



VI Congreso sobre Materiales Multifuncionales

19 y 20 de mayo de 2025

Almuñécar, Granada



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Patrocinadores



UNIVERSIDAD
DE GRANADA

Vicerrectorado de Investigación y
Transferencia



958 130 925
www.grontal.es





Pablo Salcedo Fernández
Sara Rojas Macías
Antonio Rodríguez Diéguez
Alfonso Salinas Castillo
Juan Ramón Jiménez Gallego
Víctor Karim Abdelkader Fernández
Andoni Zabala Lekuona
Alessandra Azzali
Pablo Guerrero García
Jonathan Machí Hernández
Maria del Carmen Contreras Morales
Editores

© LOS AUTORES: COMITÉ ORGANIZADOR Y COMITÉ CIENTÍFICO

VI Congreso sobre Materiales Multifuncionales “MultiMat”

ISBN:

Depósito Legal:

Edita: GODEL IMPRESIONES DIGITALES SL

Imprime: GODEL IMPRESIONES DIGITALES SL



COMITÉ CIENTÍFICO

José Manuel Seco Botana (Universidad del País Vasco EHU/UPV)

José Manuel Delgado López (Universidad de Granada)

Yolanda Pérez Cortés (Universidad Rey Juan Carlos)

COMITÉ ORGANIZADOR

Pablo Salcedo Fernández (Presidente, Universidad de Granada)

Sara Rojas Macías (Secretaria, Universidad de Granada)

Antonio Rodríguez Diéguez (Coordinador, Universidad de Granada)

Alfonso Salinas Castillo (Universidad de Granada)

Juan Ramón Jiménez Gallego (Universidad de Granada)

Víctor Karim Abdelkader Fernández (Universidad de Granada)

Andoni Zabala Lekuona (Universidad del País Vasco EHU/UPV)

Alessandra Azzali (Universidad de Granada)

Pablo Guerrero García (Universidad de Granada)

Jonathan Machí Hernández (Universidad de Granada)

Maria del Carmen Contreras Morales (Universidad de Granada)

	Lunes	Martes
8:40-9:00	Inauguración	-
9:00-9:40	Oral Plenaria 1 David Ávila	Oral Plenaria 3 Alicia Forment
9:40-10:00	O1 Alejandro López	O16 Inés García
10:00-10:20	O2 Ana Rodríguez	O17 Margarita Hierro
10:20-10:40	O3 Laura Cuevas	O18 Amparo Navarro
10:40-11:00	O4 Alberto Moreno	O19 Marta Salvachúa
11:00-11:30	Coffee break	
11:30-12:00	Oral invitada 1 Alessandra Azzali	Oral invitada 2 Carlos M. Cruz
12:00-12:20	O5 Beatriz Cuartero	O20 Ruperto Bermejo
12:20-12:40	O6 Verónica Luque	O21 Dean Milanović
12:40-13:00	O7 Fernando Campos	O22 María del Mar Quesada
13:00-13:20	O8 Mari C. Mañas	O23 Federico Movilla
13:20-13:40	O9 Almudena del Campo	O24 Iván Torres
13:40-14:00	O10 María del Pilar Maldonado	O25 Génesis D. Valdez
14:00-14:20	Almuerzo	
14:20-16:00		
16:00-16:40	Oral Plenaria 2 Sergio Carrasco	
16:40-17:00	O11 Ekain Maiza	
17:00-17:20	O12 Guglielmo Spinelli	
17:20-17:50	Coffee break	
17:50-18:10	O13 Guillermo Gortázar	
18:10-18:30	O14 Jesús Naranjo	
1830-18:50	O15 Abraham Sánchez	
Presentaciones Flash 18:50-19:00	Andoni Zabala Víctor K. Abdelkader	

The background of the lower half of the page is a blue-toned, close-up photograph of a metallic lattice structure. It features a grid of interconnected rods and spherical nodes, creating a complex geometric pattern that recedes into the distance.

Conferencias Plenarias

P1 - MOFs Y CARBONES DERIVADOS DE MOFs CON POROSIDAD PREDISEÑADA COMO LA PRÓXIMA GENERACIÓN DE ELECTRODOS PARA BATERÍAS Y SUPERCONDENSADORES

David Ávila-Brande¹

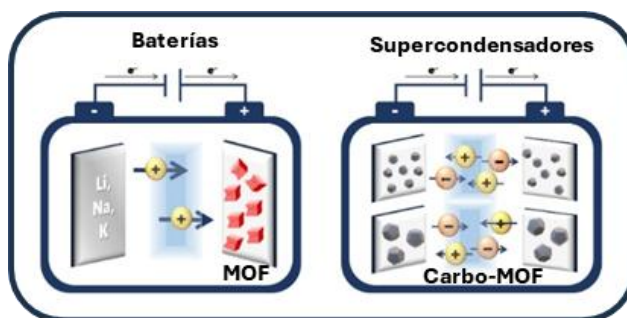
¹Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Complutense de Madrid, Av. Complutense s/n, 28040, Madrid

davilabr@ucm.es

La crisis energética a nivel global y el incesante crecimiento de la demanda tecnológica constituyen desafíos de gran complejidad que ponen de manifiesto la preocupante situación ambiental. Esta realidad evidencia que el ritmo actual de consumo de recursos fósiles excede con creces la capacidad de regeneración de los ecosistemas naturales^{1,2}. Las fuentes de energía renovables representan una posible solución a corto plazo, ya que permiten satisfacer la demanda energética sin perjudicar al medio ambiente. Sin embargo, la necesaria transición hacia un modelo energético sostenible enfrenta diversos obstáculos. Uno de los principales desafíos radica en la gestión del excedente de energía generada, ya que un uso eficiente de la electricidad requiere evitar su desaprovechamiento. Para hacer frente a este problema, se recurre a sistemas de almacenamiento de energía, cuya función es recolectar, conservar e integrar ese excedente en la red eléctrica de forma flexible y acorde a la demanda.

