oxazolidinonas portadoras de un grupo hidroximetil en la posición 5, estructura análoga a la del Linezolid, a partir de compuestos sencillos y fácilmente accesibles.

APLICACIONES BIOTECNOLÓGICAS DE LA IMPRESIÓN 3D

Alejandra Cardona Correa y Álvaro Santana Mayor
3º Química
Tutores: Ricardo Fernández González y Juan Carlos Ruiz Morales
UD Química Inorgánica, Departamento de Química

La impresión 3D ha incrementado su atención en los últimos años desde que se han abaratado los costes de las impresoras. Esta tecnología permite fabricar desde implantes cerámicos biocompatibles a temperatura ambiente, hasta figuras plásticas de nuestros personajes de cómic favoritos. Uno de los campos que más ha avanzado con esta técnica es el de la biotecnología porque permite la fabricación de órganos y estructuras óseas a precios más económicos que con otras técnicas [1].

Nos vamos a centrar en la impresión Tridimensional en polvo (3DP) que es atractiva para la fabricación directa de implantes biocerámicos y de estructuras rígidas, que usan un archivo de diseño asistido por ordenador (.stl) para la ingeniería del objeto deseado por deposición localizada de un líquido aglutinante en capas de polvo cerámico finas. Este método es adecuado para procesar materiales óseos sintéticos, basados en fosfatos de calcio o magnesio. Estos materiales poseen notable biocompatibilidad y bioactividad debido a su similitud química con la fase mineral del hueso.

Al mismo tiempo mostramos las posibilidades de impresión 3D, dentro del grupo de “Nano y Microingeniería de materiales de la ULL”, con un nuevo sistema que permite imprimir estructuras biocompatibles (Figura 1).

Fig. 1. Imágenes de los diseños imprimidos con la impresora cerámica ProJet360

Bibliografía

[1] 3D printing of biomaterials. MRS Bulletin, 40 (2) February 2015.

ESTUDIO QUIMIOMÉTRICO DE SUELOS DE LA MACARONESIA

Ana Beatriz Carmona Rodríguez
Graduada en Química
Tutores: Juan Pedro Pérez Trujillo[a] y Zulimar Hernández
[a]UD Química Analítica, Departamento de Química (ULL), [b]Departamento de Geología, Geoquímica y Química Agrícola (UAM)

Una de las líneas de trabajo de nuestro grupo de investigación en los últimos años ha sido el estudio de los vinos producidos en los diferentes archipiélagos de la Macaronesia (Azores, Madeira, Canarias y Cabo Verde)[1,2] mediante el análisis de un amplio número de parámetros. Estos estudios nos han permitido evaluar la calidad de los vinos de los vinos y establecer los parámetros más adecuados para llevar a cabo una relación entre los vinos y su origen geográfico como método de detección de posibles fraudes. Para profundizar en el conocimiento de los parámetros que influyen en la calidad del vino (suelo, clima, prácticas vitícolas, prácticas enológicas, etc) se ha procedido a realizar un estudio exploratorio de los suelos vitícolas de diferentes zonas de la Macaronesia. Como una primera aproximación se seleccionaron 102 muestras de suelos vitícolas de diferentes Islas, en concreto, de las Islas de Pico y Terceira (Azores, Portugal), Lanzarote y El Hierro (Canarias, España), y Fogo (Cabo Verde).

A dichas muestras de suelo se le determinaron los siguientes parámetros: pH, suma de bases intercambiables (Ca^{2+}, Mg^{2+}, K^{+} y Na^{2+}), materia orgánica del suelo (MOS), retención de fósforo (P) y contenido de Al_o, Fe_o y Si_o.

De los resultados obtenidos de estos parámetros, los estudios de campo y los criterios de clasificación de suelos de la WRB[3,4] se procedió a realizar una clasificación de los suelos estudiados según el tipo de suelo.

Así mismo, se procedió al estudio de los resultados obtenidos mediante técnicas de análisis univariado y multivariado.

Bibliografía

[1] Juan Pedro Pérez Trujillo. Capítulo 16: Estudio del contenido metálico en vinos canarios con Denominación de Origen. Aportaciones al conocimiento del vino canario. Serie: Monografías nº LXXX. Sebastián Delgado Díaz (Ed).pp. 381 - 413. Tenerife. Instituto de Estudios Canarios, 2010. ISBN 978-84-88366-87-0

[2] Juan P. Pérez Trujillo; José E. Conde; María L. Pérez Pont; J. Câmara; José C. Marques. Content in metallic ions of wines from the Madeira and Azores archipelagos. Food Chemistry. 124, pp. 533 - 537. 2011.

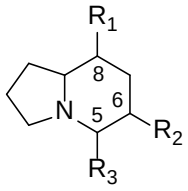
[3] WRB (World reference base for soil resources). International soil classification system for naming soils and creating legends for soil map, 2007.

[4] WRB (World reference base for soil resources). International soil classification system for naming soils and creating legends for soil map, 2014.

SÍNTESIS DE ALCALOIDES INDOLIZIDINICOS DI- Y TRI-SUSTITUIDOS

Marco Bassetto
4ºQuímica y Tecnología Farmacéutica (Universidad de Padova)
Tutores: María del Mar Afonso y José A. Palenzuela López
Departamento de Química Orgánica, Instituto Universitario Bio-Orgánica "Antonio González"

Los alcaloides indolizidínicos (IBAs) se encuentran fundamentalmente en numerosas tipos de ranas nativas de América Central. Sus estructuras difieren en el grado de sustitución, principalmente grupos alquilo. En particular, los alcaloides indolizidínicos 5-mono-sustituidos, así como los 3,5- y 5,8-disustituidos son las estructuras más frecuentes y representativas. Por otra parte, los compuestos con sustitución en las posiciones 5,6 y 8, indolizidinas trisustituídas, se aislan en pequeñísimas cantidades y su estructura y configuración absoluta sólo ha podido ser determinada en la mayoría de los casos mediante técnicas FTIR y GCMS.



Todos los aspectos arriba reseñados han motivado investigaciones dirigidas hacia la síntesis total de estos productos naturales, no sólo para demostrar el poder y la eficiencia de nuevos métodos de síntesis estereoselectiva, sino también como vía para proporcionar compuestos que permitan el estudio de sus destacadas actividades biológicas, así como la correcta asignación estereoquímica de los mismos.

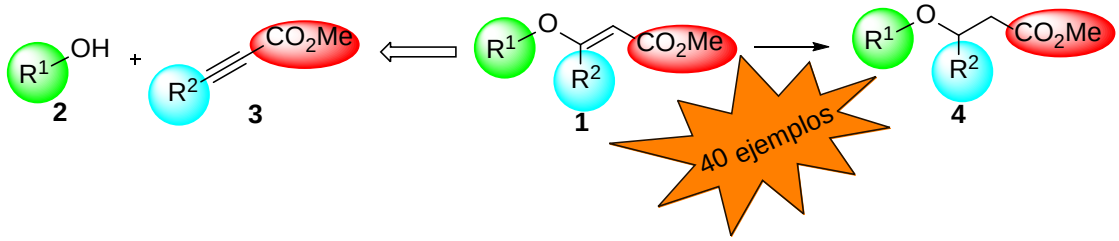
En este trabajo se presentan los resultados obtenidos en la síntesis de IBAs 5,8-disustituidos a través de una ruta sintética, que implica una reacción de Hetero Diels-Alder entre un dieno monoactivado y un heterodienófilo, la Δ^1-pirrolina, con excelentes rendimientos. La metodología desarrollada permite el acceso a compuestos 5,6,8-trisustituidos, con sólo modificar la estructura del dieno en la reacción.

¡LUCES FUERA! VINIL ÉTERES COMO INHIBIDORES DE BIOLUMINISCENCIA EN LA COMUNICACIÓN CELULAR BACTERIANA

Alberto J. Martín-Rodríguez[a] y Sergio J. Álvarez-Méndez[b]
[a] Doctorado en Ciencias Biomédicas, [b] Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutores: Celina García[c], David Tejedor[d], Víctor S. Martín[c] y José J. Fernández[c]
[c]Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González, Departamento de Química Orgánica (ULL), [d]Departamento de Química Biológica y Biotecnología, Instituto de Productos Naturales y Agrobiología, IPNA-CSIC

La comunicación celular bacteriana rige la formación del *biofilm*, que es la forma más habitual en que se encuentran las bacterias en la naturaleza. El *biofilm* es causante de costosos daños industriales y severos problemas de salud, por lo que en los últimos años se han realizado extensas búsquedas de productos químicos que sean capaces de evitar su formación.

En nuestro grupo de investigación publicamos recientemente un método general para sintetizar vinil éteres (**1**), a través de la adición conjugada de alcoholes (**2**) a triples enlaces activados por grupos éster (**3**).[1] Varios de los vinil éteres sintetizados fueron capaces de inhibir la comunicación celular de la bacteria bioluminiscente *Vibrio harveyi*. Estos resultados nos animaron a aplicar nuestro método para sintetizar una batería de 40 productos, en los que se modifican los sustituyentes R^1 y R^2 presentes en las estructuras generales **1** y **4**. De esta forma, pretendemos establecer la relación entre la estructura de las moléculas y su bioactividad, y estudiar así la posible aplicación de las mismas como eficientes inhibidores de la formación de *biofilm*.



Agradecimientos
Este proyecto ha sido financiado por el Ministerio de Educación, Cultura y Deporte (MECyD) (CEI10/00018), por el Ministerio de Economía y Competividad (MINECO) con cofinanciación con fondos FEDER (CTQ2011-28417-C02-01, CTQ2011-28417-C02-02 y SAF2011-28883-C03-01) y por el proyecto FP7-REGPOT-2012-CT2012-31637-IMBRAIN. S.J.A-M. agradece al MECyD la beca FPU concedida. A.J.M-R. agradece a la Plataforma Oceánica de Canarias (PLOCAN) la beca 2+2 concedida.

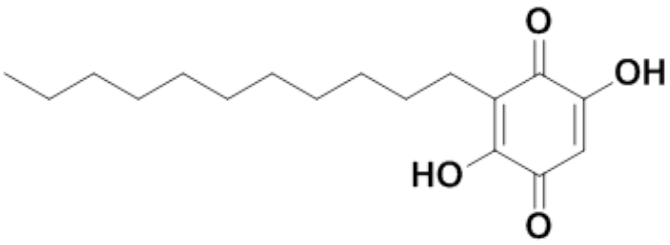
Bibliografía
1.- Tejedor, D.; Álvarez-Méndez, S. J.; López-Soria, J. M.; Martín, V. S.; García-Tellado, F. *Eur. J. Org. Chem.* **2014**, *1*, 198-205.

SÍNTESIS MULTICOMPONENTE DE DERIVADOS HETEROCÍCLICOS BIOACTIVOS DE EMBELINA

Pedro Martín Acosta y Rosalyn Peña
Doctorado en Química en Ingeniería Química
Tutora: Ana Estévez-Braun
Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González (CIBICAN), Departamento de Química Orgánica

Embelina es una benzoquinona natural extraída de la especie *Embelia ribes* (Myrsinaceae). Esta quinona es considerada una estructura privilegiada y en consecuencia un motivo estructural de interés en química médica dado el amplio abanico de actividades biológicas que presenta entre las que se incluyen actividad antibacteriana, analgésica, anti-inflamatoria, antioxidante, anticonvulsiva o antitumoral entre otras.

La mayor parte de los derivados de embelina se han sintetizado atendiendo a modificaciones sobre la naturaleza y tamaño de la cadena lateral. Basándonos en una aproximación pDOS (*Privileged-Substructure-based Diversity Oriented Synthesis*), en este trabajo se presenta la preparación de derivados heterocíclicos fusionados al núcleo quinónico de embelina por medio de reacciones multicomponente.



Bibliografía:

1. Peña, R.; Jimenez-Alonso, S.; Feresin, G.; Tapia, A.; Méndez-Alvarez, S.; Machín, F.; Ravelo, A. G.; Estévez-Braun, A. *J. Org. Chem*. **2013**, *78*, 7977.
2. Brahmachari, G.; Benerjee, B. *ACS Sustainable Chem. Eng*. **2014**, *2*, 441.
3. Chebanov, V. A.; Saraev, V. E.; Desenko, S. M.; Chernenko, V. N.; Knyazeva, I. V.; Groth, U.; Glasnov, T. N.; Kappe, C. O. *J. Org. Chem*. **2008**, *73*, 5110.

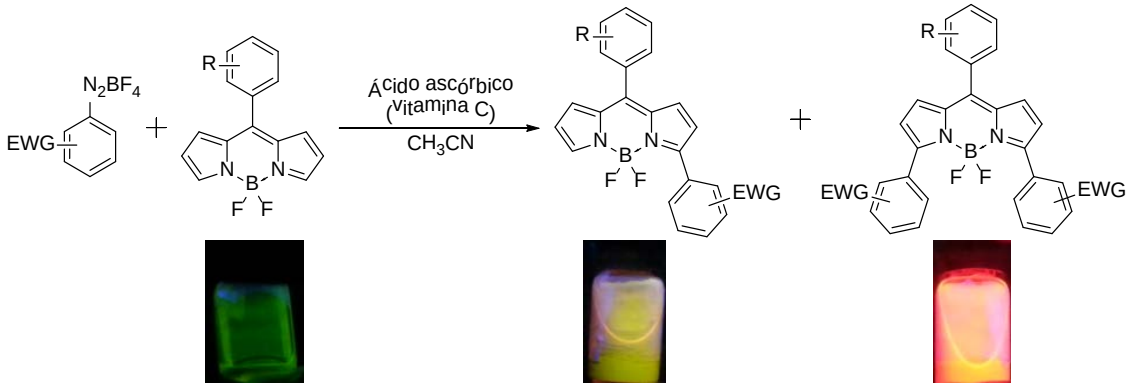
FORMACIÓN DE DERIVADOS DE BODIPYs FLUORESCENTES UTILIZANDO VITAMINA C

Diego M. Monzón
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutores: Romen Carrillo y Víctor S. Martín
Departamento de Química Orgánica, Instituto Universitario Bio-Orgánica "Antonio González"

La búsqueda de compuestos fluorescentes solubles en agua y de elevada longitud de onda de emisión (λ_{em}) se está volviendo muy demandada en los últimos años para su uso en técnicas de *imaging* de células.

El núcleo BODIPY se caracteriza por sus altos rendimientos cuánticos de fluorescencia, y por tanto, ha encontrado aplicaciones como interruptores y sensores fluorescentes y como láser de colorante.[1] Recientemente se ha comenzado a intentar modular derivados de BODIPY para aumentar su solubilidad en agua y desplazar la λ_{em} hacia valores mayores para su uso en medios biológicos. Sin embargo, en los métodos descritos en la bibliografía para la síntesis de estos derivados se utilizan procedimientos a altas temperaturas con metales de transición y otros reactivos que son caros y muy tóxicos.[2]

En este trabajo, se desarrolla un método de síntesis de derivados de BODIPYs a temperatura ambiente utilizando vitamina C, que es un producto barato y de baja toxicidad y que se puede obtener de fuentes sostenibles, por lo que presenta numerosas ventajas frente a otros procedimientos descritos anteriormente.



Agradecimientos
Este proyecto ha sido financiado por la comisión europea (FP7-REGPOT-2012-CT2012-31637-IMBRAIN) y el Ministerio de Economía y Competividad (MINECO) y cofinanciado con fondos FEDER (CTQ2011-28417-C02-01).

Bibliografía

1. Loudet, A.; Burgess, K. *Chem. Rev.* **2007**, *107*, 4891-4932
2. H. Lu, J. Mack, Y. Yanga and Z. Shen, *Chem. Soc. Rev.*, **2014**, *43*, 4778-4823

CATALIZADORES DE PtCrCo SOPORTADOS SOBRE CARBÓN MESOPOROSO ORDENADO PARA USO COMO CÁTODO EN PILAS DE COMBUSTIBLE DE METANOL DIRECTO

Luis Miguel Rivera Gavidia
Doctorando en Química e Ingeniería Química
Tutores: Elena Pastor Tejera y José Luis Rodríguez Marrero
UD de Química Física, Departamento de Química

Entre las pilas de combustible de membrana polimérica (PEMFCs) se encuentran las de metanol directo (DMFCs), que utilizan este alcohol como combustible para alimentar el ánodo. Las DMFCs presentan la facilidad que proporciona el manejo de un combustible líquido, aunque tienen el inconveniente de la disminución de la eficiencia por los efectos del fenómeno denominado *"crossover"*, que ocurre cuando el metanol pasa del ánodo hacia el cátodo por permeabilidad de la membrana polimérica, ocasionando en el cátodo un potencial mixto. Por ello se hace necesaria, para el desarrollo de estas pilas, la búsqueda de materiales catódicos con mayor tolerancia al metanol y mejor selectividad frente a la reacción de reducción de oxígeno (RRO).

Las aleaciones de Pt con diversos metales de transición han sido exhaustivamente estudiadas para su uso como cátodo en DMFC, ya que presentan una alta tolerancia a la oxidación del metanol y una buena respuesta en pila. En el presente trabajo se sintetizaron catalizadores de PtCrCo (2:1:1) soportados sobre carbón mesoporoso ordenado (CMK3) mediante el método de reducción con borohidruro de sodio, que fueron sometidos a un tratamiento térmico a 300ºC, 500ºC y 700 ºC, y caracterizados fisicoquímica y electroquímicamente. Los resultados muestran que el tratamiento térmico promovió el desarrollo de nuevas fases cristalinas y especies catalíticas que promueven mejoras en la tolerancia al metanol y en la cinética de la RRO.

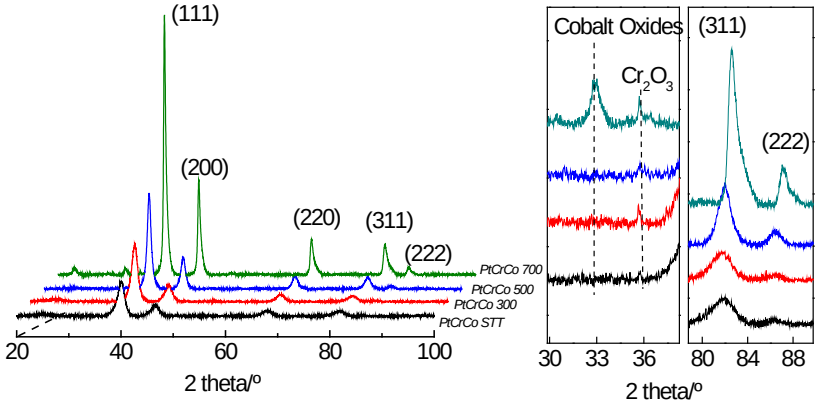


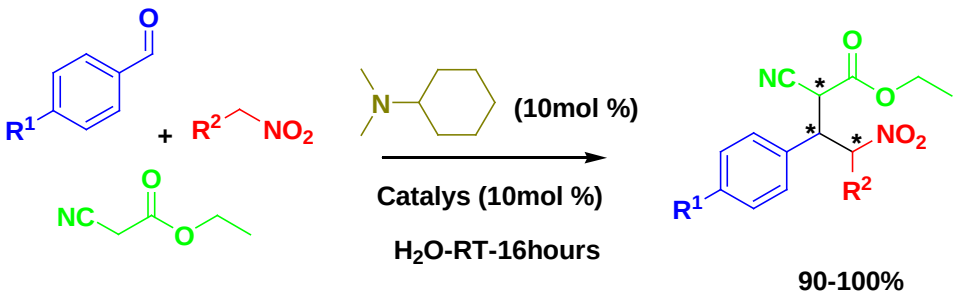
Figura 1. Difractogramas de los catalizadores de PtCrCo soportados sobre CMK3.