El almacenamiento y la conversión de energía incluyen dispositivos electroquímicos (como baterías o supercondensadores -SCs, entre otros), que ofrecen alta densidad energética y escalabilidad. Por ello, el desafío radica en mejorar la eficiencia de las tecnologías de almacenamiento de energía tanto a corto como a largo plazo. En este sentido, los retos de la I+D industrial se centran en el desarrollo de nuevos materiales para electrodos o electrolitos, así como en la construcción de celdas que permitan mejorar el rendimiento a un coste reducido para un mercado globalizado. Por tanto, la búsqueda de nuevos materiales funcionales y la optimización de aquellos que presentan mejores propiedades representan el camino hacia el progreso en la nueva generación de sistemas de almacenamiento y conversión de energía.

En esta comunicación se presenta el desarrollo de una serie de materiales de electrodo para baterías de iones alcalinos SCs basados en MOF y materiales de carbono con una arquitectura porosa prediseñada derivados de MOFs. Se mostrarán los protocolos de síntesis optimizados de los nuevos materiales que una vez caracterizados química y estructuralmente haciendo uso de técnicas habituales serán evaluados como electrodos de baterías de ion alcalino y de supercondensadores en prototipos a escala de laboratorio como una alternativa posible en el diseño de una nueva generación de electrodos para dispositivos de almacenamiento de energía.



Referencias

- [1] P. M. Vitousek, H. A. Mooney, J. Lubchenco, J. M. Melillo, *Science* **1997**, 227, 494.
- [2] J. A. Turner, *Science* 1999, 285, 687.

Agradecimientos

Proyecto PID2023-146638NB-I00 financiado por MICIU/AEI /10.13039/501100011033/ y por FEDER Una manera de hacer Europa

P2 - PUSHING THE LIMITS OF CATALYSIS: DEFECTIVE METAL-ORGANIC FRAMEWORKS FOR CO₂ VALORIZATION

Sergio Carrasco¹, Paula García-Fraile¹, Javier Ferrando-Ferrero¹, Miriam Vos-Gracia¹, Guillermo Gortázar¹, Rubén Serrano¹, Álvaro Menéndez¹, Andrea Méndez¹, Patricia Horcajada¹

¹Adv. Porous Materials Unit, IMDEA Energy. Avda. Ramón de la Sagra 3, 28935, Móstoles

sergio.carrasco@imdea.org

Metal-organic frameworks (MOFs) are porous coordination polymers with significant potential as catalytic supports due to their inherent porosity and the presence of coordinatively unsaturated sites (CUS). These structural features facilitate rapid diffusion of reactants and interaction with open metal sites, reducing energy barriers in a broad range of reactions. To enhance CUS accessibility, reagent/product diffusion, and key physicochemical properties (*i.e.*, activity, porosity, and stability), defect engineering has emerged as a pivotal strategy [1]. This presentation will cover different approaches to obtain defect-engineered MOFs, in which we have worked within the last 10 years, oriented to the efficient CO₂ capture and conversion into high-added value products (drug precursors, monomers, pesticides, etc.).

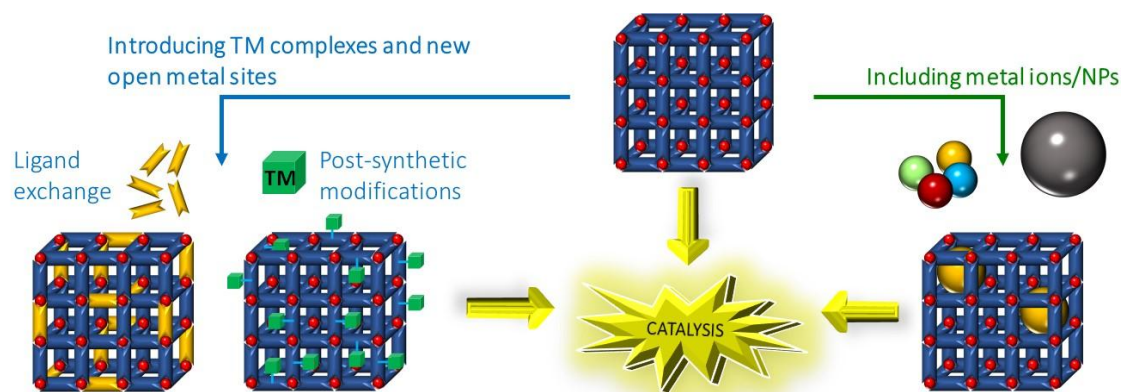


Figure 1. Different strategies to use defective MOFs in catalysis: left) introducing transition metal (TM) complexes and/or new open metal sites (e.g., via ligand exchange, post-synthetic modifications); center) using the raw MOF with artificially-induced porosity (e.g., upon microwave irradiation); right) including additional metal cations/nanoparticles within the framework (e.g., Pd@MOFs).

Among the most relevant examples, we highlight here the use of porphyrin- and squarate-based MOFs for the preparation of cyclic carbonates *via* CO₂ cycloaddition with epoxides, and Pd nanoparticle-loaded terephthalate-based MOFs for amide formation *via* CO carbonylation with aryl iodides and amines [2,3].

References

- [1] R. M. Guerrero, I. D. Lemir, S. Carrasco, C. Fernández-Ruiz, S. Kavak, P. Pizarro, D. P. Serrano, S. Bals, P. Horcajada, Y. Pérez, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **2024**, 16, 24108-24121.
- [2] S. Carrasco, A. Sanz-Marco, B. Martín-Matute, *Organometallics*, **2019**, 38, 3429-3435.
- [3] S. Carrasco, G. Orcajo, F. Martínez, I. Imaz, S. Kavak, D. Arenas-Esteban, D. MasPOCH, S. Bals, G. Calleja, P. Horcajada, *Mater. Today Adv.*, **2023**, 19, 100390.

Acknowledgements

Generación de Conocimiento NAPOLION Project (grant PID2022-139956OB-I00); Colaboración Público-Privada HYLIOS Project (grant CPP2022-010052); M-ERA.NET HYDRAGON Project (3 COFUND 2024).

P3 - DRESS TO IMPRESS: FUNCTIONALIZING 2D MATERIALS TO IMPROVE THEIR PERFORMANCE

Alicia Forment-Aliaga

Instituto de Ciencia Molecular, Universitat de València, C/ Catedrático José Beltrán, 2, 46980, Valencia

alicia.forment@uv.es

Two-dimensional materials (2Dms) are a family of nanomaterials composed of ultrathin layers only a few atoms thick. They exhibit unique electronic, optical, and mechanical properties due to electron confinement in two dimensions and their exceptionally high surface area. The development of new functionalities in 2Dms can be achieved through chemical modification with various molecules. To this end, we have been working on the functionalization of 2D transition metal chalcogenides (TMCs) using molecular systems such as Prussian blue analogues, polyoxometalates, and spin-crossover compounds. [1-3] These modifications have enabled the introduction of additional functionalities, enhancing the suitability of these nanomaterials for energy and optoelectronic applications. More recently, we have explored innovative strategies for asymmetric functionalization of 2Dms, leading to the creation of Janus 2Dms, which possess distinct chemical properties on their opposite faces.[4]

However, characterizing symmetric and asymmetric functionalized systems poses difficult challenges due to the limited detection sensitivity of spectroscopic methods like Raman, IR, and XPS. These techniques also lack spatial resolution and struggle to provide information about coating homogeneity. In contrast, Scanning Probe Microscopy (SPM) offers nanoscale analysis with excellent lateral resolution. Beyond topographical studies, SPM is a powerful tool for probing additional properties, such as mechanical characteristics. Our work has demonstrated that SPM adhesion mapping of bare and molecularly functionalized 2Dms enables precise examination of surface chemical properties.[5] These findings underscore the potential of simple adhesion SPM techniques to investigate the chemical nature of 2Dms, offering valuable insights for the broader scientific community engaged in this field.

Referencias

- [1] M. Morant-Giner, R. Sanchis-Gual, J. Romero, A. Alberola, L. García-Cruz, S. Agouram, M. Galbiati, N. M. Padial, J. C. Waerenborgh, C. Martí-Gastaldo, S. Tatay, A. Forment-Aliaga, E. Coronado, *Adv. Funct. Mater.* **2018**, 28, 1706125.
- [2] M. Guillen-Soler, N. V. Vassilyeva, E. P. Quirós-Díez, J. M. Vila-Fungueiriño, A. Forment-Aliaga, M. del C. Gimenez-Lopez, *Adv. Sustain. Syst.* **2023**, 8, 2300607
- [3] R. Torres-Cavanillas, M. Morant-Giner, G. Escorcía-Ariza, J. Dugay, J. Canet-Ferrer, S. Tatay, S. Cardona-Serra, M. Giménez-Marqués, M. Galbiati, A. Forment-Aliaga, E. Coronado, *Nat Chem* **2021**, 13, 1101-1110.
- [4] N. V. Vassilyeva, A. Forment-Aliaga, E. Coronado, *Small* **2024**, 2406599.
- [5] I. Brotons-Alcázar, Jason. S. Terreblanche, S. Giménez-Santamarina, G. M. Gutiérrez-Finol, K. S. Ryder, A. Forment-Aliaga, E. Coronado, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2024**, 16, 19711-19719.

The background of the page is a close-up, high-contrast photograph of a metallic lattice structure, possibly a molecular model or a microchip, with a blue-tinted color scheme. The structure is composed of interconnected rods and spheres, creating a complex geometric pattern.

Comunicaciones Orales Invitadas

11 - COPPER-BASED NANOPESTICIDES: AGRICULTURE AND LABORATORY CHALLENGES

Alessandra Azzali¹, Francisco Heredia Sanchez¹, José Manuel Delgado-Lopez¹

¹Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, C/ Severo Ochoa s/n, 18071, Granada

In modern agriculture, the extensive use of traditional pesticides requires a reevaluation to address the dual challenge of increasing food demand and sustainability. Historically, copper-based pesticides have been crucial in pest management, aiding farmers in the control of fungal or bacterial diseases across a wide range of crops. Additionally, evolving EU regulations are imposing stricter limits on copper-based pesticides use, driven by health and environmental concerns linked to Cu accumulation. This presents a significant challenge to farmers who must simultaneously manage pests and respect restrictions, especially in vulnerable regions and crops.[1] Currently, few viable alternatives for reformulating Cu-based pesticides are available. Here, we present a material based on biocompatible nanoparticles,[2] engineered to incorporate copper, with the aim to deliver a more efficient and sustainable pesticide. Synthesis of the new material and its comprehensive characterization were conducted encompassing the study of Cu release in water. The characterization of copper-based nanomaterials presents significant challenges, particularly in accurately determining the oxidation state of copper. To address this, an X-ray Photoelectron Spectroscopy (XPS) analysis was performed to investigate and elucidate the copper oxidation states. In vitro experiments against common vegetal pathogen were conducted and the performances of this material as pesticide were confirmed.

References

- [1] European Food Safety Authority (EFSA), Review of the existing maximum residue levels for copper compounds according to Article 12 of Regulation (EC) No 396/2005. *EFS2* 16(3):5212, (2018)
- [2] Eppe, M. Review of potential health risks associated with nanoscopic calcium phosphate. *Acta Biomater.* 77, 1–14 (2018)
- [3] Biesinger, M. C. Advanced Analysis of Copper X-Ray Photoelectron Spectra. *Surface and Interface Analysis*, 49, 1325–1334, (2017)

Acknowledgements

ECOFUN, HORIZON-MSCA-2023-PF-01-01, GAP-101150434 and Project NanoFerti II CPP2021-008801 of the Spanish Research Agency (MICIU/AEI/10.13039/501100011033) and the "European Union NextGenerationEU/PRTR".

I2 - SPIROBISANTHRACENE AS A SCAFFOLD FOR OPTOELECTRONIC APPLICATIONS

Carlos M. Cruz¹

¹Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Avda. Fuente Nueva s/n, 18071 Granada

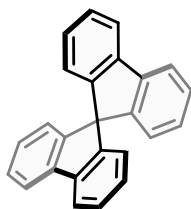
cmorenoc@ugr.es

Polycyclic conjugated hydrocarbons (PCHs) have garnered relevance during the last decades thanks to their promising photophysical and electronic properties. PCHs are proposed as molecular materials that can enhance the performance of optoelectronic devices, acting as sensitizers, light emitters or semiconductors. Within this context, spirobifluorene derivatives have been extensively studied and applied in a plethora of systems, such as organic light emitting diodes, organic solar cells or organic field effect transistors. Thus, hole transport or electron blocking layer materials based on spirobifluorene are commercially available.