DISEÑO DE UN MODELO MULTICOMPONENTE Y ORGANOCATALÍTICO EN AGUA. SÍNTESIS DE *γ*-NITROCOMPUESTOS

Mary Cruz Prieto Ramírez
Doctorado en Química e Ingeniería Química, Departamento de Química Biológica y Biotecnología. Instituto de Productos Naturales y Agrobiología – CSIC
Tutores: Pedro de Armas y Fernando García Tellado
Departamento de Química Biológica y Biotecnología. Instituto de Productos Naturales y Agrobiología – CSIC

Las reacciones multicomponentes son los procesos químicos más eficientes para la síntesis de compuestos orgánicos altamente funcionalizados, ya que tienen lugar con gran economía de átomos, elevada eficiencia energética y que no suelen requerir etapas intermedias de purificación.[1] Es por ello que las reacciones multicomponentes y en particular las multicomponentes asimétricas son de creciente interés.

En esta comunicación se presenta una nueva metodología multicomponente, organocatalítica y escaleble, que opera en la interfase orgánico-agua (condiciones denominadas "on water", OW)[2] para la obtención de γ-nitrocompuestos a partir de un aldehído, una especie 1,3-dicarbonílica y un nitroalcano. La reacción transcurre en dos etapas; una primera etapa en la que la especie 1,3-dicarbonílica reacciona con el aldehído dando lugar al correspondiente aducto de Knoevenagel y una segunda etapa en la que un nitroalcano nucleófilo se adiciona a dicho aducto a través de una adición de Michael. El proceso requiere la presencia de cantidades catalíticas de un derivado de tiourea o escuaramida (catalizador) y de N,N-dimetilciclohexilamina como base, y genera *γ*-nitroésteres con tres estereocentros contiguos en un solo paso de reacción (ver figura). Estas unidades de *γ*-nitroésteres son precursores de *γ*-aminoácidos funcionalizados.



Agradecimientos: Trabajo financiado por el MINECO (CTQ2011-28417-CO2-02). M. C. P. agradece al MICINN la concesión de una beca FPI.

Bibliografía:

1. García-García, P.; Zagdoun, A.; Copéret, C.; Lesage, A.; Díaz, U.; Corma, A. *Chem. Sci.*, **2013**, *4*, 2006.
2. Nayaran, S.; Muldoon, J.; Finn, M. G.; Fokin, V. V.; Kolb, H. C.; Sharpleess K. B. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2005**, *44*, 3275

DETERMINACIÓN DE FENOLES EN AGUA EMPLEANDO EXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA DISPERSIVA MINIATURIZADA CON BROMURO DE 1,3-DIDODECILIMIDAZOLIO ACOPLADA A HPLC

María José Trujillo-Rodríguez
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutoras: Ana M. Afonso y Verónica Pino
UD Química Analítica, Departamento de Química

La extracción en fase sólida miniaturizada en su modo dispersivo (µ-dSPE) es una técnica analítica que consiste en dispersar un material extractante en la matriz de una muestra (fundamentalmente acuosa) con ayuda de algún tipo de agitación externa.

Como material de extracción en µ-dSPE pueden utilizarse surfactantes iónicos, depositados sobre la superficie de un soporte sólido en forma de hemimicelas mixtas. En estos casos, las monocapas o bicapas de surfactante formadas quedan retenidas en dicho soporte sólido mediante interacciones electrostáticas.

Los líquidos iónicos (ILs) son sales con puntos de fusión inferiores a los 100 ºC, alta estabilidad térmica, baja o despreciable presión de vapor a temperatura ambiente, y capacidad de interaccionar por medio de diferentes mecanismos de solvatación con compuestos de diferente naturaleza: tanto iónicos como moleculares. Además, determinados ILs, particularmente aquellos que poseen cadenas alquílicas de gran tamaño en sus estructuras, son capaces de actuar como surfactantes cuando se disuelven en agua, pudiendo utilizarse por tanto como novedosos materiales de extracción en µ-dSPE.

En cuanto al soporte sólido, el empleo de nanomateriales como las nanopartículas magnéticas (MNPs) permite una mayor superficie activa para la extracción, a la vez que su carácter magnético permite una importante simplificación del procedimiento extractivo, puesto que el uso de imanes para separar el material de extracción en µ-dSPE evita el empleo de etapas como centrifugación o filtración.

El objetivo principal de este trabajo es el desarrollo de un método basado en la utilización de hemimicelas mixtas del surfactante basado en IL bromuro de 1,3-didodecilimidazolio ($C_{12}C_{12}$Im-Br) como material de extracción, depositado sobre MNPs de Fe_3O_4 (Fe_3O_4@ $C_{12}C_{12}$Im-Br MNPs). El método de µ-dSPE facilitado por imanes se utilizó para la determinación analítica de un grupo de fenoles en agua, en combinación con cromatografía líquida de alta resolución y detección con diodos en línea (HPLC-DAD).

Bibliografía

- T.D. HO, C. ZHANG, L.W. HANTAO, K.L. ANDERSON, Ionic liquids in analytical chemistry: fundamentals, advances, and perspectives. *Analytical Chemistry* **86** (2014) 262.
- V. PINO, M. GERMÁN-HERNÁNDEZ, A. MARTÍN-PÉREZ, J.L. ANDERSON. Ionic liquid-based surfactants. *Separation Science and Technology* **47** (2012) 264.

LA IMPORTANCIA DEL OXIDO DE GRAFENO EN LA ELECTROCATALISIS

Jonathan Flórez
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutora: Elena Pastor
UD Química Física, Departamento de Química,

El grafeno es una monocapa de carbono con hibridación sp^2 que presenta una estructura muy parecida a la conformación de un panal de abejas. Desde que fue aislado por primera vez en el año 2004 por Andréy Geim y Konstantin Novoselov*.,* ha despertado un gran interés por sus excelentes características mecánicas, eléctricas, térmicas y ópticas. Puede ser producido con excelentes propiedades por exfoliación micro-mecánica a partir de grafito pirolítico altamente ordenado, por crecimiento epitaxial, y por deposición química de vapor. Sin embargo, éstas no son las rutas de obtención más adecuadas o eficaces para la fabricación a gran escala.

Así, surge el óxido de grafeno (GO) como material de partida para la obtención de grafeno. Aunque el producto final no posee una estructura perfecta, en comparación con los procedimientos mencionados anteriormente, el GO tiene dos características importantes para la producción de grafeno a gran escala: (1) puede ser producido utilizando grafito como materia prima, por métodos rentables y con un alto rendimiento; y (2) puede formar coloides acuosos estables para facilitar el desarrollo de estructuras macroscópicas por procesos simples y baratos.

En Electrocatálisis, un punto clave para el estudio y la aplicación del GO como catalizador o como soporte catalítico es su reducción, la cual restablece parcialmente la estructura y propiedades del grafeno. Diferentes procesos de reducción resultan en diferentes propiedades de GO reducido (RGO), que a su vez afecta el rendimiento final de materiales o dispositivos compuestos por RGO. En este trabajo se describe una vía de obtención de GO y RGO y su correspondiente caracterización mediante diferentes técnicas microscópicas y espectroscópicas, así como su utilización como soporte para catalizadores que pueden ser utilizados en dispositivos electroquímicos para almacenamiento y producción de energía.

Bibliografía

V. Chabot, *A review of graphene and graphene oxide sponge: material synthesis and applications to energy and the environment, Energy Environ. Sci*., 2014. Volumen 7, paginas 1564-1596.

PREPARACIÓN DE COMPUESTOS QUINÓNICOS BIOACTIVOS

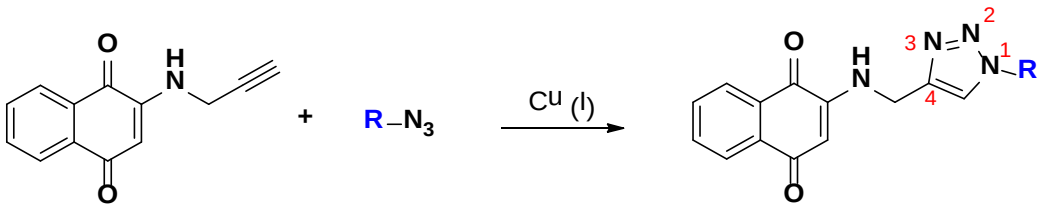
Priscila López Rojas
Máster en Biomedicina
Tutora: Ana Estévez Braun
Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González (CIBICAN), Departamento de Química Orgánica

El agrupamiento quinónico está presente en un amplio conjunto de compuestos cuyas aplicaciones alcanzan ámbitos tan diversos como la ciencia de los materiales, la nanotecnología, la fotoquímica y la química médica.

En este último campo podemos destacar como los compuestos quinónicos presentan interesantes bioactividades como antitumoral, antimalárica, antiviral y antibiótica.

En base a estas numerosas actividades biológicas, las quinonas son consideradas importantes estructuras privilegiadas y constituyen un importante punto de partida para el desarrollo de nuevos fármacos.

En este trabajo se han sintetizado una serie de derivados 1,2,3-triazolil naftoquinónicos potencialmente bioactivos mediante reacciones de cicloadición 1,3-dipolar catalizadas por cobre entre una naftoquinona con un grupo alquino y diversas azidas preparadas a partir de ácidos borónicos y haluros de alquilo o arilo.



Síntesis de 1,2,3-triazolil naftoquinonas.

Bibliografía

1. Jiménez-Alonso, S.; Chávez, H.; Estévez-Braun, A.; Ravelo, A. G.; Pérez-Sacau, E.; Machín, F. *J. Med. Chem.* **2008**, *51*, 6761-6772.
2. Peña, R.; Jiménez-Alonso, S.; Feresin, G.; Tapia, A.; Méndez-Alvarez, S.; Machín, F.; Ravelo, A. G.; Estévez-Braun, Ana. *J. Org. Chem.* **2013**, *78*, 7977-7985.
3. McNaughton-Smith, G.; Estévez-Braun, A.; Jiménez Alonso, S.; Gutierrez Ravelo, A.D.; Fernández Pérez, L.; Díaz Chico, B.N. "Preparation of fused quinonic compounds useful in treating diseases" Patent WO 2014016314 A1 Jan 30, 2014.

USO DE ENTRAMADOS METALO-ORGÁNICOS EN EXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA DISPERSIVA MINIATURIZADA Y CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA DE ALTA RESOLUCIÓN PARA LA DETERMINACIÓN DE PARABENOS EN AGUA Y PRODUCTOS COSMÉTICOS

Priscilla Rocío-Bautista
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutorea: Verónica Pino y Ana María Afonso
UD Química Analítica, Departamento de Química

El empleo de conservantes en productos cosméticos, medicamentos, cremas solares y otros productos de cuidado personal (PCPs) es muy común, para evitar posibles contaminaciones por microorganismos en los mismos y garantizar así la calidad del producto. Entre los aditivos más comúnmente utilizados con fines conservantes se encuentran los parabenos (esteres *p*-hidroxibenzoicos).

Estudios recientes señalan los posibles riesgos de los parabenos para la salud, fundamentalmente por considerar a algunos de ellos disruptores endocrinos. En este sentido, una vez que un PCP (conteniendo parabenos) es aplicado en una persona, pueden producirse efectos nocivos derivados de la exposición directa. Por otra parte, los PCPs se acumulan en el medio ambiente (suelos, aguas superficiales, aguas subterráneas...) por el uso abusivo por el ser humano. Además, no se consigue eliminarlos totalmente en las plantas depuradoras de aguas residuales.

Los parabenos se encuentran presentes en aguas medioambientales a muy bajos niveles de concentración, por lo que se requiere de eficientes etapas de extracción y preconcentración en el proceso analítico utilizado para su determinación.

En los últimos años, los principales avances en Química Analítica se han dirigido al desarrollo de nuevas técnicas de extracción que limiten el uso de disolventes orgánicos, y, si es posible, incluso reemplazarlos con otro tipo de materiales o disolventes más amables con el medio ambiente, respetando así, los principios de la Química Verde, fundamentalmente en lo que a generación de residuos se refiere.

Entre los materiales recientemente propuestos se encuentran las redes metalo-orgánicas (MOFs). Estas redes cristalinas estáncompuestas por un ión metálico y ligandos de naturaleza orgánica. Las características principales de estos nuevos materiales son su alta estabilidad, su porosidad constante, la cual puede ser fácilmente manipulada con fines prefijados, así como una elevada área superficial, convirtiéndolos en prometedores materiales extractivos.

En este trabajo se persigue el estudio de diferentes MOFs como novedosos materiales extractivos para parabenos, presentes en muestras acuosas o en productos cosméticos. El procedimiento analítico seleccionado, es asimismo un método microexractivo, específicamente una extracción en fase sólida dispersiva miniaturizada (D-µ-SPE), cuyo material sorbente es el MOF, y en combinación con cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) y detección por diodos en línea (DAD). Entre los MOFs estudiados se encuentran el HKUST-1, constituido por cobre como ión central y el ácido trimésico como ligando orgánico; el MIL-53, cuyo ión central es el aluminio y el el ligando orgánico es el ácido tereftálico; y el MOF-5, con el mismo ligando orgánico que el anterior pero con cinc como ión central.El método propuesto ha sido convenientemente optimizado y validado.

Bibliografía

- I. Martins, F. C. Carreira, L. S. Canaes, F. A. De Souza Campos Junior, L. M. Da Silva Cruz, S. Rath, *Talanta* 2011, 85 1-7.
- P. Rocío-Bautista, C. Martínez-Benito, V. Pino, J. Pasán, J. H. Ayala, C. Ruiz-Pérez, A. M. Afonso, *Talanta* 2011, 139, 13-20.

CO-PROCESAMIENTO CATALÍTICO DE ACEITE DE FRITURA Y GASOIL EN UNA PLANTA PILOTO

Héctor de Paz Carmona [a] y María Ángeles Romero Vazquez[b]
[a]Doctorado en Química e Ingeniería Química, [b] Centro de investigación de Cepsa
Tutores: Andrea Brito Alayón[c] y Joana Frontela Delgado[b]
[c]Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica, [b] Centro de investigación de Cepsa

El Green Diesel o HVO (Hydroprocessing Vegetable Oil) es un biocombustible formado principalmente por n-parafinas, que se obtiene a partir del hidrotratamiento catalítico de aceite vegetal en condiciones de alta temperatura y presión. Una prometedora vía para la obtención de este biocombustible a nivel industrial es el co-procesamiento catalítico de aceite de fritura y gasoil.

La utilización de aceite de fritura en este co-procesamiento es de gran importancia, porque no sólo se utiliza un residuo contaminante para el medio ambiente, sino que se obtiene un biocombustible de propiedades excepcionales.

Una planta piloto es una planta de proceso pero a una escala reducida. Su utilización es determinante para estudiar la viabilidad de procesos, tanto desde el punto de vista técnico, como en el económico.

El Centro de Investigación de Cepsa (CIC), que desde hace tiempo ha estudiado el efecto de la incorporación de aceite en el proceso de hidrodesulfuración del gasoil, dispone de una planta piloto con la que se pueden emular procesos industriales de hidrotratamiento de gasoil a una escala menor.

Este trabajo, realizado en el CIC, analiza el proceso de obtención de HVO en una planta piloto por medio de un co-procesamiento de aceite de fritura con gasoil de destilación directa (20/80), y presenta algunos resultados preliminares de dicho estudio como son: la influencia del co-procesamiento de aceite de fritura sobre las propiedades del gasoil y el funcionamiento de la planta piloto, así como los productos, n-parafinas y propano entre otros, que se han formado como consecuencia de este co-procesamiento en la planta piloto.

Bibliografía

- Al-Sabawi M., Chen J. *Hydroprocessing of Biomass-Derived Oils and Their Blends with Petroleum Feedstocks.* Energy Fuels 2012; 26:5373-5399.
- Bezergianni S., Dimitriadis A., Karonis D. *Diesel decarbonization via effective catalytic Co-hydroprocessing of residual lipids with gas-oil.* Fuel 2014; 136:366-373

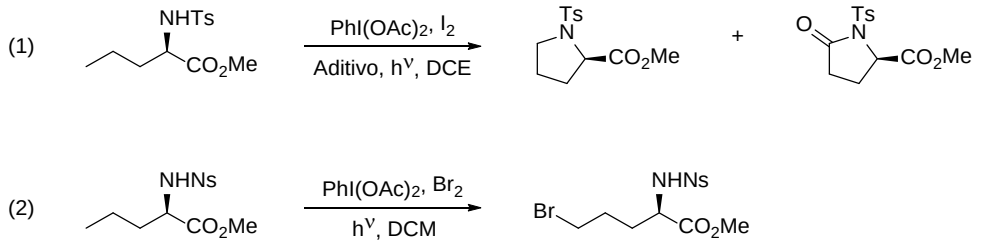
AMINACIÓN Y BROMACIÓN DE ENLACES C(sp^3)–H NO ACTIVADOS PROMOVIDAS POR *N*-RADICALES

Dionisio J. Rodríguez Sosa
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutores: Concepción C. González y Antonio J. Herrera
Departamento de Síntesis de Productos Naturales, IPNA-CSIC

La funcionalización de enlaces C(sp^3)-H no activados es uno de los retos de la síntesis orgánica, por las ventajas que supone en cuanto a reducción del número de etapas en las síntesis totales.

En los últimos años, nuestro grupo de investigación se ha centrado en la aminación de enlaces C(sp^3)-H no activados promovida por *N*-radicales, empleando el sistema reactivo $PhI(OAc)_2$ / I_2. Fruto de estas investigaciones, se ha conseguido la aminación regio-, quimio- y estereoselectiva de grupos metilo no activados en moléculas conformacionalmente no restringidas, a través de la mono- o poliyodación del metilo, partiendo de diferentes precursores de *N*-radicales como sulfonamidas (ec.1, esquema 1), sulfamatos cíclicos y sulfamidas cíclicas.