Remarkably, carbon-based analogues containing exclusively hexagonal rings remain underexplored. Therefore, spirobisanthracene can be considered as a promising scaffold and an interesting system to study their optical, chiroptical and electronic properties, towards a future implementation in (opto)electronic devices.^[1]

Our group have explored and developed synthetic routes towards full-carbon systems based on spirobisanthracene cores. Their derivatives have been used as solid-state fluorescent materials and/or molecular wires, with potential for their future implementation in OLEDs or OFETs. Additionally, chiral analogues can be prepared and their chiroptical properties evaluated with views to develop the future generation of chiral emitters and spin filters.

Spirobifluorene

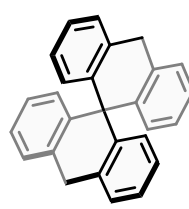


Overexplored

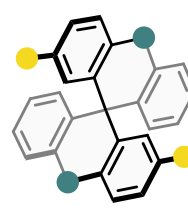
Spirobisanthracene



Donor-Acceptor systems



Unexplored



Chiral Optically-Active systems

References

[1] M. Lv, Y. Yu, M. E. Sandoval-Salinas, J. Xu, Z. Lei, D. Casanova, Y. Yang, J. Che, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, 59, 22179.

Acknowledgements

Grant PID2022-137403NA-I00 funded by MICIU/AEI/10.13039/501100011033 and by ERDF/EU. Grant RYC2023-044652-I funded by MICIU/AEI/10.13039/501100011033 and by ESF+. Grant PPJIA-2023.057 funded by the University of Granada.

The background of the slide is a close-up, high-contrast photograph of a metallic lattice structure, possibly a molecular model or a microchip, with a blue and grey color palette. The text 'Comunicaciones Orales' is overlaid in white.

Comunicaciones Orales

O1 - NANOPARTÍCULAS MAGNÉTICAS COMO PLATAFORMA MULTIVALENTE DE ORGANOSELENO COMPUESTOS

A. López-Ruiz¹, F.J. López-Jaramillo¹, G. R. Iglesias², M. Ortega-Muñoz¹, A. Megia-Fernandez¹

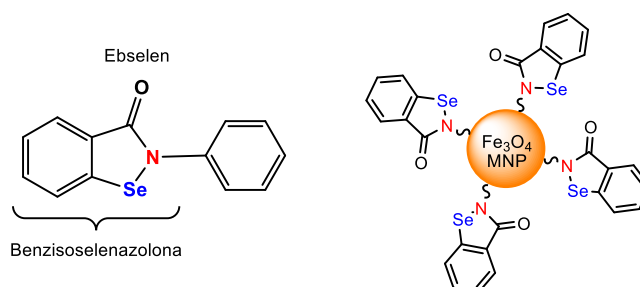
¹Departamento de Química Orgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada,
Av de Fuente Nueva s/n, 18071, Granada

²Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada,
Av de Fuente Nueva s/n, 18071, Granada

alelopezruiz@ugr.es

El selenio (Se) es un micronutriente esencial que forma parte del sitio activo de diferentes selenoenzimas, como las Glutación Peroxidasas (GPx), protegiendo al sistema contra el estrés oxidativo, debido a su capacidad de neutralizar especies reactivas de oxígeno (ROS). Uno de los compuestos orgánicos con selenio más estudiado por sus interesantes propiedades biológicas es el **ebsele**n, que ha demostrado capacidad como antitumoral, antifúngico, radioprotector y neuroprotector.[1]

En el presente estudio, se discutirá la preparación de nanopartículas magnéticas (MNP) [2] funcionalizadas covalentemente con ebselen, obteniendo un material híbrido orgánico-inorgánico que presenta el fragmento Benzisoselenazolona de forma multivalente. Se lleva a cabo su caracterización y estudio como mimico de GPx además de su capacidad para producir hipertermia.



Estructura química del Ebselen y funcionalización de MNP con el grupo benzisoselenazolona.

Referencias

- [1] Santi, C.; Scimmi, C.; Sancineto, L. Ebselen and analogues: Pharmacological properties and synthetic strategies for their preparation. *Molecules* **2021**, 26 (14), 4230.
- [2] Ortega-Muñoz, M.; Plesselova, S.; Delgado, A. V.; Santoyo-Gonzalez, F.; Salto-Gonzalez, R.; Giron-Gonzalez, M. D.; Iglesias, G. R.; López-Jaramillo, F. J. Poly (ethylene-imine)-functionalized magnetite nanoparticles derivatized with folic acid: Heating and targeting properties. *Polymers* **2021**, 13 (10), 1599.

O2 - MECHANISMS FOR LANTHANIDE (III) SENSITIZATION AND FIELD-INDUCED SINGLE-MOLECULE MAGNET BEHAVIOUR IN A SERIES OF LANTHANIDE COMPLEXES.

Ana Rodríguez Expósito¹, Hadjer Allia², María. A. Palacios², Juan-Ramón Jiménez², Enrique Colacio², Amparo Navarro¹, María Mar Quesada-Moreno¹

¹Departamento de Química Física y Analítica, Facultad de Ciencias Experimentales, Campus Las Lagunillas, Universidad de Jaén, 23071-Jaén, Spain.

²Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Campus Fuentenueva, Universidad de Granada, 18071-Granada, Spain.

arexposi@ujaen.es

A study of eight mononuclear lanthanide complexes synthesized and structurally characterized is presented. For this purpose, a rigorous photophysical study of the di(1-adamantyl)benzylphosphine oxide ligand (OPAd₂Bz) and lanthanide complexes containing Yb^{III}, Tb^{III}, Dy^{III} and Eu^{III} has been carried out. Magnetic properties measurements were also carried out for some of them.

The preparation of these complexes aims to obtain the combination of Single Molecule Magnet (SMM) behaviour and luminescence in the same compound thus obtaining multifunctional magneto-luminescent materials. This is interesting due to the interests in the physical properties they present and also because they can show a synergistic effect due to the interaction of both properties.^[1] Regarding their structure, five complexes are cationic with chloride or bromide counteranions presenting bipyramidal pentagonal geometry (D_{5h}) and the other three are neutral with an octahedral coordination environment (O_h) (figure 1). All complexes have a coordination sphere of Ln^{III} ions with two di(1-adamantyl)benzylphosphine oxide ligands in axial positions and chloride or bromide atoms with water molecules in the equatorial plane.

In this study, we have used a comprehensive spectroscopic characterization and advanced Time Dependent Density Functional Theory (TD-DFT) calculations to investigate the photophysical properties and lanthanide sensitization mechanisms of the complexes. The results demonstrate that several pathways contribute to the sensitization of lanthanide emission. In addition, *dc* and *ac* magnetic properties were measured on Dy^{III}, Yb^{III} and Tb^{III} complexes, showing that they behave as bi-functional compounds, exhibiting single molecule magnet (SMM) behavior or field-induced SMM behavior together with Ln^{III}-centred luminescence.

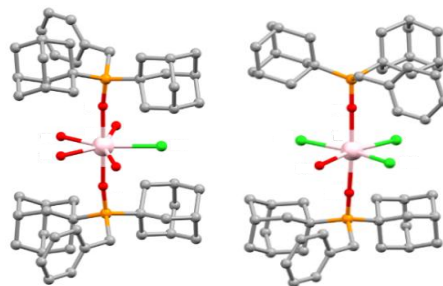


Figure 1: (left) Crystal structures of the Yb^{III} (left) and Eu^{III} (right) compounds. Hydrogen atoms, anions and solvent molecules are omitted for clarity. Color code: Yb and Eu pink, C grey, O red, P orange, Cl green.

References:

[1] A.Zabala-Lekuona, J.M.Seco, E.Colacio, *Coord. Chem.Rev.*, **2021**, 441, 213984.

Acknowledgements

Financial support from Consejería de Universidad, Investigación e Innovación and ERDF Andalusia Program 2021-2027 (projects C-EXP-140-UGR23 and M.1.B.B TA_000722), Ministerio de Ciencia e Innovación (Project PID2022-138090NB-C21 funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033/FEDER, UE). The authors acknowledge CSIRC for computational time and facilities. J. R. J. and M. M. Q. M. thank Ministerio de Ciencia e Innovación for their Ramón y Cajal contracts (RYC2022-037255-I and RYC2021-034288-I, respectively, funded both by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and by FSE+ and the European Union «NextGenerationEU»/PRTR», respectively).

O3 - SINGLE-MOLECULE MAGNETS BASED ON Co(II) COMPLEXES WITH TRIPODAL LIGANDS

Laura Cuevas Contreras¹, Juan Ramón Jiménez Gallego¹, María Ángeles Palacios López¹, Enrique Colacio Rodríguez¹

¹Department of Inorganic Chemistry, Faculty of Sciences, University of Granada, Av. Fuentenueva s/n, 18071, Granada, Spain.

lauracc@ugr.es

Nowadays, most information is stored digitally. The core of the information storage devices is made of ferro- or ferrimagnetic alloy particles of nanoscopic size. They have a limitation: their size cannot be reduced beyond a certain point without losing their ability to store information.¹ To store as much information as possible in the smallest space, the goal is to do it at molecular level using single-molecule magnets (SMMs). In addition, due to their quantum properties, they could have outstanding application in quantum information processing and molecular spintronics.² Nevertheless, their implementation is challenging because their behaviour is restricted to a certain temperature known as blocking temperature, which has reach values up to 80 K in Dy-metalloenes. However, these compounds are air and moisture unstable.

To overcome this issue, research in this field has been focused on stable transition metal based SMMs with very high magnetic anisotropy (the SMM properties depend on this parameter). For this end, it is essential to choose the proper metal ion (anisotropic with orbital angular momentum and Kramers ions) and the coordination environment (the anisotropy can be modulated by controlling the electronic structure of the metal ion). Considering this, Co(II) complexes among transition metal ions based on tripodal ligands are quite promising. These types of ligands force the metal ion to adopt a trigonal prismatic geometry, which seems to significantly increase axial anisotropy resulting in SMM behaviour at zero-field.³ Furthermore, it has been shown that this anisotropy coupled with strong interactions between metal centres in polynuclear complexes can lead to SMM behaviour at zero field.⁴ In this work we report the synthesis of a mononuclear and a polynuclear cobalt (II) complexes with trigonal prismatic geometry. Both complexes show slow magnetic relaxation at zero field and, the polynuclear one exhibit also hysteresis at zero field, which is very unusual in this type of complexes.

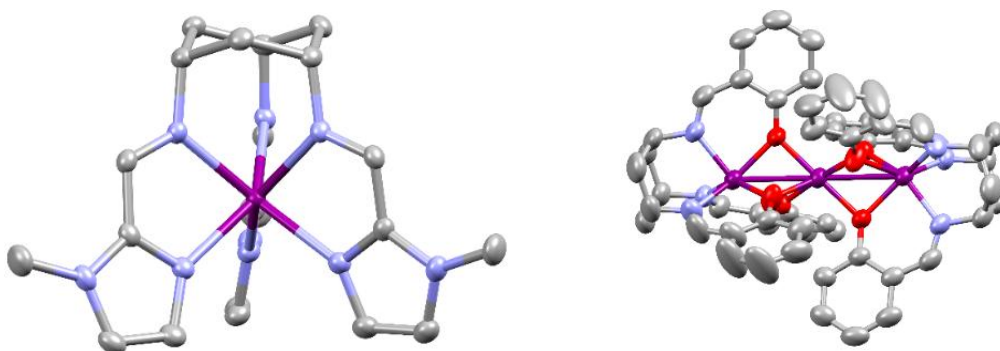


Figura 1. Crystal structures of complexes $[Co(L1)]^{2+}$ (left) y $Co_3(L2)_2$ (right). Anions, solvent molecules and hydrogens atoms were omitted for clarity. Colour codes: Co (purple), N (light blue), O (red), C (grey).