Recientemente, hemos empleado el sistema reactivo $PhI(OAc)_2$ / Br_2 para realizar reacciones análogas en las que se consigue mono-, di- o tribromar los grupos metilo no activados (ec.2, esquema 1). En esta comunicación, se presentan estos últimos resultados y se analizan sus diferencias con respecto a la aminación.



Esquema 1

Bibliografía:
- T. Newhouse, P. S. Baran, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2011**, *50*, 3362–3374.
- J. A. Labinger, J. E. Bercaw, *Nature* **2002**, *417*, 507–514.
- L. R. Reddy, B. V. S. Reddy, E. J. Corey, *Org. Lett.* **2006**, *8*, 2819–2821.

ALCANOTIOLES SOBRE Au(111), BUSCANDO UN MODELO DEFINITIVO PARA UN SISTEMA "SENCILLO"

Míriam Candelaria Rodríguez González[a]
Doctorado en Química en Ingeniería Química
Tutores: Alberto Hernández Creus y Pilar Carro
UD Química Física, Departamento de Química

Las monocapas autoensambladas (SAMs, por sus siglas *Self Assembled Monolayers*) de especies sulfuradas sobre metales han atraído, desde su descubrimiento en los años '80, una gran atención tanto en investigación básica como aplicada. Destacan sobre todo el número de estudios realizados para alcanotioles sobre Au(111), habiéndose convertido en elementos claves en el desarrollo de numerosas aplicaciones en Nanociencia y Nanotecnología. Este tipo de sistemas se han convertido, desde un punto de vista básico, en un modelo para estudiar la adsorción espontánea de especies orgánicas sobre superficies metálicas y han sido estudiados por todas las técnicas de análisis de superficies existentes así como por métodos computacionales.

A pesar de la extensa literatura en cuanto a la estructura y naturaleza de la interfase S-Au la descripción de estos sistemas, su formación y sus propiedades siguen siendo un auténtico desafío. Algunos hechos observados experimentalmente por técnicas como la microscopía de Efecto Túnel (STM) como, por ejemplo, la presencia en superficie de islas de vacancias ("pits") una vez formada la SAM, la fácil interconversión de las redes c(4x2) y √3x√3R30º o, simplemente, la existencia de la paradigmática red √3x√3R30º, han sido objeto de discusión por parte de los investigadores expertos en este campo, proponiéndose multitud de modelos de adsorción diferentes a lo largo de las últimas décadas. En esta comunicación se comentarán los principales modelos que se han propuesto para explicar estos resultados experimentales en los distintos intentos de esclarecer el origen de la interfase S-Au y conseguir un modelo unificado para explicarla.

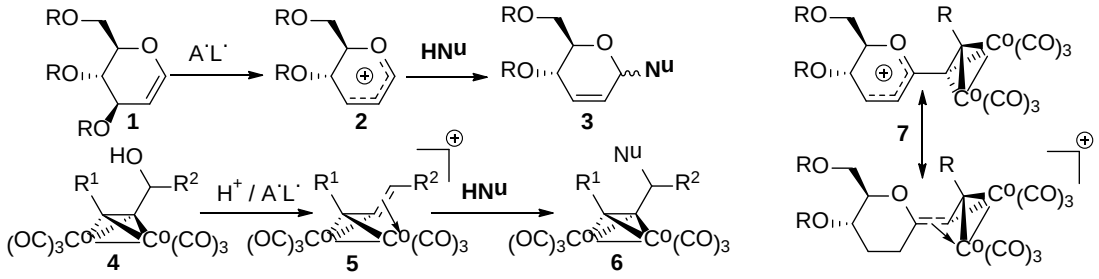
Bibliografía

- Vericat, C.; Vela, M. E.; Benitez, G.; Carro, P.; Salvarezza, R. C. Self-Assembled Monolayers of Thiols and Dithiols on Gold: New Challenges for a Well-Known System. *Chem. Soc. Rev.* **2010***, 39*, 1805-1834.
- Guo, Q.; Lib, F. Self-Assembled Alkanethiol Monolayers on Gold Surfaces: Resolving the Complex Structure at the Interface by STM. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2014***, 16(36)*, 19074-19090.
- Carro, P.; Torrelles, X.; Salvarezza, R. C. A Novel Model for the (√3 × √3)R30° Alkanethiolate-Au(111) Phase Based on Alkanethiolate-Au Adatom Complexes. *Phys. Chem. Chem. Phys*. **2014**, *16*, 19017−19023.

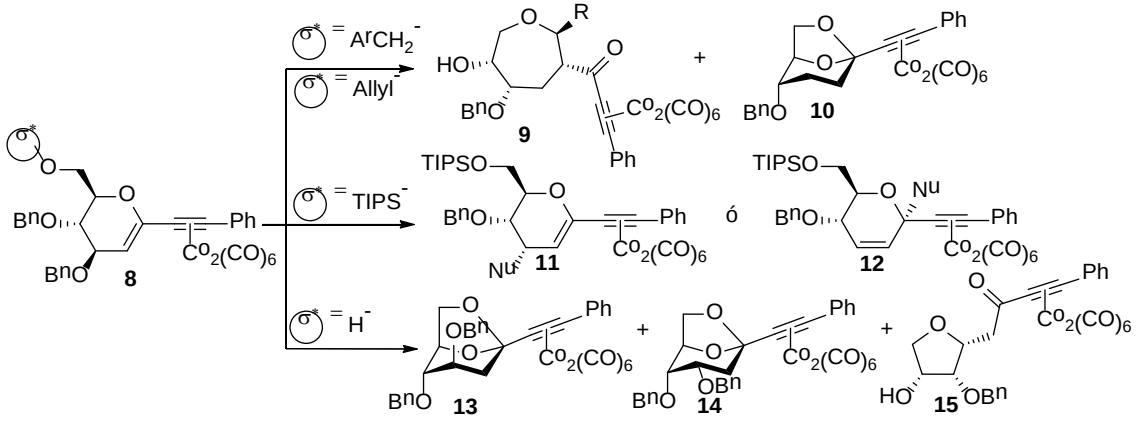
REACCIÓN DE NICHOLAS SOBRE 1-C-ALQUINILGLICALES: UN PROCESO DE DIVERSIDAD ESTRUCTURAL BASADO EN SUSTRATO[1]

Fernando Lobo Palacios
Doctor en Química Orgánica
Tutores: Ana M. Gómez y J. Cristóbal López
Instituto de Química Orgánica General, CSIC. Madrid

La transposición de Ferrier (I)[2] y la reacción de Nicholas[3] son dos transformaciones químicas que tienen en común la formación de un intermedio catiónico, (**2** y **5**) que, al ser atacado por nucleófilos (**NuH**) forma glicósidos alílicos (**3**) o derivados de propargilo (**6**), respectivamente. En este trabajo se combinaron ambos cationes y se formaron nuevos cationes piranosídicos tipo "Ferrier-Nicholas" (**7**).



Cuando se estudió la reacción sobre el sistema **8**, se observó que el grupo protector del hidroxilo primario del carbohidrato jugaba un papel clave en el curso de reacción. De este modo, utilizando distintos sustituyentes, se obtuvo una amplia variedad de productos, **9-15**. Esta transformación se puede considerar como un proceso de diversidad estructural basada en sustrato, o proceso de plegamiento[4], en el que la estructura de los productos finales está codificada en un apéndice del sustrato.



Bibliografía
[1] a) Lobo, F.; Gómez, A.M.; Miranda, S.; López, J.C. *Chem. Eur. J*. **2014**, *20*, 10492-10502; b) López, J.C., Lobo, F., Miranda, S., Uriel, C., Gómez, A.M. *Pur. App. Chem.* **2014**. *86*, 1357–1364; c) Gómez, A.M.; Lobo, F.; Pérez-de las Vacas, D.; Valverde, S.; López, J.C. *Chem. Comm*. **2010**, *46*, 6159-6161.
[2] Gómez, A.M.; Lobo, F.; Uriel, C.; López, J.C. *Eur. J. Org. Chem*. **2013**, 7221-7262.
[3] a) Díaz, D.D.; Betancort, J.M.; Martín, V.S. *Synlett*, **2007**, 343-359; b) (c) Omae, I. *Appl. Organometal. Chem*. **2007**; *21*, 318-344,
[4] Burke, M.D.; Schreiber, S.L. *Angew. Chem. Int. Ed*. **2004**, *43*, 46–58.

Comunicaciones: Pósteres

XI Congreso de Estudiantes de la Sección de Química

RECTIFICACIÓN EN COLUMNA DE RELLENO

Jorge González Valle
Graduado en Ingeniería Química Industrial
Tutores: Juan M. Rodríguez Sevilla y Manuel F. Álvarez Díaz
Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica

Este Trabajo de Fin de Grado se ha desarrollado con el fin realizar la puesta a punto de una instalación a escala piloto, que está formada por una columna de rectificación, cuyo relleno son anillos Raschig de cerámica de ½ pulgada. Dicha instalación se utilizará en años posteriores para que se realicen en ella prácticas de laboratorio correspondientes al Máster de Ingeniería Industrial.

En primer lugar, se ha llevado a cabo un análisis teórico relacionado con la termodinámica de los sistemas que se encontrarán en el interior de la columna, los cuales serán ciclohexano/n-heptano o ciclohexano/dibutil éter. De esta forma, se ha establecido el método termodinámico más apropiado y se ha hallado mediante el mismo, la relación entre la composición fase de vapor y la fase líquida.

Por otra parte se realizó un análisis experimental de la columna de rectificación. Primero se han obtenido las ecuaciones de calibrado para ambos sistemas, que relacionan la concentración de las muestras extraídas de las columnas con el índice de refracción o con la densidad (que son las magnitudes de la muestra que son medidas). Posteriormente se ha caracterizado el relleno de la columna y luego, con la columna operando en régimen estacionario y a reflujo total, se han tomado muestras en la cabeza y en el fondo de la misma para determinar su composición.

Una vez conocida la composición en los extremos de la columna en régimen estacionario, mediante el método de McCabe y mediante métodos numéricos (como Fenske o Lewis) se ha determinado el número mínimo de etapas teóricas y, a partir del mismo, se obtuvo la altura equivalente de plato teórico en la columna para ambos sistemas.

UTILIZACIÓN DE NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS CON RECUBRIMIENTO DE POLIDOPAMINA PARA LA EXTRACCION DE COMPUESTOS CON ACTIVIDAD ESTROGÉNICA DE DIFERENTES TIPOS DE AGUAS

Bárbara Socas Rodríguez y Javier González Sálamo
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutores: Javier Hernández Borges y Miguel Ángel Rodríguez Delgado
UD Química Analítica, Departamento de Química

Las nanopartículas (NPs) se han convertido en uno de los sorbentes más utilizados en la preparación de muestras debido a que su elevada relación área-volumen le proporciona una capacidad de extracción y eficacia superior a otros sorbentes utilizados habitualmente en este campo. Además de ello, la utilización de determinados recubrimientos externos permite, no sólo evitar la posible oxidación de las NPs, sino también aumentar su selectividad. En particular, las NPs magnéticas (m-NPs) han despertado gran interés debido a su capacidad de ser atraídas por un campo magnético, lo que simplifica considerablemente su separación de la muestra y, por tanto, el procedimiento de extracción [1].

Por su parte, la extracción en fase sólida en modo dispersivo (dSPE) constituye una clara alternativa a la SPE convencional, ya que el sorbente no está retenido en un cartucho o disco sino que se encuentra disperso en la propia muestra, simplificando considerablemente el procedimiento y reduciendo el tiempo de extracción [2]. Es precisamente en esta modalidad, en la que sorbentes como las m-NPs están encontrando un importante campo de aplicación.

En este trabajo se han utilizado m-NPs con recubrimiento de polidopamina, como sorbente en dSPE para la extracción de un grupo de doce compuestos con actividad estrogénica de agua mineral y de grifo. El 2-metoxiestradiol fue utilizado como estándar interno. La separación y determinación se ha llevado a cabo mediante cromatografía líquida de alta eficacia (HPLC) acoplada a un detector de espectrometría de masas en tándem (MS/MS). Los factores que afectan al procedimiento de extracción fueron optimizados con el objetivo de obtener las mayores eficacias de extracción. Los límites de detección obtenidos oscilaron entre 0.01 y 0.23 µg/L ay las recuperaciones relativas entre el 70 y el 119% siendo las desviaciones estándar relativas inferiores al 20%.

Bibliografía

[1] L. Xie, R. Jiang, F. Zhu, Hong Liu, G. Ouyang, Anal. Bioanal. Chem. 406 (2014) 377–399.
[2] M. Reza Nabid, R. Sedghi, R. Hajimirza, H.A. Oskooie, M.M. Heravi, Microchim. Acta 175 (2011) 315.

DETERMINACIÓN DE MICOTOXINAS CON ACTIVIDAD ESTROGÉNICA EN AGUAS MEDIANTE EXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA UTILIZANDO UN POLÍMERO DE IMPRONTA MOLECULAR Y CROMATOGRAFÍA DE LÍQUIDOS ACOPLADA A ESPECTROMETRÍA DE MASAS

Javier González Sálamo y Bárbara Socas Rodríguez
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutores: Javier Hernández Borges y Miguel Ángel Rodríguez Delgado
UD Química Analítica, Departamento de Química

Las micotoxinas son metabolitos secundarios producidos por diferentes especies de hongos con una importante toxicidad. Entre ellos, la zearalenona (ZEN) y algunos de sus derivados han despertado un interés especial a raíz de su capacidad para interactuar con los receptores endocrinos, con el consecuente perjuicio para la salud humana [1]. A pesar de que estos compuestos se han detectado principalmente en alimentos debido, entre otros factores, a su uso como promotores del crecimiento del ganado, en la actualidad existe una cierta preocupación por la posible contaminación de los ecosistemas acuáticos.

Debido a que este tipo de compuestos se pueden encontrar en las aguas a nivel de trazas, es necesario llevar a cabo una etapa de preconcentración de la muestra. Una de las técnicas más utilizadas en la actualidad es la extracción en fase sólida (SPE) para la que se están proponiendo nuevos sorbentes, como los polímeros de impronta molecular (MIPs), que amplíen tanto su selectividad como su campo de aplicación.

En este trabajo, se ha llevado a cabo la extracción de cinco micotoxinas con actividad estrogénica (ZEN, α-ZAL, β-ZAL, α-ZEL y β-ZEL) de diferentes muestras de agua empleando la SPE con un MIP comercial como sorbente. Para la separación y determinación de los compuestos seleccionados se ha empleado un cromatógrafo de líquidos de alta eficacia (HPLC) acoplado a un espectrómetro de masas, equipado con una trampa de iones como analizador. La validación de la metodología propuesta ha puesto de manifiesto que la extracción es repetible, con recuperaciones comprendidas entre el 63 y el 101% y RSDs entre días inferiores al 20%. Además, se han alcanzado límites de detección del método en el rango de los ng/L.

Bibliografía:

[1] Socas-Rodríguez B., Asensio-Ramos M., Hérnandez-Borges J., Herrera-Herrera A.V., Rodríguez-Delgado M.A., TrAC-Trends Anal. Chem., 44 (2013) 58.
[2] Lucci P., Núñez O., Galceran M.-T., J. Chromatogr. A, 1218 (2011) 4828.

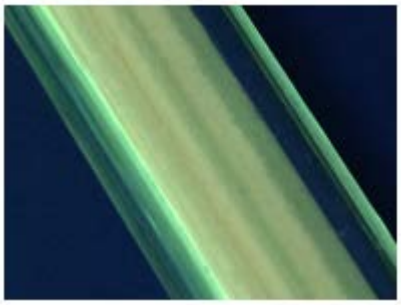
IMPRESIÓN 3D DE MARTERIALES CERÁMICOS PARA APLICACIONES MEDIOAMBIENTALES

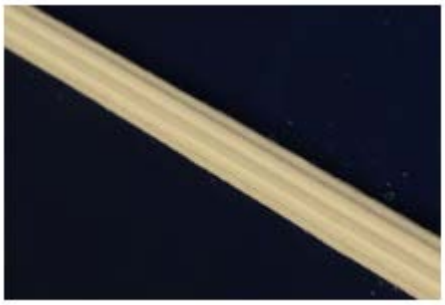
Lorena Hernández Afonso
Máster de Investigación en Química
Tutores: Ricardo Fernández González, Pedro Esparza y Juan Carlos Ruiz Morales
UD Química Inorgánica, Departamento de Química

Dentro de la preocupación social por los temas de contaminación global el de los contaminantes emergentes (productos farmacéuticos que son liberados a las aguas de los ríos y mares) es uno de los más destacados. Un método de eliminarlo es mediante el uso del TiO_2 y la energía del sol mediante una reacción fotocatalítica que permite degradarlos.

En este trabajo mostramos la versatilidad de la impresión 3D para diseñar e imprimir estructuras cerámicas en 3D que posteriormente son impregnadas de TiO_2 para su uso como fotocatalizador.

El comportamiento de estos nuevos catalizadores 3D se comprueba a través de la fotodregadación de una molécula modelo de contaminante coloreado como el azul de metileno y un sistema fotoquímico que permite reproducir la radiación solar.





Bibliografía

- Hernández Rodríguez, E. M.; Acosta Mora, P.; Méndez Ramos, J; Borges Chinea, E.; Esparza Ferrera, P; Canales Vázquez, J; Núñez, P & Ruiz Morales, J.C. (2014). Prospective use of the 3D printing technology for the microstructural engineering of Solid Oxide Fuel Cell components. *Boletín de la sociedad Española de cerámica y vidrio.* Vol 53 (5), 213-216.
- Borges, E. M.; Hernández, T & Esparza, P. (2013). Photocatalysis as a potential tertiary treatment of urban wastewater: new photocatalytic materials. *Clean Techn Environ Policy* (16), 431–436.
- Borges, Mª Emma; García, Dulce María; Hernández, Tania; Ruiz Morales, Juan Carlos & Esparza, Pedro. (2015). Supported Photocatalyst for Removal of Emerging Contaminants from Wastewater in a Continuous

APLICACIONES BIOTECNOLÓGICAS DE LA IMPRESIÓN 3D

Alejandra Cardona Correa y Álvaro Santana Mayor
3º Química

Tutores: Ricardo Fernández González y Juan Carlos Ruiz Morales
UD Química Inorgánica, Departamento de Química

La impresión 3D ha incrementado su atención en los últimos años desde que se han abaratado los costes de las impresoras. Esta tecnología permite fabricar desde implantes cerámicos biocompatibles a temperatura ambiente, hasta figuras plásticas de nuestros personajes de cómic favoritos. Uno de los campos que más ha avanzado con esta técnica es el de la biotecnología porque permite la fabricación de órganos y estructuras óseas a precios más económicos que con otras técnicas [1].

Nos vamos a centrar en la impresión Tridimensional en polvo (3DP) que es atractiva para la fabricación directa de implantes biocerámicos y de estructuras rígidas, que usan un archivo de diseño asistido por ordenador (.stl) para la ingeniería del objeto deseado por deposición localizada de un líquido aglutinante en capas de polvo cerámico finas. Este método es adecuado para procesar materiales óseos sintéticos, basados en fosfatos de calcio o magnesio. Estos materiales poseen notable biocompatibilidad y bioactividad debido a su similitud química con la fase mineral del hueso.

Al mismo tiempo mostramos las posibilidades de impresión 3D, dentro del grupo de “Nano y Microingeniería de materiales de la ULL”, con un nuevo sistema que permite imprimir estructuras biocompatibles (Figura 1).

Fig. 1. Imágenes de los diseños imprimidos con la impresora cerámica ProJet360

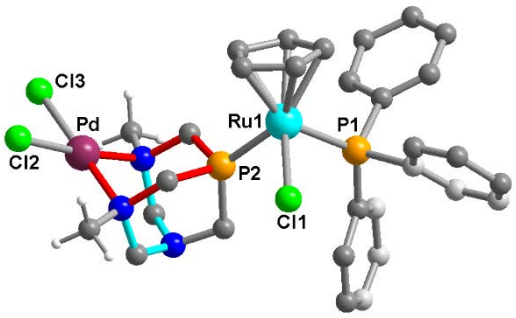
Bibliografía

[1] 3D printing of biomaterials. MRS Bulletin, 40 (2) February 2015.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DEL COMPLEJO BIMETÁLICO [RuClCp(PPh_3)-μ-dmoPTA-1κP:2k^2*N*,*N*'-$PdCl_2$]

Elizabeth Zenaida Mendoza Nozeman
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutores: [a]Pablo Lorenzo Luis y [b]Antonio Romerosa
[a]UD Química Inorgánica, Departamento de Química (ULL) y [b]Área de Química Inorgánica, Departamento de Química y Física (UAL)

Las fosfinas terciarias acuosolubles han sido ampliamente usadas dada su capacidad para estabilizar los centros metálicos y conferirles propiedades particulares. A lo largo de los últimos años, el Grupo donde realizo mi Tesis Doctoral, ha investigado las posibilidades del ligando PTA (*1,3,5-triaza-7-phospaadamantano*) y sus derivados mPTA (*N-metil*) y dmPTA (*N,N´-dimetil*). Mientras que los ligandos PTA y mPTA no sufren hidrólisis, el dmPTA elimina H_2CO en presencia de una disolución acuosa de KOH, dando lugar al ligando dmoPTA (*3,7-dimetil-1,3,7-triaza-5-phosphabiciclo[3.3.1]nonano*). Este nuevo ligando, presenta propiedades coordinativas particulares al disponer de una posición de coordinación blanda, el átomo de fósforo, y dos posiciones de coordinación duras con la capacidad de formar anillos quelato. Su capacidad coordinante ha permitido obtener una variedad de complejos bimetálicos [RuClCp(PPh_3)-μ-dmoPTA-1κP:2κ^{2}N,N´-MX]·(M = Co, Ni, Zn; X = Cl, acac-κ^{2}O,O´) con propiedades catalíticas y como marcadores biológicos. Hasta el momento, todos los complejos bimetálicos obtenidos se caracterizaban por la coordinación de un metal de la primera serie de transición a los átomos de N-quelantes. En esta comunicación, presentamos la síntesis y caracterización de un nuevo compuesto bimetálico [RuClCp(PPh_3)-μ-dmoPTA-1κP:2κ^{2}N,N´-$PdCl_2$]· que muestra cómo los átomos de N del ligando dmoPTA son capaces también, de coordinar átomos metálicos blandos como el Pd(II), abriendo la puerta a la síntesis de una gran variedad de complejos con los metales de la segunda serie de transición.



Bibliografía

[1] A. Mena-Cruz, P. Lorenzo-Luis, A. Romerosa, M. Saoud, M. Serrano-Ruiz, Inorg. Chem. 46 (2007) 6120.
[2] A. Mena-Cruz, P. Lorenzo-Luis, A. Romerosa, M. Serrano-Ruiz, Inorg. Chem. 47 (2008) 2246.
[3] A. Mena-Cruz, P. Lorenzo-Luis, V. Passarelli, A. Romerosa, M. Serrano-Ruiz, Dalton Trans. 40 (2011) 3237.
[4] M. Serrano-Ruiz, L.M. Aguilera-Sáez, P. Lorenzo-Luis, J.M. Padrón, A. Romerosa, Dalton Trans. 42 (2013) 11212.

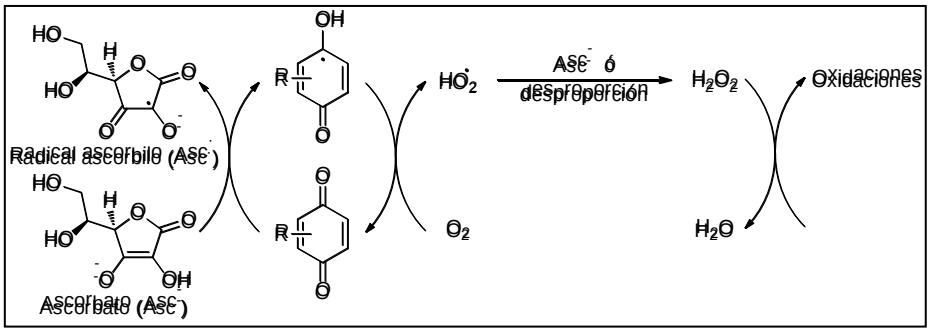
OXIDACIONES CON AIRE PROMOVIDAS POR ASCORBATO

Diego M. Monzón y Gastón Silveira-Dorta
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutor: Romen Carrillo
Instituto Universitario de Bio-Orgánica Antonio González, Departamento de Química Orgánica

Las oxidaciones son procesos fundamentales en la química. Sin embargo, los oxidantes químicos convencionales suelen ser tóxicos y existe una creciente demanda académica y social por métodos de oxidación respetuosos con el medio ambiente.

En este sentido, el oxígeno parece ser un oxidante ideal por su abundancia, porque es medioambientalmente benigno y por su bajo coste, sobre todo si se usa directamente del aire. No obstante, la reacción directa entre el dioxígeno (estado triplete) y las moléculas orgánicas (estado singlete) es un proceso prohibido por espín,[1] por lo que muestran una cinética extremadamente lenta y generalmente se realizan mediante catálisis con metales de transición, temperaturas elevadas y en algunos casos, los reactivos empleados son tóxicos y/o muy caros.

En esta comunicación, se describe un método nuevo para realizar oxidaciones con aire combinando ascorbato (vitamina C) y menadiona (vitamina K_3) a temperatura ambiente y a presión atmosférica.[2] El peróxido de hidrógeno generado *in situ* por este método puede actuar de forma eficiente como oxidante de ácidos arilborónicos y otros sustratos orgánicos. Este procedimiento puede encontrar aplicación en tratamiento de aguas residuales, en cosméticos e incluso en suministro de energía de nanomotores.



Agradecimientos
Este proyecto ha sido financiado por la comisión europea (FP7-REGPOT-2012-CT2012-31637-IMBRAIN) y el Ministerio de Economía y Competividad (MINECO) y cofinanciado con fondos FEDER (CTQ2011-28417-C02-01).

Bibliografía
1. (a) B. F. Minaev, *Int. J. Quantum Chem.* **1980**, *17*, 367–374; (b) A. L. Buchchenko and V. L. Berdinsky, *J. Phys. Chem.* **1996**, *100*, 18292–18299.
2. G. Silveira-Dorta, D. M. Monzón, F. P. Crisóstomo, T. Martín, V. S. Martín, R. Carrillo *Chem. Commun*. **2015**, DOI: 10.1039/C5CC01519G.

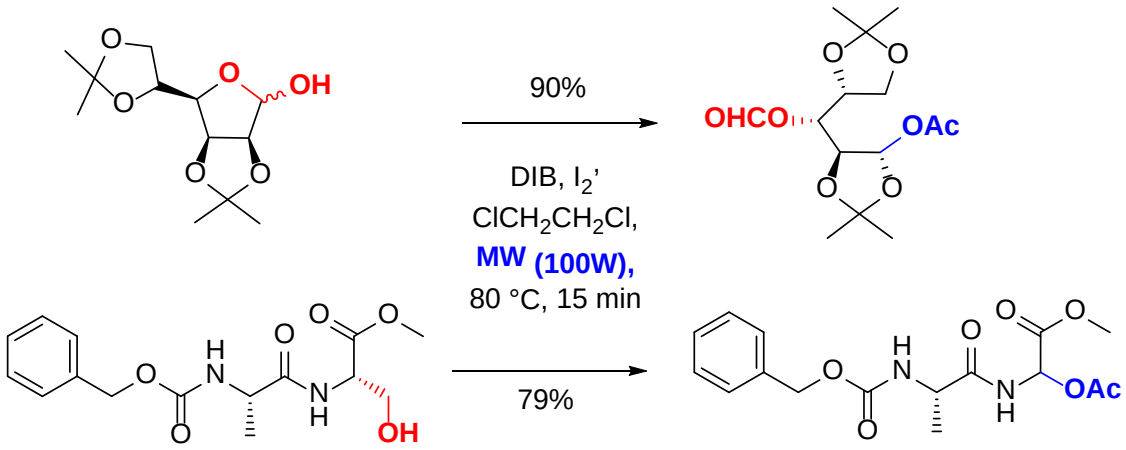
ACTIVACION CON MICROONDAS DE PROCESOS SECUENCIALES

Carmen Carro Sabina
Máster de Investigación en Química
Tutores: Alicia Boto
Instituto de Productos Naturales y Agrobiología - CSIC

La línea de investigación de nuestro grupo se centra en desarrollar procesos secuenciales de escisión radicalaria-oxidación-adición de nucleófilos,[1] con aplicación a la síntesis de productos bioactivos de interés. Las reacciones de escisión que tienen lugar en estos procesos requieren de una energía que hasta ahora se conseguía por irradiación con luz visible, lo cual presenta dificultades al llevar las reacciones a escala industrial. Una posible alternativa es la aplicación de calor, bien de forma convencional o por irradiación con microondas.

En los últimos años, el uso de la energía de microondas como fuente de calor en diversas reacciones químicas ha adquirido una creciente popularidad entre la comunidad científica. Los investigadores han observado que el empleo de las microondas reduce los tiempos de reacción, así como, mejora los rendimientos, la quimio, regio- y estereoselectividad de los procesos.[2]

En esta comunicación se comentará el uso de microondas para activar varios procesos secuenciales y su comparación con la activación con luz visible.



Bibliografía

1) (a) Romero-Estudillo, I.; Boto, A.; Batchu, V. R. *Adv. Synth. Cat.*. **2014**, *356,* 3742- 3748. (b) Romero-Estudillo, I.; Boto, A. *Org. Lett.* **2013**, *15*, 5778-5781. (c) Saavedra, C.J.; Boto, A.; Hernández, R.; Miranda, J. I.; Aizpurua, J. M. *J. Org. Chem.* **2012**, *77*, 5907-5913. (d) Miguélez, J.; Batchu, V. R.; Boto, A. *J. Org. Chem.* **2012**, *77*, 7652-7658.
2) Kappe, C. O. *Acc. Chem. Res.* **2013**, *46*, 1579-1587.

COMPARACIÓN DE NANOPARTÍCULAS DE ORO OBTENIDAS POR DIFERENTES MÉTODOS

Adrián Gutiérrez Serpa[a] y Paula Rodríguez Santana[b]
[a]4º Química, [b]Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutores: Ana Isabel Jiménez Abizanda y Francisco Jiménez Moreno
UD Química Analítica, Departamento de Química

En las últimas décadas la nanotecnología y el desarrollo de nuevos nanomateriales se han visto fuertemente impulsados a partir del descubrimiento de la relación existente entre la estructura y la función de estos materiales. Esta relación es particularmente interesante para las nanopartículas de metales nobles donde sus propiedades también dependen de su forma y tamaño. Las nanopartículas metálicas presentan unas propiedades ópticas, electrónicas y químicas excepcionales siendo éstas muy diferentes a las que presenta el metal a escala macroscópica.[1]

Entre las nanopartículas metálicas, las nanopartículas de oro son de especial interés debido a sus aplicaciones como sensores, en catálisis, electrónica, etc. Desde el

CO-PROCESAMIENTO CATALÍTICO DE ACEITE DE FRITURA Y GASOIL EN UNA PLANTA PILOTO

Héctor de Paz Carmona [a] y María Ángeles Romero Vazquez [b]
[a] Doctorado en Química e Ingeniería Química, [b] Centro de investigación de Cepsa
Tutoras: Andrea Brito Alayón y Joana Frontela Delgado
Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica

El Green Diesel o HVO (Hydroprocessing Vegetable Oil) es un biocombustible formado principalmente por n-parafinas, que se obtiene a partir del hidrotratamiento catalítico de aceite vegetal en condiciones de alta temperatura y presión. Una prometedora vía para la obtención de este biocombustible a nivel industrial es el co-procesamiento catalítico de aceite de fritura y gasoil.

La utilización de aceite de fritura en este co-procesamiento es de gran importancia, porque no sólo se utiliza un residuo contaminante para el medio ambiente, sino que se obtiene un biocombustible de propiedades excepcionales.

Una planta piloto es una planta de proceso pero a una escala reducida. Su utilización es determinante para estudiar la viabilidad de procesos, tanto desde el punto de vista técnico, como en el económico.

El Centro de Investigación de Cepsa (CIC), que desde hace tiempo ha estudiado el efecto de la incorporación de aceite en el proceso de hidrodesulfuración del gasoil, dispone de una planta piloto con la que se pueden emular procesos industriales de hidrotratamiento de gasoil a una escala menor.

Este trabajo, realizado en el CIC, analiza el proceso de obtención de HVO en una planta piloto por medio de un co-procesamiento de aceite de fritura con gasoil de destilación directa (20/80), y presenta algunos resultados preliminares de dicho estudio como son: la influencia del co-procesamiento de aceite de fritura sobre las propiedades del gasoil y el funcionamiento de la planta piloto, así como los productos, n-parafinas y propano entre otros, que se han formado como consecuencia de este co-procesamiento en la planta piloto.

Bibliografía

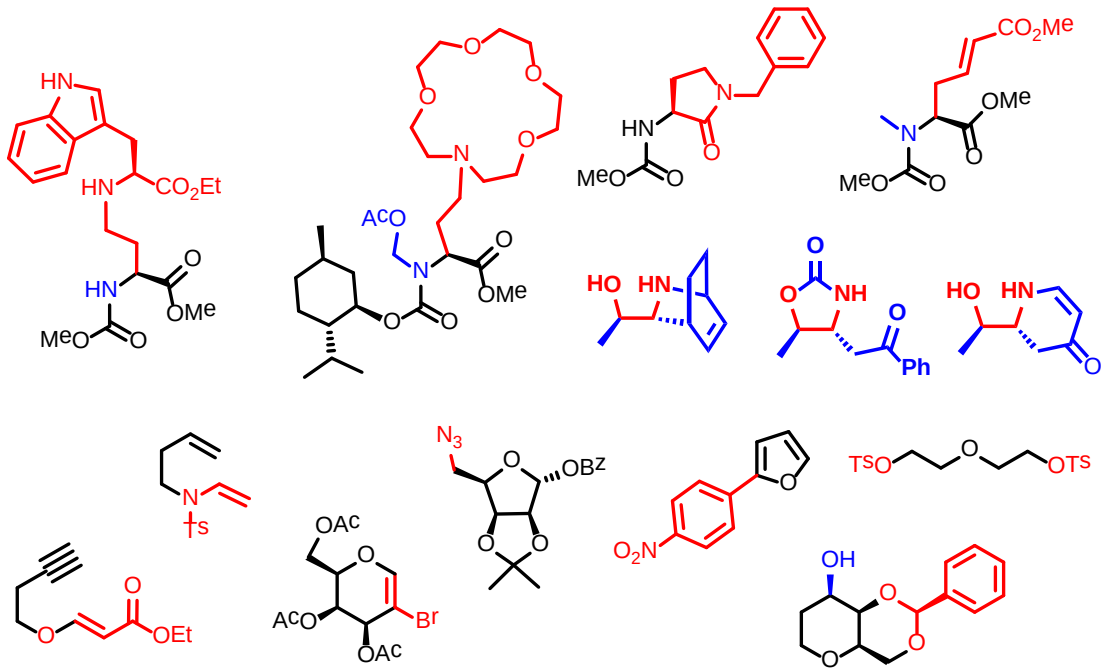
- Al-Sabawi M., Chen J. *Hydroprocessing of Biomass-Derived Oils and Their Blends with Petroleum Feedstocks.* Energy Fuels 2012; 26:5373-5399.
- Bezergianni S., Dimitriadis A., Karonis D. *Diesel decarbonization via effective catalytic Co-hydroprocessing of residual lipids with gas-oil.* Fuel 2014; 136:366-373.

PRODUCCIÓN DE REACTIVOS QUÍMICOS FINOS EN CANARIAS

Carmen Carro Sabina
Máster de Investigación en Química
Tutores: Fernando Lobo y Gabriel García-Llanos
Biosigma S.L.

En esta comunicación se comenta el proceso de desarrollo de una línea de productos químicos finos, que serán producidos en Canarias.

La empresa BSC Chemicals está llevando a cabo un proyecto de producción de productos químicos con un alto valor añadido, en colaboración con distintos grupos de química orgánica de Canarias. Los productos que próximamente se comercializarán incluyen esteroles, carbohidratos, péptidos y organocatalizadores asimétricos.



OBTENCIÓN Y CARACTERIZACIÓN DEL ACEITE EXTRAÍDO DE TRES ESPECIES DE TÁRTAGO

Sonia Guerra Rodríguez, Rafael Navarro Soto y Imanol Quina García
3º Ingeniería Química Industrial
Tutores: Andrea Brito Alayón y Karina Rodríguez Espinoza
Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica

El tártago o higuerilla es una planta cuyas semillas contienen una buena proporción de aceite, crece de forma silvestre en la mayoría de países tropicales y tolera bien las variaciones en el clima. El aceite de higuerilla (ricino), es uno de los productos de mayor importancia a nivel mundial debido a sus muchas aplicaciones que incluyen usos en medicina, cosméticos, tintas, jabones, desinfectantes, lubricantes, barnices y esmaltes. Su alta resistencia a las elevadas presiones le permite ser aprovechado como lubricante de aviones. También se están realizando estudios para su utilización en la producción de biodiesel, y ya es usado y cultivado para este fin en diversos países como China, India y Brasil. Este aceite posee características químicas que lo clasifican como el único de su naturaleza y se obtiene por extracción mecánica, con solventes o la combinación de ambas técnicas. El aceite de ricino es un líquido viscoso, amarillo pálido, no volátil y es algunas veces utilizado como un purgante.