References

- [1] Andoni Zabala-Lekuona et Al, *Coordination Chemistry Reviews*, **2021**, 441, 21398
- [2] Eugenio Coronado et Al, *Nature Reviews Materials*, **2020**, 5, 87–104
- [3] Aritz Landart-Gereka et Al, *Inorg. Chem. Front.*, **2022**, 9, 2810
- [4] Andoni Zabala-Lekuona et Al, *Inorganic Chemistry*, **2023**, 62 (49), 20030-20041

Acknowledgments

Project C-EXP-140-UGR23; PID2022-138090NB-C21

O4 - COMPLEJOS DE GALIO COMO CATALIZADORES PARA LA SÍNTESIS DE POLIÉSTERES

Alberto Moreno-Fernández,¹ Marc Martínez de Sarasa Buchaca,¹ Pablo Salcedo,² Antonio Rodríguez-Diéguez,² Santiago García-Yuste,¹ Carlos Alonso-Moreno,¹ Agustín Lara-Sánchez¹

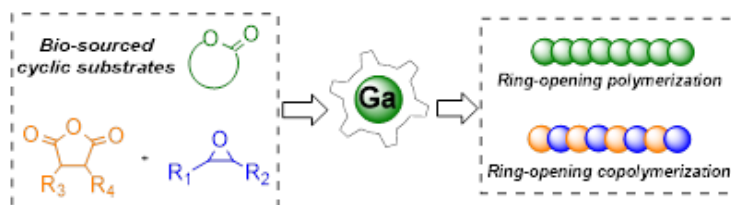
¹Universidad de Castilla-La Mancha, Departamento de Química Inorgánica, Orgánica y Bioquímica-Centro de Innovación en Química Avanzada (ORFEO-CINQA), Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas, 13071 Ciudad Real, Spain. Facultad de Farmacia, 02008 Albacete, Spain.

²Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071-Granada.

Alberto.MFernandez@uclm.es

Los polímeros de tipo poliolefínico son omnipresentes en nuestra vida cotidiana y desempeñan un papel clave en el desarrollo de la sociedad, aunque su escasa reactividad química y su larga vida útil están causando daños medioambientales que afectan a plantas, animales e incluso a la salud humana^[1]. Uno de los mayores retos para los investigadores del mundo académico y la industria es el desarrollo de materiales poliméricos renovables y biodegradables que sustituyan a los actuales plásticos^[2]. En este contexto, la producción de materiales a base de poliésteres ha experimentado un enorme crecimiento debido a su biocompatibilidad general y a su fácil degradación por hidrólisis. En la actualidad, se suelen producir mediante reacciones de policondensación entre dioles y diácidos derivados del petróleo, que a menudo requieren altas temperaturas y largos tiempos de reacción. Sin embargo, se han desarrollado rutas más sostenibles para su síntesis. En las últimas décadas, se ha preparado una amplia gama de poliésteres mediante polimerización de apertura en anillo (ROP) de ésteres cíclicos como la policaprolactona (PCL) y la polilactida (PLA), y ya se han utilizado para varias aplicaciones. El principal inconveniente de esta estrategia reside en la limitada disponibilidad de monómeros de ésteres cíclicos, que suelen dar lugar a poliésteres alifáticos con malas propiedades térmicas y mecánicas. Como alternativa, la copolimerización de apertura de anillo (ROCOP) de epóxidos y anhídridos cíclicos (Esquema 1) ha atraído una gran atención, ya que implica el uso de dos monómeros diferentes. Este enfoque permite la síntesis de materiales de poliéster con una gama más amplia de microestructuras, propiedades y aplicaciones, al tiempo que permite la modificación posterior a la polimerización^[3].

Basándonos en estudios previos realizados por nuestro grupo de investigación sobre catalizadores para reacciones ROCOP y dados los limitados ejemplos de catalizadores de galio para este proceso catalítico, aquí describimos la síntesis de nuevos complejos heteroscorpionato de galio (III) y su uso como catalizadores para el ROCOP de diferentes epóxidos y anhídridos cíclicos.



Esquema 1

Referencias

- [1] P. K. Rai, J. Lee, R. J. C. Brown, K. H. Kim, *J. Hazard. Mater.*, **2021**, 403, 123910.
- [2] M. S. Kim, H. Chang, L. Zheng, Q. Yan, B. F. Pfleger, J. Klier, K. Nelson, E. L. W. Majumder, G. W. Huber, *Chem. Rev.* **2023**, 123, 9915–9939.
- [3] F. de la Cruz-Martínez, M. Martínez de Sarasa Buchaca, J. A. Castro-Osma, A. Lara-Sánchez, Chapter 11. "Catalytic synthesis of biosourced polyesters from epoxides and cyclic anhydrides". *Biopolymers: Synthesis, Properties, and Emerging Applications*. Elsevier, **2023**, 347–383.

O5 - ENCAPSULACIÓN DE COMPUESTOS ORGANOMETÁLICOS DE RUTENIO EN LIPOSOMAS PARA EL TRATAMIENTO DEL CÁNCER DE MAMA

Beatriz Cuartero-Gómez¹, Elena Domínguez-Jurado¹, Iván Bravo¹, Agustín Lara-Sánchez², Carlos Alonso-Moreno¹

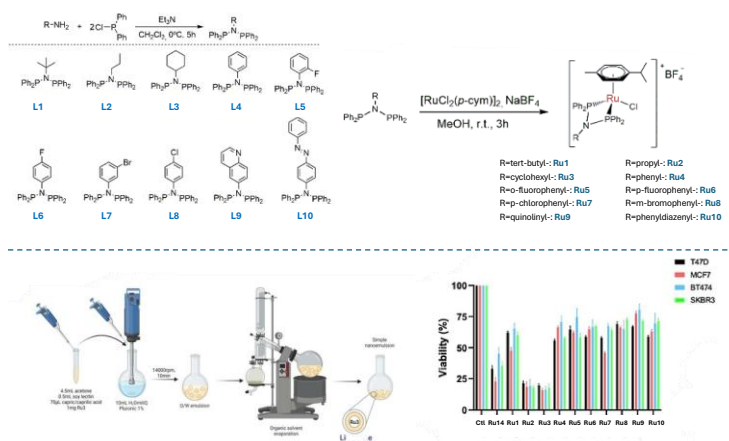
¹Universidad de Castilla-La Mancha, Unidad nanoDrug, Facultad de Farmacia de Albacete, 02008, Albacete, Spain

²Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas, Centro de Innovación en Química Avanzada (ORFEOCINQA), Universidad de Castilla-La Mancha, Ciudad Real-13071, Spain

Beatriz.Cuartero@uclm.es

El cáncer de mama, con la mayor incidencia entre los tipos de cáncer, es un grave problema de salud global^[1]. Su tratamiento abarca el uso de distintos fármacos, y los metalofármacos de rutenio aparecen como prometedoras alternativas a los derivados del platino. En trabajos anteriores, se describió la síntesis de compuestos organometálicos de rutenio con ligandos bis-fosfinoamina (PNP)^[2]. Tras probar su actividad en distintas líneas celulares tumorales, se seleccionó el compuesto **pnp-Ru14** como el líder de la serie debido a sus excelentes resultados *in vitro*^[3]. Con el objetivo de mejorar su actividad, se diseñaron 10 nuevos ligandos PNP y se sintetizaron sus correspondientes derivados de rutenio. Dentro de estos, el **Ru3** fue elegido el nuevo líder debido a su gran actividad contra cáncer de mama y a su baja toxicidad *in vivo*^[4]. Sin embargo, los metalofármacos presentan ciertos inconvenientes, como una baja acumulación en los tejidos diana, una activación impredecible y un desarrollo de resistencias con un uso prolongado^[1]. En este contexto, la nanotecnología aparece como una solución prometedora contra estas limitaciones.

Por tanto, en este trabajo se ha llevado a cabo la encapsulación del **Ru3** en liposomas (**LP-Ru3**), probando su actividad en siete líneas tumorales y dos líneas no tumorales. Los **LP-Ru3** presentaron una actividad superior a la del cisplatino y mejoraron además la actividad del **Ru3** libre. Para estudiar el mecanismo de acción, se diseñó un derivado fluorescente (**Ru-Antraceno**) y se encapsuló en liposomas. El compuesto libre y los liposomas fueron monitorizados durante 48h mediante microscopía FLIM en las células MCF7. Se pudo concluir que la encapsulación del complejo de rutenio lo protege de una degradación precoz o de una acción prematura, permitiendo una liberación controlada y una acción más prolongada.



Referencias

- [1] E. Domínguez-Jurado et al., *Coord. Chem Rev.*, **2025**, 523, 216252
- [2] L. M. Broomfield et al., *Dalton Trans*, **2017**, 46, 16113–16125
- [3] V. Corrales Sánchez et al., *ACS Omega*, **2019**, 4, 8, 13005–13014
- [4] E. Domínguez-Jurado et al., *Pharmaceutics*, **2021**, 13, 10

O6 - APLICACIÓN DE FeOx@BIOCHAR EN TECNOLOGÍAS AMBIENTALES: DESCONTAMINACIÓN DE AGUAS Y PRODUCCIÓN DE BIOGÁS

Verónica Luque-Agudo¹, Christian de los Ríos², Karla Jiménez-Bautista², Virginia Muelas-Ramos², Daniela Arango-Ocampo², Antonio Gascó², Daphne Hermosilla²

¹Grupo de Investigación G-AQUA, Departamento de Sistemas y Recursos Naturales, ETSI de Montes, Forestal y del Medio Natural Universidad Politécnica de Madrid, C/ José Antonio Novais 10, 28040, Madrid

²Grupo de Investigación G-AQUA, Departamento de Ingeniería y Gestión Forestal y Ambiental, ETSI de Montes, Forestal y del Medio Natural Universidad Politécnica de Madrid, C/ José Antonio Novais 10, 28040, Madrid

v.luque@upm.es

La utilización de biomasa constituye un claro ejemplo de desarrollo y aplicación de la economía circular, tanto para la obtención de combustibles que proporcionen energías limpias y renovables como para la síntesis de materiales adsorbentes que eliminen contaminantes [1]. Así, el biochar es un material carbonoso que resulta de la pirólisis de la biomasa [2], de bajo coste de obtención y que es un buen adsorbente en su aplicación en remediación de aguas y suelos. Sin embargo, su eficacia está limitada por su baja superficie específica, por el reducido número de grupos oxigenados en la superficie y por la baja reutilizabilidad. La síntesis de biochar que contienen metales con propiedades magnéticas permite solucionar parte de esos inconvenientes. En concreto, los biochar que incluyen hierro presentan una gran versatilidad. Por un lado, se pueden utilizar en el proceso foto-Fenton, que constituye una estrategia innovadora para eliminar compuestos orgánicos en medio acuoso difícilmente degradables y resistentes a otros tipos de tratamiento, vía generación *in situ* de radicales hidroxilo a partir de H₂O₂; y, por otro, en la obtención de biogás a partir de biomasa, pues las partículas de óxidos de hierro aceleran las reacciones químicas involucradas en la digestión anaerobia, ya que se favorece la transferencia electrónica.

De esta manera, se ha sintetizado un FeOx@biochar [3], en el que el biochar actúa como soporte de catalizadores de hierro y se han estudiado las dos aplicaciones ya mencionadas. En primer lugar, se ha aplicado el proceso foto-Fenton heterogéneo a la degradación de los contaminantes emergentes imidacloprid, metomilo, acetaminofeno y diclofenaco sódico en medio acuoso, obteniéndose degradaciones de entre el 95 y el 100 % en tiempos que oscilan entre los 10 y los 120 minutos. Aunque no se alcanza la completa mineralización de los compuestos, tampoco se produce lixiviación significativa de hierro a partir del material en ninguno de los casos.

En segundo lugar, se ha utilizado este material en la producción de biogás mediante digestión anaerobia de diversos sustratos, tanto en botes BMP como en un reactor semicontinuo, con objeto de evaluar la mejora respecto al proceso llevado a cabo en ausencia de estas partículas. Así, se obtiene un incremento de entre un 20 y un 40 % en la producción diaria en bacterias mesófilas y termófilas, con un aumento del contenido de metano del 3-4 %, y una mayor estabilidad en el proceso.