Al igual que otros aceites vegetales el aceite de ricino es un triglicérido, el cual químicamente es una molécula de glicerol con cada uno de los tres grupos hidroxilos esterificados con un acido graso de cadena larga. Su principal componente es el ácido ricinoleico (ácido 12-hidroxi-9-octadecaenoico), el cual se encuentra formando el triglicérido simple denominado trirricinoleína, cuya concentración en porcentaje por peso es cercana al 90%.

En este trabajo de investigación se plantea el estudio de la extracción y caracterización de aceite de tres especies de tártago, así como la influencia de la cáscara tanto en el rendimiento como en la calidad de estos aceites, para determinar la posibilidad de su uso en un futuro en la obtención de biodiesel. Se ha encontrado, que en general, el aceite presenta un índice de acidez menor que uno, lo que hace que sea idóneo para su conversión en biodiesel en una sola etapa.

Bibliografía

- López, L. B. Cultivos industriales. Ediciones Mundi-Prensa. Madrid, 2002, 493-495, 506, 512, 524p.
- Berman, P., Nizri, S. y Wiesman, Z. (2011). Castor oil biodiesel and its blends as alternative fuel. Biomass and Bioenergy, 35, 2861-2866.

CLASIFICACIÓN DE SUELOS DE CANARIAS: COMPARACIÓN ENTRE ANÁLISIS DISCRIMINANTE Y REDES NEURONALES ARTIFICIALES

Patricia Gil Hernández y Paula Rodríguez Santana[a]
[a] *Doctorado en Química e Ingeniería Química*
Tutores: Ana Isabel Jiménez Abizanda y Francisco Jiménez Moreno
UD Química Analítica, Departamento de Química

Las Redes Neuronales Artificiales (Artificial Neural Networks, ANN) y el Análisis Discriminante Lineal (LDA) son métodos multivariantes de clasificación cuyo objetivo es describir el comportamiento de una variable dependiente (cualitativa), a través de la información aportada por un conjunto de variables independientes (cuantitativas). La finalidad última de estos métodos es asignar muestras desconocidas a un determinado grupo (variable dependiente) a partir del conocimiento de las variables independientes.[1]

Para alcanzar este objetivo, en ambos casos es necesario construir un modelo que relacione ambos tipos de variables haciendo uso de un grupo de muestras conocidas que se denomina conjunto de entrenamiento.[2] El ANN, método computacional no lineal inspirado en el funcionamiento del cerebro humano, utiliza funciones considerablemente complejas que no imponen restricciones sobre el número de variables de entrada (muestras que se quieren clasificar) y salida (grupo de pertenencia) para crear el modelo.[3,4] El LDA establece la relación entre muestras y grupos de pertenencia creando una nueva variable (función discriminante) obtenida a partir de combinaciones lineales de las variables independientes para cada uno de los grupos.[5]

En el presente trabajo se comparan los resultados obtenidos al clasificar diversas muestras de suelos de las Islas Canarias haciendo uso de las redes neuronales artificiales y del análisis discriminante lineal utilizando los contenidos en metales pesados como variables independientes. La clasificación se realiza atendiendo a distintos criterios de agrupamiento como la isla de origen, la provincia, latitud o altitud.

Bibliografía

1. M. Otto, *Chemometrics*, Wiley-VCH, 2007.
2. S. Wold, K. Esbensen, P. Geladi, Chemolab, 2(1-3), 37-52, 1987.
3. F. Marini, Neural Networks, En Comprenhensive Chemometrics. Chemical and Biochemical Data Analysis Volume 3, S.D. Brown, R. Tauler, B. Walczak (Ed.), Elsevier, Oxford, 477-505, 2009.
4. J. Zupan, Acta Chimica Slovenica, 41, 327-352, 1994.
5. R. Todeschini, D. Ballabio, Multivariate Classification for Qualitative Analysis, En Infrared Spectroscopy for Food Quality Analysis and Control, S. Da-Wen (Ed.), Elsevier, Amsterdam, 2009.

CARACTERIZACIÓN GEOFÍSICA Y GEOQUÍMICA DEL SUBSUELO DE LAS ISLAS CANARIAS A TRAVÉS DEL SISTEMA DE GALERÍAS

Pedro A. Torres González
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutores: Ana I. Jiménez Abizanda[a], José M. García Fraga[a] y Vicente Soler Javaloyes[b]
[a]*UD Química Analítica, Departamento de Química*, [b]*Estación Volcanológica de Canarias - CSIC*

Las Canarias son islas volcánicas intraplaca con una historia evolutiva que se remonta a unos 70 millones de años. Dentro de la etapa histórica, últimos 500 años, se han producido 16 erupciones siendo La Palma y Tenerife las islas que concentran la mayoría de ellas aunque la mayor se produjo en Lanzarote entre 1730 y 1736. Independientemente de la teoría que explique la formación de las islas, el magma que da origen a sus edificios se encuentra localizado entre los 20 a 40 km de profundidad. Caso particular es el de Tenerife y su estratovolcán Teide-Pico Viejo en el que diversos estudios indican la presencia de una cámara magmática.

Durante su ascenso a la superficie, además de generar terremotos y deformación del terreno, el magma liberará una considerable cantidad de gases que se encuentran disueltos en él como consecuencia de la despresurización siendo los principales componentes: H_2O, CO_2, SO_2, H_2S, He, Rn, etc. Las vías preferenciales de ascenso son fracturas preexistentes en el terreno, fallas locales y límites estructurales. También puede darse el caso de una interacción con acuíferos locales alterando sus propiedades físico-químicas.

Con el afán de la explotación de los recursos hidrológicos subterráneos de las islas, se ha realizado un gran número obras de captación en forma de pozos y galerías. Muchas de estas pueden emplearse como laboratorio para monitorizar tanto las emanaciones gaseosas como las variaciones físico-químicas de los acuíferos ligadas a la actividad y evolución de los sistemas volcánicos de las islas.

En este trabajo se presentan los niveles de base de diferentes parámetros relacionados con el estado de actividad volcánica y que pueden ser medidos en este tipo de infraestructuras de captación como son la concentración de diferentes gases y parámetros físico-químicos del agua.

LÍQUIDOS IÓNICOS PARA LA PRODUCCIÓN DE BIODIÉSEL

Laura Díaz Rodrígueza
Doctorado de Química e Ingeniería Química
Tutora: Andrea Brito Alayón
Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica

El uso de líquidos iónicos ha suscitado un gran interés en los últimos años dentro del campo de la Química y la Ingeniería. Este interés se debe principalmente a que estos compuestos presentan una gran utilidad como disolventes, a la vez que han dado excepcionales resultados en otras aplicaciones donde constituyen un nuevo medio para las reacciones químicas. Junto con la utilización de fluidos supercríticos, la sustitución de los tradicionales disolventes orgánicos volátiles (VOCs) por líquidos iónicos no volátiles como medio de reacción, ofrece una solución conveniente a algunos de los problemas medioambientales que sufre la industria química actual, como son las emisiones de gases dañinos.

Todas sus aplicaciones están basadas en sus propiedades únicas entre las que destacan su presión de vapor prácticamente nula y una alta estabilidad química y térmica que permite su reutilización.

La posibilidad de modular las propiedades físicas y químicas de los líquidos iónicos ha dado lugar a una gran variedad de aplicaciones como catalizadores tanto en síntesis orgánica como inorgánica, biocatálisis y polimerizaciones.

Uno de los casos más investigados consiste en la utilización de líquidos iónicos en catálisis ya que éstos no sólo pueden ser utilizados como disolventes sino que, además, pueden actuar como catalizador aumentando la velocidad de la reacción, el rendimiento o cambiando su selectividad.

El objetivo principal de este trabajo es dar una visión general sobre la tendencia actual sobre el uso de líquidos iónicos en la producción de biodiésel

TÉCNICAS ANALÍTICAS DE EXTRACCIÓN ASISTIDAS POR ULTRASONIDOS: UNA VISIÓN GENERAL

Providencia González-Hernández y Priscilla Rocío-Bautista
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutores: Verónica Pino, Juan H. Ayala y Ana María Afonso
UD Química Analítica, Departamento de Química

Son innumerables las aplicaciones de los ultrasonidos en Química Analítica: en etapas de acondicionamiento previo de muestras (desgasificación, digestión o limpieza), o en otras etapas más específicas, como la extracción, derivatización, homogenización o emulsificación.

Las propiedades emulsificantes de los ultrasonidos fueron descritas en 1927, sin embargo el uso eficiente de los ultrasonidos en técnicas analíticas de extracción de muestras sólidas no tuvo lugar hasta 1970.

El uso de ultrasonidos en técnicas de extracción se basa en el efecto físico creado a partir de las denominadas burbujas de cavitación, las cuales se forman en el ciclo de depresión de la onda. Esta depresión o caída de presión (hasta unidades negativas), causa que la estructura del líquido literalmente se abra para formar burbujas microscópicas. A continuación, se produce un ciclo de compresión, en el cual las burbujas de ven obligadas a contraerse y, en consecuencia, implotan. La ruptura de estas burbujas de cavitación puede generar presiones de cientos de atmósferas y temperaturas de miles de grados centígrados en micropuntos del medio, dando lugar a ondas de choque que se dispersan por el medio de reacción.

El empleo de ultrasonidos es de enorme interés debido a las ventajas que presenta en el tratamiento de muestras, tales como minimización del consumo de energía en el proceso, simplificación de la instrumentación necesaria, minimización los tiempos de extracción, reducción del consumo de disolventes orgánicos en la etapa extractiva, extracción simultánea de varias muestras, y, además, la técnica no es necesariamente destructiva.

Tradicionalmente, los ultrasonidos se empleaban en técnicas analíticas simplemente como metodología de extracción directa de los analitos a partir de una muestra sólida. No obstante, a medida que se han desarrollado otras técnicas micro-extractivas, la tendencia actual es la combinación de las mismas con ultrasonidos, como por ejemplo la microextracción en fase líquida (LPME), destacando la microextracción líquido-líquido dispersiva (DLLME); o la microextracción en fase sólida dispersiva (μ-DSPE); todas ellas facilitadas sin duda por la aplicación de ultrasonidos.

El objetivo del presente trabajo es aportar una visión general sobre las tendencias actuales del uso de ultrasonidos en procesos de extracción y preconcentración en Química Analítica en los últimos cinco años, resaltando las principales aplicaciones.

Bibliografía

- A. SZRENIAWA-SZTAJNERT, B. ZABIEGALA, J. NAMIESENIK, *Trends Anal. Chem*. 2013, 49, 45-54.
- Y. PICÓ, *Trends Anal. Chem*. 2013, 43, 84-99.

MICROEXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA DE ESPACIO EN CABEZA ACOPLADA A CROMATOGRAFÍA DE GASES PARA LA DETERMINACIÓN DE SUBPRODUCTOS DE DESINFECCIÓN DE AGUAS

Providencia González-Hernández
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutores: Verónica Pino, Juan H. Ayala y Ana M. Afonso
UD Química Analítica, Departamento de Química

Los desinfectantes de base clorada, habitualmente empleados para inhibir la actividad de los microorganismos patógenos en agua potable, reaccionan con la materia orgánica generando subproductos de desinfección (DBPs). Los trihalometanos (THMs) y los ácidos haloacéticos (AHAs) son los DBPs que se encuentran en mayor cantidad en las aguas potables; es por ello que han sido los más ampliamente estudiados. La exposición del ser humano a estos compuestos supone un riesgo debido a su carácter mutagénico o cancerígeno.

Por otro lado, en los últimos años se ha alertado de una nueva generación de DBPs en muestras de aguas potables que presentan riesgos para el ser humano similares o incluso superiores. Así, en procesos donde se emplea monocloroamina como desinfectante o coagulantes nitrogenados es habitual que se encuentren presentes DBPs nitrogenados (N-DBPs). Dentro de los N-DBPs los compuestos más estudiados han sido los haloacetonitrilos (HANs) y los halonitrometanos (HNMs), los cuales son incluso más tóxicos que los THMs y AHAs regulados.

Los métodos habituales para la determinación de DBPs emplean cromatografía de gases (GC) en combinación con una etapa de extracción/preconcentración con el fin de aumentar la sensibilidad del método. En los métodos oficiales se recoge la extracción liquido-liquido tradicional (LLE) así como la microextracción en fase solida (SPME), debido a que son técnicas sencillas con una sensibilidad suficiente a la requerida para llegar a los límites de detección exigidos por la normativa vigente (del orden de los $ng \cdot L^{-1}$). No obstante, la SPME resulta más atractiva que la LLE, puesto que es fácil de automatizar y más respetuosa con el medioambiente en cuanto a la ausencia de disolvente orgánicos.

En el presente trabajo se lleva a cabo la separación cromatográfica mediante GC y detección por ionización de llama (FID) de un conjunto de 18 DBPs (4 trihalometanos, 7 haloacetonitrilos y 7 halonitrometanos), empleando microextracción en fase sólida de espacio en cabeza (HS-SPME) como método extractivo. Asimismo, se optimizaron las variables más influyentes del método HS-SPME, tales como temperatura y tiempo de extracción, temperatura y tiempo de desorción, y fuerza iónica, haciendo uso de diseños experimentales.

Bibliografía

- S. CHOWDHURY, K. ALHOOSHANI, T. KARANFIL. *Water Res.* 2014, 53, 68-109.
- Q. LUO, X. CHEN, Z. WEI, X. XU, D. WANG, Z. WANG. J. Chromatograph. A, 2014, 1365, 45-53.

NUEVOS RECUBRIMIENTOS DE MICROEXTRACCIÓN EN FASE SÓLIDA BASADOS EN POLÍMEROS DE LÍQUIDOS IÓNICOS EN COMBINACIÓN CON CROMATOGRAFÍA LÍQUIDA DE ALTA RESOLUCIÓN

Idaira Pacheco-Fernández
Máster Universitario en Química
Tutores: Verónica Pino y Juan H. Ayala
UD Química Analítica, Departamento de Química

La microextracción en fase sólida (SPME) es una técnica utilizada en química analítica para la extracción y preconcentración de analitos procedentes de una gran variedad de muestras medioambientales, biológicas, farmacéuticas, o alimentarias, caracterizada por su alta sensibilidad y la facilidad de automatización.

A medida que las aplicaciones de la técnica se han ido expandiendo, las investigaciones se han centrado en el desarrollo de nuevos recubrimientos que puedan mejorar las características de los siete materiales existentes a nivel comercial.

Así, los polímeros de líquidos iónicos (PILs) constituyen una alternativa interesante como recubrimientos para las fibras de SPME, ya que presentan un conjunto de propiedades únicas, tales como alta estabilidad térmica y química, reducida presión de vapor a temperatura ambiente, y gran versatilidad y facilidad de síntesis. Además, investigaciones recientes señalan que los PILs entrecruzados presentan mayor resistencia mecánica, la cual asegura el mantenimiento de la integridad de la fibra durante más tiempo en la modalidad de inmersión directa, y mayor viscosidad, la cual garantiza la formación de recubrimientos uniformes.

En este trabajo se evalúa la eficacia extractiva de recubrimientos de SPME basados en PILs entrecruzados, trabajando por primera vez en la modalidad de inmersión directa y en combinación con cromatografía líquida de alta resolución (HPLC) con detección de diodos en línea (DAD), para la determinación de cinco disruptores endocrinos, específicamente bisfenol A, 4-cumilfenol, 4-octilfenol, 4-*tert*-octilfenol y 4-*n*-nonilfenol, en muestras acuosas medioambientales. Asimismo, se efectúa una comparativa sistemática con recubrimientos de SPME comerciales. Es importante señalar que hasta la fecha todos los recubrimientos de SPME basados en PILs sólo han mostrado su utilidad en combinación con cromatografía de gases (GC).

Bibliografía

TIEN D. HO, BRUNA R. TOLEDO, LEANDRO W. HANTAO, JARED L. ANDERSON, Chemical immobilization of crosslinked polymeric ionic liquids on nitinol wires produces highly robust sorbent coatings for solid-phase microextraction. *Analytica Chimica Acta* **843** (2014) 18-26

EVALUACIÓN DE UN MÉTODO ANALÍTICO DE 'SCREENING' PARA LA MONITORIZACIÓN DE LA OXIDACIÓN DE SULFURO DE HIDRÓGENO EN CULTIVOS BACTERIANOS

Sergio Ramos García
3º Química
Tutores: Guillermo González Hernández[a] y José Manuel González Hernández[b],
[a]UD Química Analítica, Departamento de Química, [b]Departamento de Bioquímica, Microbiología, Biología Celular y Genética

El *"Proyecto Malaspina"*[(1)] (www.expedicionmalaspina.es) fue una expedición de investigación oceanográfica interdisciplinar en el que se estudian, entre otros, los ciclos de los elementos y el impacto de la actividad humana en la biosfera. Los océanos, con una profundidad media de aproximadamente 4000 metros, constituyen el mayor ecosistema del planeta; y dentro de este ecosistema marino, el bacterioplancton tiene un papel importante en las actividades que ocurren en él. Así, la mitad de la fijación de CO_2 del planeta ocurre en los océanos y las bacterias contribuyen en gran medida. También sus actividades son importantes en los ciclos del azufre, nitrógeno y otros. El Proyecto de Investigación 2014/0001216[(2)] estudia la capacidad de bacterias del género *Sulfitobacter* para oxidar compuestos inorgánicos de azufre. El análisis de los datos recabados durante la campaña *Malaspina* muestra que esta bacteria es abundante en zonas profundas del medio marino. Estas bacterias oxidan el sulfuro de hidrógeno (H_2S) para generar energía en forma de ATP. El H_2S es una molécula central en el intercambio de azufre entre los océanos y la atmósfera. Por otra parte, este tóxico medioambiental se genera, además, en plantas de tratamiento de aguas residuales y residuos sólidos, por lo que este tipo de bacterias tienen importante potencial biotecnológico.

El trabajo de investigación presentado aquí tiene como objetivo optimizar un método analítico de determinación de H_2S, adaptado a los cultivos microbianos, que permita cuantificar la capacidad oxidativa de estas cepas marinas de sulfitobacterias sobre los compuestos reducidos del azufre. En la bibliografía se describen métodos analíticos de determinación del H_2S generado en los cultivos de distintas especies bacterianas. El presente estudio se basa en la adaptación de esos trabajos descritos a la especial circunstancia de las sulfitobacterias, es decir, adición del sulfuro y posterior detección del compuesto remanente en los cultivos.

Se ha llevado a cabo la optimización del método de determinación de H_2S mediante la adaptación de la reacción de formación de azul de metileno. En ésta, se hace reaccionar el H_2S con N,N-dimetil-*p*-fenilendiamina (n,n-DPD), que en presencia de Fe(III) y en medio ácido se oxida para formar azul de metileno. El compuesto generado en las necesarias bajas concentraciones de trabajo se puede medir, no obstante, espectrofotométricamente, al menos con carácter analítico de 'screening'. Se evalúa la capacidad de oxidación de H_2S de las sulfitobacterias en medios de cultivo adaptados para seguir la transformación de este compuesto.

(1) Proyecto del programa CONSOLIDER-INGENIO2010 (CSD2008-00077) del Ministerio de Ciencia e Innovación.
(2) Proyecto del Plan Propio de Investigación de la Universidad de La Laguna 2014.

ACTIVIDAD ANTIOXIDANTE DE LAS VARIEDADES LOCALES DE CEBADA (*Hordeum vulgare* L.) DE CANARIAS

María Panizo Casado
Ingeniero Agrónomo
Tutores: Domingo Ríos[1], Desirée Afonso[2], Elena M. Rodríguez[3]
[1] Dpto. Ingeniería, Producción y Economía Agraria (ULL), [2]Centro de Conservación de la Biodiversidad Agrícola de Tenerife, [3]Área de Nutrición y Bromatología (ULL)

En canarias, la cebada (*Hordeum vulgare* L.) es un cultivo tradicional, que forma parte del policultivo de secano junto con otros cereales como el trigo o el millo y también con diversas leguminosas. Si bien las producciones agrarias tradicionales de la isla no tienen la importancia y presencia de antaño, alrededor de dichos cultivos se ha conformado el paisaje de importantes comarcas agrícolas de la isla, usos y tradiciones que hoy forman parte de nuestro acervo etnográfico y cultural y atesoran cultivares que componen una rica biodiversidad agrícola.

Las semillas de cebada pueden ser estudiadas como una fuente viable de potentes antioxidantes frente a la oxidación en los aceites vegetales. Por otro lado, la adición de cebada, ya sea entera o la capa exterior del grano, en mezclas de comida seca podría contribuir a mejorar las propiedades antioxidantes y ayudaría a mitigar el estrés oxidativo relacionado con condiciones de enfermedad.

En el presente estudio, se determinó la actividad antioxidante en 42 entradas locales de cebada canaria suministradas por el Centro de Conservación de la Biodiversidad Agrícola de Tenerife. Para ello se utilizó el método DPPH (1,1-difenil-2-picrilhidrazil). Dicho método fue optimizado para cebada. La coloración violeta (517 nm) de una disolución de DPPH disminuye al contactar con una sustancia oxidante radicalaria. La mezcla de extracto y DPPH se dejó reposar en oscuridad, determinando como tiempo óptimo de reposo 25 minutos. Posteriormente se leyó la absorbancia.

Se observó una gran variabilidad en el contenido de actividad antioxidante entre las distintas entradas, siendo sus contenidos medios (mínimo-máximo) de 0,773 mg de equivalentes de trolox/g (0,512-0,817 mg equivalentes de trolox/g). La actividad antioxidante de las cebadas varió significativamente ($P < 0,05$) en función de la isla de procedencia. Así, las cebadas de La Palma y La Gomera presentaron contenidos significativamente superiores ($P < 0,05$) que los determinados en las de Fuerteventura.

CONTENIDO DE COMPUESTOS FENÓLICOS EN LAS VARIEDADES LOCALES DE CEBADA (*Hordeum vulgare* L.) DE CANARIAS

María Panizo Casado
Ingeniero Agrónomo
Tutores: Domingo Ríos[1], Desirée Afonso[2], Elena M. Rodríguez[3]
[1] Dpto. Ingeniería, Producción y Economía Agraria (ULL), [2]Centro de Conservación de la Biodiversidad Agrícola de Tenerife, [3]Área de Nutrición y Bromatología (ULL)

La cebada (*Hordeum vulgare* L.) se consume en la dieta humana principalmente a través de las bebidas alcohólicas (cerveza y alcohol destilado), pero también en forma de panes, gachas y tortas, como sustituto del café. Asimismo, la población Canaria ha consumido, y consume, sus granos tostados y molidos en forma de gofio.

En los últimos años ha crecido el interés por incluir en la dieta humana una mayor proporción de cebada. Sus granos contienen una amplia gama de compuestos fenólicos que se concentran en las partes externas del grano siendo los principales contribuyentes a la actividad antioxidante del cereal. El salvado es una excelente fuente de ácidos fenólicos que podrían ser usados como antioxidantes naturales.

El sector del cereal en las islas presenta particularidades que convierten al grano local en un producto singular, de forma que, lejos de competir con el grano importado, el cereal local ocupa un nicho de mercado diferente, ofreciendo productos de alto valor añadido, de gran calidad y reconocible por un cada vez más creciente grupo de consumidores que valoran el origen y la calidad de los productos. Por todo ello, es importante conocer el potencial que las variedades locales de las Islas ofrecen de cara a fomentar su uso y promoción.

En este trabajo se ha determinado el contenido de compuestos fenólicos de 42 entradas locales de cebada, las cuales fueron suministradas por el Centro de Conservación de la Biodiversidad Agrícola de Tenerife (CCBAT). Los compuestos fenólicos se determinaron por colorimetría empleando el reactivo de Folin-Ciocalteu.

Se observó una gran variabilidad en el contenido de compuestos fenólicos entre las distintas entradas, siendo sus contenidos medios (mínimo-máximo) de 161 mg de ácido gálico/100 g (98-246 mg/100 g). En función del número de carreras se encontraron diferencias significativas para el contenido en este elemento de manera que las cebadas locales de dos carreras poseyeron un contenido significativamente ($P < 0,05$) mayor (210 mg de ácido gálico/100 g) que las de seis (158 mg de ácido gálico/100 g).

TÉCNICAS ANALÍTICAS DE EXTRACCIÓN ASISTIDA POR MICROONDAS: UNA VISIÓN GENERAL

Idaira Pacheco-Fernández[1] y **María José Trujillo-Rodríguez**[2]
[1]Máster Universitario en Química, [2]Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutores: Venerando González, Juan H. Ayala y Verónica Pino
UD Química Analítica, Departamento de Química

La mayoría de los análisis de muestras complejas requieren de una o varias etapas previas de extracción y preconcentración de los analitos objeto de estudio, para poder superar la complejidad de la matriz en estudio, y poder determinar los bajos niveles de concentración a los que se encuentran en general los analitos.

Por otra parte, la mayoría de estos procedimientos de extracción y preconcentración son complicados, largos, tediosos, y constituyen la principal fuente de error de la metodología analítica, particularmente en el caso de las muestras sólidas.

En este sentido, la extracción asistida por microondas (MAE), desarrollada en los últimos treinta años, se presenta como una alternativa más eficaz y rápida que los procedimientos convencionales de extracción de muestras complejas.

Las microondas son una radiación no-ionizante con una frecuencia comprendida entre 300 MHz y 300 GHz. En un medio líquido, las moléculas con un momento dipolar magnético efectivo rotan a una elevada velocidad en la presencia de microondas. Como resultado de este movimiento, se produce un rápido calentamiento del medio. En el caso de la MAE, la radiación de microondas se utiliza para elevar la temperatura de una muestra en contacto con un disolvente extractante, favoreciendo el reparto de los analitos desde la matriz de la muestra al disolvente.

El objetivo principal de este trabajo es ofrecer una visión general de las tendencias observadas en los últimos cinco años en lo que se refiere a la utilización de radiación de microondas en técnicas analíticas de extracción y preconcentración. Así, cabe destacar: (1) la utilización de MAE como etapa previa a otra etapa extractiva o microextractiva, utilizando en algunos casos instrumentación híbrida o acoplamientos en línea; (2) la utilización de MAE para asistir y mejorar una técnica extractiva o microextractiva; y (3) la sustitución de los disolventes convencionales utilizados en MAE por otros medioambientalmente más compatibles.

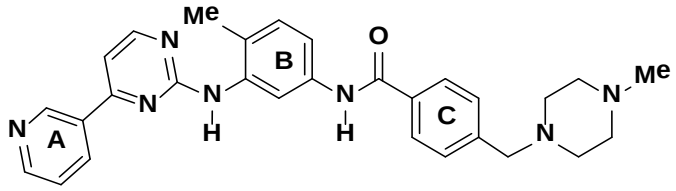
Bibliografía

- J.L. LUQUE-GARCÍA, M.D. LUQUE DE CASTRO, Where is microwave-based analytical equipment for solid sample pre-treatment going? *Trends in Analytical Chemistry* **22** (2003) 90.

DISEÑO PARA LA SÍNTESIS DE NUEVOS ANÁLOGOS DE COMPUESTOS ANTILEUCÉMICOS BASADOS EN ESTRUCTURAS PRESENTES EN PRODUCTOS NATURALES

Marta Fariña Ramos
Máster de Investigación en Química
Tutores: Celina García[a] y Ignacio Brouard[b]
[a] Instituto Universitario de Bio-Orgánica "Antonio González" (IUBO-AG), Departamento de Química Orgánica, [b] Instituto de Productos Naturales y Agrobiología, IPNA-CSIC

El uso de inhibidores específicos de la tirosina kinasa tipo Imatinib ha sido una gran ayuda en el tratamiento de algunos tipos de leucemia.[1] Sin embargo, la búsqueda de nuevos medicamentos, con menos efectos secundarios y con una mayor tolerancia, constituye hoy en día un reto dentro de la investigación en el área de Química Médica. En este trabajo se describe el diseño y la aproximación a la síntesis sencilla y eficiente de nuevas moléculas inspiradas en las chalconas naturales y que pretenden imitar estructural y conformacionalmente al Imatinib.



Imatinib

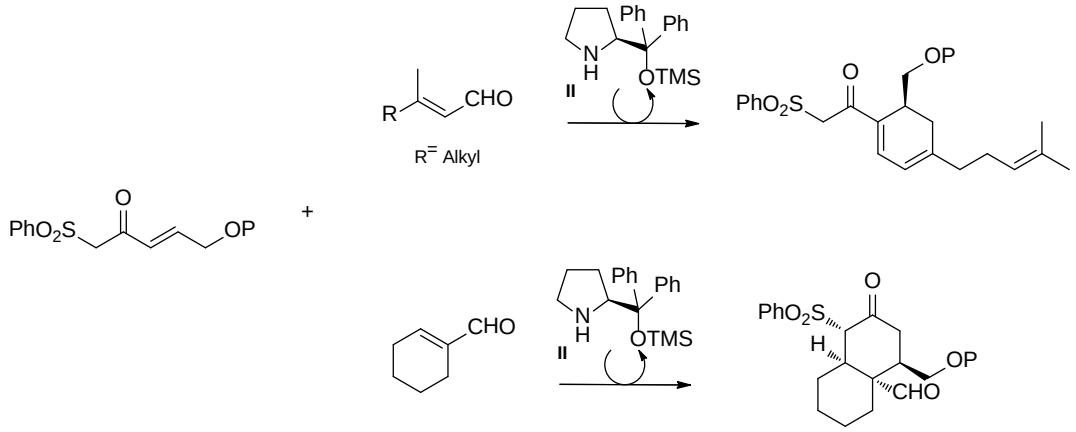
Agradecimientos
Este proyecto ha sido financiado por el Ministerio de Economía y Competividad (MINECO), cofinanciado con fondos FEDER (CTQ2011-28417-C02-01) y por el proyecto FP7-REGPOT-2012-CT2012-31637-IMBRAIN.

Bibliografía
1.- Capdeville, R.; Buchdunger, E.; Zimmermann, J.; Matter, A. *Nature Reviews Drug Discovery* **2002***, 1,* 493-502*;* Deininger, M.; Buchdunger, E.; Druker, B. J. *Blood* **2005,** *105,* 2640-2653.

ORGANOCATÁLISIS CON SULFONILO Y REACTIVO DE NAZAROV CON APLICACIÓN "DOS"

Samuel Delgado[a], Javier Peña y Gastón Silveira Dorta [b].
[a]*Máster en evaluación y desarrollo de medicamentos,* [b]*Doctorado en Química e Ingeniería Química*
Tutor: David Diez.
Departamento de Química Orgánica (USAL)

Desde el comienzo del nuevo milenio, el campo de organocatálisis asimétrica ha sido el foco de una inmensa investigación y desarrollo[1]. Este avance se ha producido a través de la "fiebre del oro" y ha emergido como una poderosa herramienta para la síntesis asimétrica, convirtiéndose así, en un utensilio cada vez más adecuado para la química sintética basado en la diversidad orientada a la síntesis (DOS)[2]. Importante para este desarrollo ha sido la aplicación de una variedad de grupos funcionales, tales como las sulfonas, como participantes en la reacción[3], que han contribuido en gran medida a la aplicabilidad sintética de la organocatálisis asimétrica. En el siguiente esquema se muestra la síntesis de cis-decalinas basados en estos reactivos.



Bibliografía
[1] Bertelsen, S.; Jørgensen, K. A. *Chem. Soc. Rev.* **2009**, *38*, 2178.
[2] Trabocchi, A. Diversity-oriented synthesis: basics and applications in organic synthesis, drug discovery, and chemical biology; Hoboken, New Jersey, Wiley, **2013**.
[3] Alba, A.-N. R.; Companyo, X. and Rios, R. *Chem. Soc. Rev.* **2010**, *39*, 2018.

ÓXIDO DE GRAFENO: SÍNTESIS, CARACTERIZACIÓN Y APLICACIONES COMO SOPORTE EN DISPOSITIVOS ELECTROQUÍMICOS DE CONVERSIÓN Y ALMACENAMIENTO DE ENERGÍA

Giovanni Lemes Pacheco y Jonathan Florez Montaño
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutor: Elena Pastor Tejera
UD Química Física, Departamento de Química

Los dispositivos electroquímicos de conversión y almacenamiento de energía, como electrolizadores y pilas de combustible, están llamados a jugar un papel importante en el desarrollo de una economía alternativa basada en fuentes de energía renovables y la utilización de hidrógeno como combustible. En particular, la reacción de evolución de hidrógeno (HER) en los electrolizadores aparece como un proceso que permite el aprovechamiento de la energía renovable sobrante, que no puede ser utilizada directamente en la red, para la generación de H_2 que luego pueda ser utilizado en pilas de combustible. Sin embargo, los catalizadores que se usan para este proceso (basados en metales nobles como el Pt), muestran altos sobrepotenciales y costes elevados, lo que hace que no sean competitivos económicamente. Debido a esto, se ha considerado el desarrollo de nuevos materiales basados en metales no-nobles que funcionen como electrocatalizadores, como los materiales de Ni y sus aleaciones, que son estables en medio alcalino y exhiben una actividad relativamente alta para la HER si se compara con el Pt. Recientemente, se ha utilizado el óxido de grafeno (GO) y el óxido de grafeno reducido (rGO) como soporte en la preparación de nanomateriales compuestos o nanocomposites de Ni [1]. Este tipo de materiales ha mostrado buenas características tanto morfológicas como de distribución del metal, que al combinarlas con las excelentes propiedades conductoras del rGO, producen un incremento en la actividad catalítica hacia la HER. En este contexto, en el presente trabajo se describe la síntesis y caracterización de GO y su implementación como soporte de nanoestructuras de Ni para ser utilizado como materiales para el cátodo bien en electrolizadores (HER) o en pilas de combustible de baja temperatura (reacción de reducción de oxígeno, RRO).

Bibliografía:

A. HAN, *A Robust Hydrogen Evolution Catalyst Based on Crystalline Nickel Phosphide Nanoflakes on Three-Dimensional Graphene/Nickel Foam: Ultrahigh Activity for Electrocatalytic Hydrogen Production from pH 0-14,* J. Mater. Chem. A., 2015. Volumen 3, paginas 1941-1946

DIGESTIÓN ANAEROBIA DE CULTIVOS ENERGÉTICOS DE MICROALGAS

Alicia Torres Gil[a], Suleima Padrino Hernández[b]
[a] Alumna de Tercer Ciclo del Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica, [b] Alumna de 4º curso del Grado en Ingeniería Industrial Química
Tutores: [c] Andrea Brito Alayón, [d] Raimundo Arvelo Álvarez
[c] Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica

La sustitución de los combustibles denominados fósiles o tradicionales por combustibles derivados de biomasa (biocombustibles) cobra una importancia vital en nuestros días por varias razones fundamentales, como que son combustibles alternativos, fuentes de energía renovable, instrumento de lucha contra el deterioro medioambiental y factor de desarrollo de la agricultura e industrias derivadas.

La última generación de biocombustibles centra su atención en los organismos microscópicos como son las microalgas, pero su viabilidad está comprometida por la necesidad de desarrollo de tecnologías específicas para el procesado las microalgas, desde su cultivo hasta su almacenamiento y de la optimización de todas las etapas del proceso de obtención de biocombustibles, para que así los balances energéticos y económicos sean favorables.

La digestión anaerobia consiste en la descomposición biológica de materia orgánica en ausencia de oxígeno para producir biogás (CH_4 + CO_2) y ácidos orgánicos. Este proceso, aplicado tanto a las microalgas sin tratar como a los residuos sólidos obtenidos en los distintos procesos de aprovechamiento de las mismas, ha generado gran interés ya que el biogás obtenido puede utilizarse tanto para usos energéticos (el CH_4) como para el cultivo de las microalgas (CO_2 como fuente de carbono).

El objetivo principal de este trabajo es evaluar cualitativa y cuantitativamente la producción de biogás vía digestión anaerobia a partir de biomasa de microalgas, además de su co-digestión con otros residuos.

Bibliografía

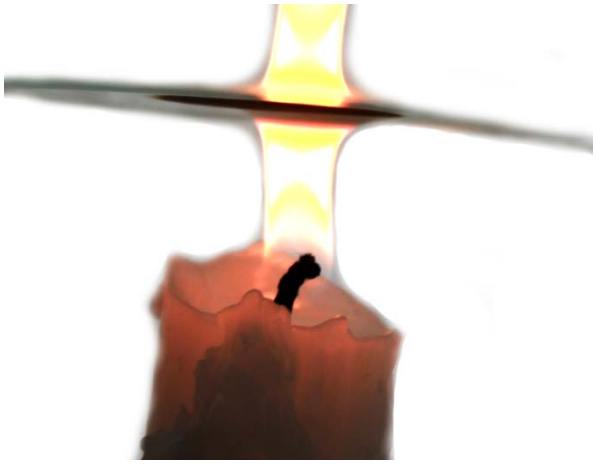
- García Peña E.I., Parameswaran P., Kang D.W., Canul-Chan M., Krajmalnik-Brown R. Anaerobic digestión and co-digestion processes of vegetable and fruit residues: Process and microbial ecology. Bioresource Technology 2011; 102: 9447-9455
- Sialve, B., Bernet, N., Bernard, O. Anaerobic digestion of microalgae as a necessary step to make microalgal biodiesel sustainable. Biotechnology Advances 2009; 27: 409-416

CARBON QUANTUM DOTS
LA QUÍMICA DEL CARBONO EN NANOPARTÍCULAS

Giada Caniglia y Andrea Favero Giorgis
3º Química
Tutores: María del Mar Afonso Rodriguez y José Antonio Palenzuela López
IUBO-AG Departamento de Química Orgánica

El trabajo experimental que presentamos está basado en la nanotecnología, concretamente en las nanopartículas de carbono (Carbon Quantum Dots, CQD), que pueden revolucionar nuestra tecnología.

Partiremos de la simple combustión de una vela (parafina) y a través de técnicas experimentales, lograremos extraer, a partir del hollín depositado, nanopartículas de carbono fluorescentes.



Los Quantum Dots que se emplean en la industria actualmente (televisores y pantallas de móviles por ejemplo), están basados en metales como selenio o cadmio, y deben su emisión de luz a su pequeño tamaño que hace que se muestren los fenómenos cuánticos. De hecho, la frecuencia de la luz emitida depende de su tamaño, no de su composición. Se conocen desde 1981.

Los CQD son la nueva generación de nanopartículas compuestas solo de carbono y fueron descubiertos en 2004. Si bien el carbón es un mineral de aspecto negro, poco soluble en agua y de casi inapreciable fluorescencia, los CQD poseen como nanopartículas una alta dispersión en agua, dejando soluciones transparentes y con una elevada fluorescencia.

A diferencia de los Quantum Dots clásicos, que cuentan con una larga trayectoria, los actuales Carbon Quantum Dots no presentan toxicidad en los ensayos realizados hasta la fecha, siendo bio-compatibles y útiles para bio-imagen, ya que se introducen en las células. Otra característica es la facilidad para modificar su superficie y variar su fluorescencia o para proporcionar alta resistencia al photobleaching (destrucción fotoquímica del fluoróforo). En esta presentación se muestra la preparación de CQD y alguna transformación química que muestra su potencial para uso en la industria bio-tecnológica.

OXIDACIONES BIOLÓGICAS
QUÉ PODEMOS APRENDER DEL SISTEMA P450

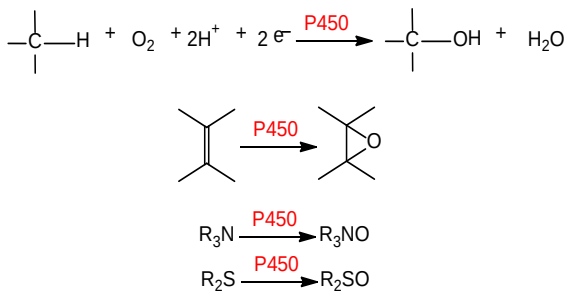
Giada Caniglia y Andrea Favero Giorgis
3º Química
Tutor: Pedro Francisco Martín Zarza
UD Química Inorgánica, Departamento de Química

La química de los procesos oxidativos ha atraído la atención, y en muchos casos la pasión de los químicos durante más de un siglo. Este interés ha sido alimentado por varias áreas de la ciencia, con la química orgánica y la bioquímica a la cabeza hoy en día. Los metales de transición tienen un vínculo fundamental con esta área, pues algunos de ellos están implicados en muchas trasformaciones oxidativas.

El estado actual de la química de la oxidación, en especial la relacionada con los procesos industriales está en una encrucijada, no sólo por el alto valor añadido de estos procesos, sino por el alto coste medio ambiental. Es deseable pues usar sistemas catalíticos que tengan al dioxígeno como oxidante terminal, aprovechando su abundancia y economía.

El dioxígeno es potencialmente reactivo desde una perspectiva termodinámica, sin embargo es cinéticamente neutro como consecuencia de su estado fundamental triplete. Por otra parte, esta barrera cinética puede sobrepasarse cuando el dioxígeno se encuentra asociado, entre otros, a metales de transición paramagnéticos. No debe extrañarnos la presencia de centros metálicos en sistemas biológicos que permiten enlazar y activar al dioxígeno para una gran variedad de reacciones de enorme trascendencia biológica.

Las porfirinas, son sistemas ampliamente utilizados por la Vida para enlazar metales en sistemas enzimáticos implicados en una amplia variedad de tareas. Uno de esos sistemas es el del citocromo P450, superfamilia de hemoproteínas implicadas en una amplia variedad de procesos desde la biotransformación a la detoxificación. La actividad monooxigenasa de estas enzimas implica la inserción de un átomo de oxígeno del O_2 a un sustrato (generalmente a un enlace R-H de un hidrocarburo) mientras que el otro átomo de oxígeno se reduce a agua.



Analizaremos diferentes aspectos de la naturaleza del sitio activo de este peculiar sistema estableciendo relaciones con su actividad monooxigenasa. Esa función catalítica y su aprovechamiento en diversos aspectos de la tecnología química, relacionados con procesos de oxidación, también será analizada.

BÚSQUEDA DE MOLÉCULAS BIOACTIVAS: RESULTADOS PRELIMINARES DEL ANÁLISIS ESTRUCTURAL Y FARMACOLÓGICO DEL EXTRACTO EN ACETATO DE ETILO DE *PSEUDONOCARDIA SP*

Rosalía González Brito
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutores: Ana R. Díaz-Marrero, José M. Padrón, José J. Fernández, Manuel Norte
Departamento de Química Orgánica e Instituto Universitario de Bio-Orgánica "Antonio González"- (CIBICAN)

Los productos naturales son fuente del 60% de los principios activos formulados en medicamentos,[1] siendo la clase Actinobacteria productora de aproximadamente el 70% de los productos naturales usados en la clínica.[2]

De 23000 compuestos naturales bioactivos producidos por microrganismos, un 37% es producido por bacterias filamentosas, los actinomicetos.[3]

Cada año centenares de nuevos compuestos son descubiertos de los metabolitos secundarios de los organismos marinos.[4,5,6] Un número considerable de estos productos naturales de origen marino muestran bioactividad. Las bacterias y los actinomicetos marinos son productores de una proporción significativa de estos nuevos compuestos químicos bioactivos de origen marino.[5]

Bajo el marco de las líneas de investigación desarrolladas en el grupo de Productos Marinos de la Universidad de La Laguna se lleva a cabo la búsqueda de nuevas moléculas bioactivas procedentes de bacterias marinas. En la presente comunicación se expondrán la metodología y los resultados preliminares obtenidos del estudio químico y de la evaluación biológica del extracto en acetato de etilo de una actinobacteria de origen marino, del género *Pseudonocardia*, aislada a partir del medio de cultivo del dinoflagelado *Alexandrium peruvianum*.

Agradecimientos: Trabajo financiado por los proyectos IMBRAIN (FP7-REGPOT-2012-CT2012-31637) y MINECO (SAF2011-28883-CO3-01). R.G.B. agradece al Ministerio de Educación, Cultura y Deporte la beca FPU 2013 concedida.

Bibliografía:

1. Martins, A.; Vieira, H.; Gaspar, H.; Santos, S. *Mar. Drugs,* **2014**, *12*, 1066-1101.
2. Manivasagan, P.; Kang, K-H.; Sivakumar, K.; Li-Chan, E.C.Y.; Oh, H-M.; Kim, S-K. *Environ. Toxicol. Phar*. **2014**, *38*, 172-188.
3. Demain, A.L. *J. Ind. Microbiol. Biotechnol.,* **2014**, *41*,185–201.
4. Blunt, J.W.; Copp, B.R; Keyzers, R.A.; Munro, M.H.G.; Prinsep, M.R. *Nat. Prod. Rep*., **2015**, *32*, 116-211 y otras revisiones previas de la serie "Marine natural products" (*Royal Society of Chemistry)*.
5. Hu, Y.; Chen, J.; Hu, G.; Yu, J.; Zhu, X.; Lin, Y.; Chen, S.; Yuan, J. *Mar. Drugs.,* **2015**, *13*, 202-221.
6. Skropeta, D.; Wei, L. *Nat. Prod. Rep.* **2014,** *31*, 999-1025.

MICROORGANISMOS DE ORIGEN MARINO COMO FUENTE DE NUEVAS SUSTANCIAS BIOACTIVAS

Rosalía González Brito
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutores: Ana R. Díaz-Marrero, José M. Padrón, José J. Fernández y Manuel Norte
Departamento de Química Orgánica e Instituto Universitario de Bio-Orgánica "Antonio González"- (CIBICAN)

Desde el año 2008, más de mil nuevos productos naturales de origen marino son aislados e identificados anualmente, siendo un número considerable bioactivos. Una proporción significativa de estos nuevos compuestos químicos es producida por bacterias y actinomicetos.[1,2,3] Lo que convierte a los microorganismos marinos en un foco importante de investigación.

Del conjunto de los productos naturales de origen marino, ocho están comercializados en medicamentos y más de una decena están siendo sometidos a ensayos clínicos.[4] Más de la mitad de estos productos podrían tener su origen metabólico en bacterias marinas,[5] bien como organismos libres o asociadas a macroorganismos.

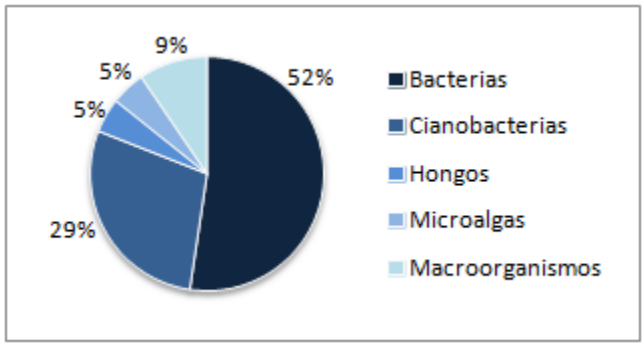


Figura 1. Datos porcentuales del posible origen metabólico de los productos naturales marinos formulados en medicamentos o en diferentes fases de ensayos clínicos.[5]

En la presente comunicación se exponen la metodología y los resultados preliminares de bioactividad obtenidos del estudio de diferentes especies bacterianas aisladas a partir de cultivos de dinoflagelados y de muestras del litoral de las Islas Canarias.

Agradecimientos: Trabajo financiado por los proyectos IMBRAIN (FP7-REGPOT-2012-CT2012-31637) y MINECO (SAF2011-28883-CO3-01). R.G.B. agradece al Ministerio de Educación, Cultura y Deporte la beca FPU 2013 concedida.

Bibliografía:

1. Blunt, J.W.; Copp, B.R; Keyzers, R.A; Munro, M.H.G; Prinsep, M.R. *Nat. Prod. Rep.*, **2015**, *32*, 116-211.
2. Hu, Y.; Chen, J.; Hu, G.; Yu, J.; Zhu, X.; Lin, Y.; Chen, S.; Yuan, J. *Mar. Drugs.,* **2015**, *13*, 202-221.
3. Skropeta, D.; Wei, L. *Nat. Prod. Rep.* **2014,** *31*, 999-1025.
4. Martins, A.; Vieira, H.; Gaspar, H.; Santos, S. *Mar. Drugs,* **2014**, *12*, 1066-1101.
5. Gerwick, W.H.; Fenner, A. M. *Microb. Ecol.* **2013,** *65*, 800-806.

ESTUDIO QUIMIOMÉTRICO DE SUELOS DE LA MACARONESIA

Ana Beatriz Carmona Rodríguez
Graduada en Química
Tutores: [a]Juan Pedro Pérez Trujillo y [b]Zulimar Hernández
[a]UD Química Analítica,Departamento de Química (ULL), [b]Departamento de Geología, Geoquímica y Química Agrícola (UAM)

Una de las líneas de trabajo de nuestro grupo de investigación en los últimos años ha sido el estudio de los vinos producidos en los diferentes archipiélagos de la Macaronesia (Azores, Madeira, Canarias y Cabo Verde)[1,2] mediante el análisis de un amplio número de parámetros. Estos estudios nos han permitido evaluar la calidad de los vinos de los vinos y establecer los parámetros más adecuados para llevar a cabo una relación entre los vinos y su origen geográfico como método de detección de posibles fraudes. Para profundizar en el conocimiento de los parámetros que influyen en la calidad del vino (suelo, clima, prácticas vitícolas, prácticas enológicas, etc) se ha procedido a realizar un estudio exploratorio de los suelos vitícolas de diferentes zonas de la Macaronesia. Como una primera aproximación se seleccionaron 102 muestras de suelos vitícolas de diferentes Islas, en concreto, de las Islas de Pico y Terceira (Azores, Portugal), Lanzarote y El Hierro (Canarias, España), y Fogo (Cabo Verde).

A dichas muestras de suelo se le determinaron los siguientes parámetros: pH, suma de bases intercambiables (Ca^{2+}, Mg^{2+}, K^{+} y Na^{2+}), materia orgánica del suelo (MOS), retención de fósforo (P) y contenido de Al_o, Fe_o y Si_o.

De los resultados obtenidos de estos parámetros, los estudios de campo y los criterios de clasificación de suelos de la WRB[3,4] se procedió a realizar una clasificación de los suelos estudiados según el tipo de suelo.

Así mismo, se procedió al estudio de los resultados obtenidos mediante técnicas de análisis univariado y multivariado.

Bibliografía

[1] Juan Pedro Pérez Trujillo. Capítulo 16: Estudio del contenido metálico en vinos canarios con Denominación de Origen. Aportaciones al conocimiento del vino canario. Serie: Monografías nº LXXX. Sebastián Delgado Díaz (Ed).pp. 381 - 413. Tenerife. Instituto de Estudios Canarios, 2010. ISBN 978-84-88366-87-0

[2] Juan P. Pérez Trujillo; José E. Conde; María L. Pérez Pont; J. Câmara; José C. Marques. Content in metallic ions of wines from the Madeira and Azores archipelagos. Food Chemistry. 124, pp. 533 - 537. 2011.

[3] WRB (World reference base for soil resources). International soil classification system for naming soils and creating legends for soil map, 2007.

[4] WRB (World reference base for soil resources). International soil classification system for naming soils and creating legends for soil map, 2014.

UNA APROXIMACIÓN *QUÍMICA* AL ESTUDIO DE MINERALES NO CRISTALINOS EN SUELOS VOLCÁNICOS

Ana Beatriz Carmona Rodríguez
Graduada en Química
Tutores: [a]Zulimar Hernández y [b]Juan Pedro Pérez Trujillo
[a]Departamento de Geología, Geoquímica y Química Agrícola (UAM), [b]UD Química Analítica, Departamento de Química (ULL)

Los suelos volcánicos presentan un abundante contenido de minerales no cristalinos. Estos materiales amorfos de óxidos e hidróxidos de Fe y Al presentan una alta superficie específica y carga variable. Con frecuencia, los minerales cristalinos se determinan por técnicas de difracción de Rayos X, sin embargo los minerales con carga variable no presentan picos de reflexión bien definidos, por lo que se opta por métodos químicos para su determinación cuantitativa. En concreto, la extracción secuencial de Fe, Al y Si, en la que se distingue la forma metálica unida a la fracción mineral (complejos órgano-metálicos) de la fracción ligada a la materia orgánica del suelo (complejos Al-humus), ha sido ampliamente utilizada en la literatura de suelos volcánicos. En este estudio, se analizan suelos volcánicos de diferentes Islas de La Macaronesia, en concreto, de las Islas de Pico y Terceira (Azores, Portugal), Lanzarote y El Hierro (Canarias, España), y Fogo (Cabo Verde). Se realizan los siguientes análisis de rutina en las muestras de suelo: pH, suma de bases intercambiables (Ca^{2+}, Mg^{2+}, K^{+} y Na^{2+}), acidez por aluminio (Al^{3+}), materia orgánica del suelo (MOS) y retención de fósforo (P). El contenido de minerales amorfos se cuantifica por espectroscopía de absorción atómica con el índice (Al_o+ ½ Fe_o) y el cociente (Al_o/Si_o) tras la extracción previa de Fe, Al y Si con oxalato amónico 0,2 M.

Los resultados de los análisis realizados muestran que el mayor contenido de minerales no cristalinos se encuentra en las Islas de Fogo y Azores, seguidos de El Hierro y por último, Lanzarote, con independencia del contenido de MOS. Se concluye que el contenido de los minerales amorfos en suelos volcánicos depende tanto del material de origen como del régimen hídrico del suelo, aunque no se descarta el papel de las actividades antrópicas, realizadas por los agricultores, en la conservación de los minerales de carga variable en los suelos de estas Islas.

Bibliografía

- Shoji, S.; Dahlgren, R.; Nanzyo, M. Classification of volcanic ash soils. In: Shoji, S., Nanzyo, M., Dahlgren, R. (Eds.), Volcanic Ash Soils: Genesis, Properties and Utilization, Developments in Soil Science, Vol. 21. Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, 1993; pp. 73–100.
- Parfitt, N.; Russel, G.E.; Orbell. Weathering sequence of soils from volcanic ash involving allophane and halloysite. Geoderma, 1983; vol. 29, pp.41–57

PRIMEROS RESULTADOS DEL ESTUDIO FITOQUÍMICO DEL MACROALGA *Laurencia catarinensis*

Adrián Morales Amador,[a] Margarita González-Tijera[b] y Alberto J. Martín-Rodríguez[c]
[a]Doctorado en Química e Ingeniería Química, [b]Doctorado en Ecología y Biotecnología. Universidad Veracruzana (Mexico), [c]Plataforma Oceánica de Canarias
Tutores: José J. Fernández, Manuel Norte y María L. Souto
Departamento de Química Orgánica, Instituto Universitario de Bio-Orgánica "Antonio González", CIBICAN.

La adaptabilidad de la *biodiversidad* del océano a cambios constantes, producidos por la actividad de los propios organismos y las transformaciones geomorfológicas, induce la síntesis de novedosos productos naturales (PN), ofreciendo de este modo un *arsenal químico*, inexplorado en su mayoría, de potencial utilidad. Dentro de esta biodiversidad, las algas marinas son un grupo destacable en la búsqueda de PN, como resultado de una larga historia evolutiva ligada al origen de la vida. El complejo *Laurencia* (Rhodomelaceae) incorpora cuatro géneros que computan aproximadamente 180 especies de algas rojas, de las cuales se han evaluado fitoquímicamente unas 60, aislándose hasta el momento más de 600 compuestos halogenados[1] y otra gran cantidad de productos no halogenados,[2] ofreciendo actualmente novedosas y prometedoras estructuras.[3]

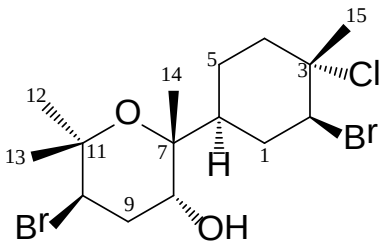


Ilustración 1. **Caespitol**

Como parte de nuestra investigación en productos bioactivos de fuentes marinas, hemos iniciado el estudio del alga roja *Laurencia catarinensis*, incluyendo su recolección, el proceso de extracción y un método cromatográfico que ha permitido el aislamiento y purificación del caespitol y cuatro derivados, siendo caracterizadas sus estructuras mediante técnicas de RMN mono- y bidimensional, además de iniciar su evaluación biológica ensayando su actividad anti-*quorum sensing*.

Bibliografía:

1. Guiry, M.D.; Guiry, G.M. AlgaeBase. World-wide Electronic Publication, National University of Ireland, Galway. 2010. http://www.algaebase.org.
2. Suzuki, M.; Vairappan, C.S. Halogenated Secondary Metabolites from Japanese Species of the Red Algal Genus Laurencia. (Rhodomelaceae, Ceremiales). Curr Top Phytochem. 2005, 7, 1-4.
3. Blunt, J.W.; Copp, B.R.; Munro, M.H.G.; Northcote, P.T.; Prinsep, M.R. Marine Natural Products. Nat Prod Rep. 2014, 25, 35-94.

EVALUACIÓN DE POSIBLES TRATAMIENTOS DEL LICOR NEGRO PROCEDENTE DE LA FABRICACIÓN DE PAPEL/CARTÓN A PARTIR DE *PENNISETUM SETACEUM*.

J. Rodríguez y L. Delgado
Proyecto Final de Carrera de Ingeniería Química
Tutor: Luis E. Rodríguez, Mª Luisa Vera y Carmen Arévalo.
Departamento de Ingeniería Química y Tecnología Farmacéutica.

El *Pennisetum Setaceum (Forssk. Chiov*., nombre común: plumero, rabo de gato) es una especie vegetal herbácea de la familia de las *Poaceae* introducida en las Islas Canarias en la primera mitad del siglo XX para su aplicación como planta ornamental en jardines de las zonas litorales. Las condiciones climáticas suaves características de las islas promovieron una rápida adaptación de la planta al ecosistema canario dando lugar a una proliferación incontrolada y adquiriendo la consideración de Especie Exótica Invasora (EEI). Tal colonización del ecosistema unido al renovado interés por el uso de materias primas alternativas y recursos vegetales no madereros, entre otros los residuos agrícolas y los de industrias agroalimentarias, para la producción de papel, han trazado una línea de investigación y desarrollo para la aplicación del *Pennisetum Setaceum* como planta productora de papel en las Islas Canarias, enmarcándose dentro del Programa Canario de Diseño para el Desarrollo Local Sostenible (PROCEDER). Sin embargo, dicha actividad productiva origina un residuo líquido denominado licor negro, altamente contaminante por su gran alcalinidad, y con grandes concentraciones de lignina, un polímero de gran valor añadido, que puede ser recuperado.

Con el propósito de resolver esta problemática se inició una línea de investigación dirigida a la gestión integral del residuo que incluía, por un lado, la optimización de las variables de operación (temperatura, tiempo, relación líquido/sólido y concentración de reactivo) en la fabricación del papel/cartón, que conduciría así a la reducción de la cantidad de licor negro producido y, por otro lado, su tratamiento para la recuperación de cada una de las fracciones integrantes del licor negro y su posterior aprovechamiento, de tal forma que el agua y la sosa pudieran ser recirculadas al proceso de producción y la lignina recuperada para su uso en otras aplicaciones. Los tratamientos estudiados han sido: sistemas de lagunaje; precipitación ácida; filtros percoladores y, finalmente, tecnología de membranas de ultrafiltración (UF) y microfiltración (MF), siendo éstas últimas las que ofrecieron los resultados más acordes al planteamiento propuesto en cuanto a sostenibilidad y ecología se refiere.

REDES METALO-ORGÁNICAS COMO PROMETEDORES MATERIALES DE EXTRACCIÓN EN QUÍMICA ANALÍTICA

Leila Nair Menghini-Peralta[a] y Priscilla Rocío-Bautista[b]
[a]Licenciada en Química, [b]Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutores: Verónica Pino y Ana María Afonso
UD Química Analítica, Departamento de Química

El desarrollo de nuevos materiales, y su posible uso como novedosos sorbentes, resulta de gran interés en Química Analítica. Se persigue la utilización de nuevos materiales en métodos analíticos en aras de conseguir: la reducción del consumo de disolventes orgánicos (tóxicos y caros) en el proceso de análisis, la simplificación del proceso global, y, además, la mejora de la sensibilidad del método analítico.

Entre el grupo de nuevos materiales, cabe destacar las redes metalo-orgánicas, que se conocen fundamentalmente con las siglas MOFs derivadas del inglés *metal-organic frameworks*. Los MOFs son estructuras cristalinas formadas por la unión de centros metálicos y ligandos orgánicos, constituyendo redes tridimensionales extensas. Sin duda, la posibilidad de disponer de diferentes bloques de iones metálicos y de ligandos orgánicos hace posible, al menos desde el punto de vista teórico, la creación de un número casi infinito de MOFs con diversas estructuras, topologías y propiedades. Entre las propiedades más importantes de los MOFs cabe señalar que poseen las estructuras con mayor superficie específica conocida, debido a su porosidad permanente a nanoescala; y, además, presentan buena estabilidad térmica. Por otra parte, las síntesis de MOFs son relativamente sencillas, pudiendo obtenerse mediante procesos de cristalización convencionales en fase líquida, como la evaporación de disolvente, mediante la cristalización en reactores por síntesis hidrotermal, o incluso mediante síntesis sol-gel, entre otras. Para este tipo de cristales es de suma importancia la caracterización por medio de técnicas de microscopía, absorción y difracción, garantizando así conocer su topología y estructura correctas.

Los MOFs han generado un gran interés en los últimos años debido a las múltiples aplicaciones que pueden encontrar en muy diversas áreas. Sin embargo, tan sólo recientemente han sido estudiados con interés en procesos de extracción y preconcentración en Química Analítica. Así, se ha descrito su empleo en extracción en fase sólida miniaturizada (μ-SPE), tanto en su modalidad dispersiva como estática, y combinada o no con materiales magnéticos; así como sorbentes en microextracción en fase sólida (SPME), ya sea utilizando los MOFs como tales o formando parte de materiales híbridos. Este trabajo pretende dar una visión global de la novedosa aplicación de los MOFs en estas técnicas.

Bibliografia

- Z. Huang, H. K. Lee, Trends Anal. Chem., 2012, 39, 228-244
- J. Lei, R. Qian, P. Ling, L. Cui, H. Ju, Trends Anal. Chem., 2014, 58, 71-78

BIOSENSORES BASADOS EN NANOPARTÍCULAS METÁLICAS: BIOSENSOR PARA DETERMINAR LA CONCENTRACIÓN DE FENOL EN VINO

Ana Laura López Machado
5º Farmacia
Tutoras: Carmen Arévalo Morales y Elena Pastor Tejera
UD de Química Física, Departamento de Química,

El uso de nanopartículas (NP) de oro está tomando un papel cada vez más relevante en el desarrollo actual de los biosensores. Entre otras propiedades, estas NP proporcionan un elevado número de puntos de anclaje para la inmovilización de las enzimas, y un aumento en la actividad, facilitando la transferencia electrónica directa y rápida de forma que no es necesario el uso de mediadores externos. En el presente trabajo se describe la elaboración de un biosensor amperométrico para la detección de fenol en vino [1]. Para ello se procedió a preparar un electrodo modificado conteniendo NP de oro, en el que se ha inmovilizado la enzima tirosinasa, que cataliza la oxidación de grupos fenólicos a o-quinonas en presencia de oxígeno. La quinona generada puede detectarse entonces por métodos electroquímicos.

El electrodo modificado se obtuvo mediante la electrodeposición de NP de oro sobre electrodos de carbón vítreo y de grafito a partir de una disolución de $HAuCl_4$ y se caracterizó mediante voltamperometría cíclica. A continuación se procedió a la inmovilización de la tirosinasa añadiendo una gota de su disolución sobre el mencionado electrodo, dejando secar, e introduciendo finalmente el electrodo en una disolución con glutaraldehído para permitir la reticulación. La calibración del biosensor se realizó por el método de las adiciones estándar utilizando una disolución de fenol 0.1 mM.

Figura 1. Esquema de la preparación del biosensor.

Bibliografía
[1] J. Njagi, J. Warner and S. Andreescu, Journal of Chemical Education, 84 (2007)1180-1182.

SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE ÓXIDO DE GRAFENO

[a]Pablo Domínguez y [b]Jonathan Flórez
[a]4º Química, [b]Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutora: Elena Pastor y José Luis Rodríguez
UD Química Física, Departamento de Química

El óxido de grafeno (GO) es el producto de la exfoliación química de grafito y se puede obtener a partir de la reacción entre el grafito natural con agentes oxidantes fuertes tales como el $KMnO_4$ en ácido sulfúrico concentrado. La oxidación del grafito rompe la conjugación de los carbonos sp^2 extendida en el dominio 2D, formando especies altamente oxidadas en los bordes como ácido carboxílico, fenoles, grupos hidroxilo y epoxi, así como defectos y vacantes de carbono dentro del plano basal. Por lo tanto, sus láminas (*sheets*) se pueden exfoliar fácilmente para formar una suspensión de capas de GO en agua.

Desde que el grafeno fue aislado por primera vez en el año 2004 por Andréy Geim y Konstantin Novoselov, este método ha retomado importancia ya que hasta el momento es la manera más eficaz para fabricar grafeno a escala industrial. La funcionalización de la red carbonos conjugada durante la oxidación de grafito hace que éste sea un material aislante. Para restaurar parcialmente la conductividad y otras propiedades que caracterizan al grafeno, el GO puede tratarse térmicamente o químicamente, produciendo láminas de óxido de grafeno reducido (RGO). Aunque el resultado final (RGO) es más defectuoso y menos conductor que el grafeno, el resultado es suficiente para que éste pueda ser utilizado en muchas aplicaciones, como es el caso de los electrodos en dispositivos electroquímicos para almacenamiento y producción de energía. En esta comunicación se describe la obtención de GO mediante modificaciones del método de Hummer y la obtención de RGO por reducción térmica del GO, así como la posterior caracterización de los materiales preparados.

Bibliografía:

C. Kiang, *Chemical reduction of graphene oxide: a synthetic chemistry viewpoint,* Chem. Soc. Rev., 2014. Volumen 43, paginas 291-312.

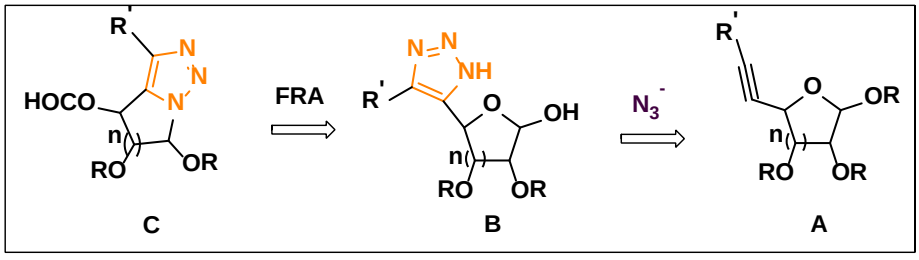
SÍNTESIS DE TRIAZOLO-AZÚCARES

Eliet L. Pérez Relvas
1º Química
Tutores: Concepción González Martín y Nieves Mª Rodríguez Paz
Departamento de Síntesis de Productos Naturales. Instituto de Productos Naturales y Agrobiología (IPNA-CSIC)

Los 1,2,3-triazoles son parte fundamental de compuestos de gran importancia en varias áreas que van, desde química medicinal hasta ciencias de los materiales. Estos heterociclos pueden ser considerados como isósteros de amidas en moléculas bioactivas debido a sus propiedades físicoquímicas, y además son especialmente estables a los procesos metabólicos. Aunque no se encuentran formando parte de productos naturales, se encuentran presentes en numerosos compuestos con diversas actividades biológicas.[1]

Para la construcción de este tipo de anillos, se han descrito un amplio y variado número de metodologías, sin embargo, entre ellas, la reacción de cicloadición 1,3 dipolar entre azidas orgánicas y triples enlaces (reacción de Huisgen)[2] es una de las más importantes.[3] La gran utilidad de esta reacción viene dada por la fácil funcionalización de las moléculas orgánicas con azidas y alquinos, así como a la relativa estabilidad de ambas a una amplia variedad de condiciones.

Continuando con nuestro propósito de estudiar diferentes aplicaciones de la reacción de β-fragmentación, hemos pensado que, la colocación de un anillo de triazol en la posición adecuada, en un modelo de carbohidrato, podría dar lugar a la síntesis de triazolo-azúcares bicíclicos polifuncionalizados siguiendo el esquema que se resume en la figura:



Bibliografía
[1] (a) Fan, W.-Q.; Katrizky, A. R. 1,2,3-Triazoles en Comprehensive Heterocyclic Chemistry II, ed, A. R. Katrizky, C. W. Rees. E. F. and V. Scriven, Elsevier, Oxford 1996, vol 4, 1-126, pp 905-1006.
[2] Huisgen, R. en *1,3-Dipolar Cycloaddition Chemistry*, ed. A. Padwa, Wiley, New York, 1984, 1-176.
[3] Santoyo-González, F.; Hernández-Mateo, F. *Top. Heterocycl. Chem* **2007**, *7*, 133-177.

CARACTERIZACION DE CATALIZADORES CATÓDICOS EN UNA ESTACION DE PILAS DE COMBUSTIBLE DE MEMBRANA POLIMERICA DE BAJA TEMPERATURA (PEM)

Laura Giamporcaro[a] y Luis Miguel Rivera Gavidia[b]
Estudiante Erasmus[a], Doctorando en Química e Ingeniería Química[b]
Tutora: Elena Pastor Tejera
UD de Química Física, Departamento de Química,

Las pilas de combustible de membrana polimérica (PEMFC) han despertado un gran interés por su utilización en sistemas portátiles y de transporte. Para el desarrollo de estas pilas resulta fundamental la fabricación de MEAs (ensamble membrana-electrodo) que sean capaces de proporcionar un mayor voltaje y rendimiento. La MEA consiste en una unión trifásica de tres componentes: una capa recubierta del material catalítico (metal sobre carbón-CL), una capa difusora de gases (GDL) y la membrana polimérica. Esta unión es tipo sándwich, donde la membrana está en el centro en contacto directo con dos capas catalíticas (ánodo y cátodo) y a su vez éstas con dos capas difusoras más externas a ambos lados. En este trabajo se evaluaron diferentes MEAs compuestas por un ánodo de PtRu (1:1) con diferentes cátodos (de Pd, PdFe (3:1), PdIr (3:1) y PdFeIr (2:1:1)) utilizando la estación de pruebas PEM FCT-50. En todos los estudios se utilizó una membrana de Nafion® 112, empleando H_2 como combustible y O_2 como oxidante. Antes y después de las medidas en pila, se realizó una voltamperometría cíclica con la ayuda de un potenciostato que permitió medir las corrientes generadas durante un barrido de potencial. El objetivo de este trabajo es evaluar la respuesta electroquímica de MEAs que utilicen catalizadores a base de Pd como cátodo, así como observar los cambios que sufren después de someterlos a un funcionamiento en una pila real.

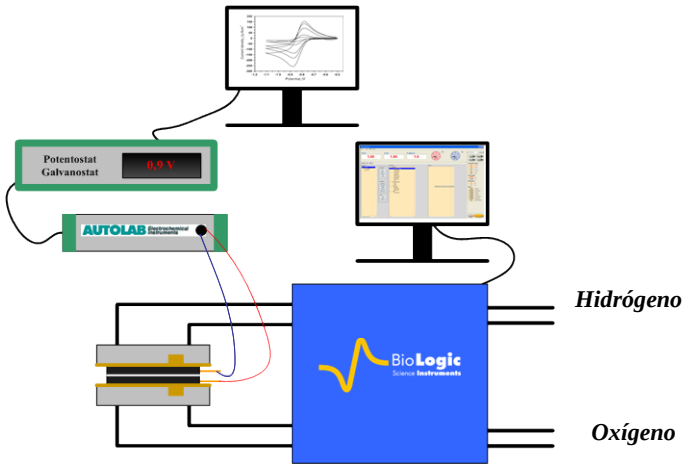


Figura 1. Esquema de operación de la estación PEMFC acoplada a un potenciostato.

CAPSULAS MOLECULARES DE CALIXARENO PARA LA ENTREGA DE FÁRMACOS

Marcelle D. Perretti
Doctorado en Química e Ingeniería Química
Tutor: Romen Carrillo
Dpto. de Química Orgánica, Instituto Universitario de Bio-Orgánica "Antonio Gonzalez"

La quimioterapia tradicional carece de selectividad intrínseca y a menudo va acompañada de toxicidad sistémica en los pacientes. Por lo tanto, dirigir el fármaco y controlar su liberación, en oncología, es un aspecto de particular interés para evitar efectos secundarios desfavorables y para aumentar la dosis efectiva en el tumor. En este sentido, el enviar fármacos por medio de transportadores presenta muchas ventajas: a) el fármaco no tiene que ser modificado; b) el fármaco está protegido del medio; c) los transportadores pueden ser diseñados para responder a estímulos.[1]

Las cápsulas moleculares son sistemas compuestos por dos o más moléculas que son capaces de ensamblarse formando una estructura hueca que puede alojar otras moléculas en su cavidad.[2] Por lo tanto, a primera vista podrían considerarse transportadores óptimos de fármacos.

En este trabajo informamos del diseño y desarrollo de nuevas cápsulas moleculares formadas por unidades de calixareno, y su uso como transportadores de fármacos. Los calixarenos han sido utilizados como moléculas macrocíclicas de referencia en la química supramolecular. Ellos tienen un enorme interés en biomedicina por sus cavidades bien definidas, su elevada simetría, su estabilidad, su baja toxicidad y porque presentan sitios que pueden sufrir muchas modificaciones.[3]

Nuestra primera generación de cápsulas son sensibles al pH y se desensamblan en un medio ligeramente ácido, lo cual es muy útil considerando que las células tumorales presentan un pH más bajo que las sanas.[4] Además, estas cápsulas son fácilmente funcionalizadas y dichos apéndices pueden ser usados para dirigir las cápsulas como, por ejemplo, a células tumorales que sobreexpresen receptores de folato.[5] Ambos puntos son muy importantes para realizar un envío selectivo del fármaco.

Bibliografía

[1] S. Mura, J. Nicolas, P. Couvreur, *Nature Mater*., **2013**, *12*, 991-1003, and references therein.
[2] F. Hof, S. L. Craig, C. Nuckolls, J. Rebek, Jr., *Angew. Chem. Int. Ed*., **2002**, *41*, 1488-1508.
[3] Gutsche C. D., "*Calixarenes: An Introduction*," 2nd ed., Royal Society of Chemistry, Cambridge, 2008.
[4] W. Gao, J. M. Chan, O. C. Farokhzad, *Molecular Pharmaceutics*, **2010**, *7*, 1913-1920.
[5] P. S. Low, A. C. Antony, *Adv. Drug Delivery Rev*. **2004**, *56*, 1055-1058.