Referencias

- [1] J. Singh, M. Verma, *Environmental Research*, **2024**, 245, 117999.
- [2] H. T. Dzoujo, V. O. Shikuku, S. Tome, A. C. N. Simo, E. C. Ng'eno, Z. M. Getenga, M. A. Etoh, D. D. Joh Dina, *Hybrid Advances*, **2024**, 7, 100292.
- [3] V. Muelas-Ramos, A. Gascó, M. Salvatierra, C. de los Ríos, K. Jiménez-Bautista, N. Merayo, A. Bahamonde, D. Hermosilla, *Catalysis Today*, **2024**, 438, 114782.

Agradecimientos

Proyecto PID2021-124021OB-I00 (URBRAINTREAT), financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y "FEDER: Una manera de hacer Europa", Proyecto TED2021-132181B-I00 (BIOELECTROGAS), financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033 y por fondos "European Union NextGenerationEU/PRTR" y proyecto LIFE GreenLED (LIFE22-CCA-NL-101114560), co-financiado por la Unión Europea.

O7 - PIEL ARTIFICIAL GENERADA CON BIOMATERIALES MULTIFUNCIONALES PARA USO TERAPEÚTICO

Fernando Campos^{1,2}, Jesús Chato-Astrain^{1,2}, Óscar Darío García-García^{1,2}, Paula Ávila Fernández^{1,2}, Miguel Etayo-Escanilla^{1,2}, David Sánchez-Porras^{1,2}, Miguel Ángel Martín-Piedra^{1,2}, Víctor Carriel^{1,2}, Ingrid Garzón^{1,2}, Miguel Alaminos^{1,2}

¹Departamento de Histología, Grupo de Ingeniería Tisular, Facultad de Medicina, Universidad de Granada, Avenida Doctor Jesús Candel Fábregas 11, E18016, Granada, España

²Instituto de Investigación Biosanitaria (ibs.GRANADA).

fcampos@ugr.es

La creación de piel artificial para grandes quemados constituye un reto científico, tecnológico y terapéutico de primera magnitud que exige la generación de un sustituto histológico biocompatible con el organismo humano, de la generación de biomateriales con propiedades histodinámicas compatibles con la función de barrera cutánea y de un producto que reúna los requisitos que exige la Agencia europea del medicamento para su uso en pacientes.

En el presente trabajo se expone el desarrollo de modelo de piel artificial generado en el Departamento de Histología de la Universidad de Granada para cuyo diseño y evaluación preclínica se ha requerido la optimización de distintos biomateriales, la expansión y diferenciación las células implicadas, la implementación de distintos protocolos de biofabricación y la evaluación histológica en protocolos de experimentación animal. Asimismo, para la aprobación por las autoridades sanitarias ha sido necesario establecer igualmente protocolos de producción bajo estrictos estándares regulatorios, siguiendo la normativa de Buenas Prácticas de Fabricación (GMP).

Hasta el momento presente, doce pacientes, incluidos tres pediátricos, han recibido injertos de esta piel artificial, con una tasa de éxito del 75% y resultados clínicos e histológicos positivos. Este logro llevado a cabo bajo la coordinación estratégica de la Radytta (Red Andaluza de Diseño y Traslación de Terapias Avanzadas) ha permitido que el modelo de piel artificial generado en Granada haya sido aprobado el pasado año como el primer medicamento tisular generado en España por ingeniería tisular. El desarrollo de este modelo demuestra que la combinación de química, biotecnología y medicina en el contexto de la ciencia histológica puede superar barreras hasta ahora no alcanzadas, y llevar a los tejidos artificiales generados por ingeniería de tejidos del laboratorio a la práctica clínica con resultados tangibles y eficaces.

Referencias

[1] Martín-Piedra MA, Carmona G, Campos F, et al. Histological assessment of nanostructured fibrin-agarose skin substitutes grafted in burnt patients. A time-course study. *Bioeng Transl Med*. 2023;8(6): e10572. doi:10.1002/btm2.10572

Agradecimientos

Este estudio fue financiado por el proyecto NanoGSkin AC17/00013 del Instituto de Salud Carlos III (ISCIII), Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades, a través de AES 2017 dentro del marco EuroNanoMed, la Unión Europea y el PE-0395-2019 de la Consejería de Salud y Familias, Junta de Andalucía, España. Además, se recibió apoyo a través de los proyectos B-CTS-450-UGR20 (proyectos de I+D+i en el marco del Programa Operativo FEDER Andalucía 2014-2020, Universidad de Granada y Consejería de Transformación Económica, Industria, Conocimiento y Universidades) y PI-0458-2016 (Consejería de Salud y Familias, Junta de Andalucía, España) cofinanciado por el Fondo Europeo de Desarrollo Regional (FEDER) a través del programa "Una manera de hacer Europa".

O8 - CATALASE SINGLE-ENZYME NANOGELS FOR NOSE-TO-BRAIN DELIVERY IN GLIOBLASTOMA TREATMENT

Mari C. Mañas-Torres¹, Sergio Saldaña¹, Elena Romero-Benz¹, Ana Sousa², Ana Beloqui¹, Marcelo Calderón¹

¹POLYMAT and Department of Applied Chemistry, Faculty of Chemistry, University of the Basque Country UPV/EHU, Paseo Manuel Lardizabal 3, Donostia-San Sebastián 20018, Spain

²Departamento de Química Farmacéutica y Orgánica, Facultad de Farmacia, Universidad de Granada, Campus Universitario Cartuja, s,n, Beiro, 18011, Granada

mariadelcarmen.manas@polymat.eu

Glioblastoma multiforme (GBM) is one of the most aggressive and challenging brain tumors to treat due to its rapid proliferation and the presence of the blood-brain barrier (BBB), which significantly limits the efficacy of conventional therapies. In this context, single-enzyme nanogels (SENs) have emerged as an innovative strategy to enhance drug delivery to the brain.^[1]

This study presents the development and characterization of catalase-based nanogels for nose-to-brain delivery, aiming to reduce oxidative stress within the tumor microenvironment and enhance the effectiveness of current GBM therapies. Catalase, a key antioxidant enzyme, has been encapsulated within nanogels designed to optimize its stability and bioavailability in the brain region following intranasal administration (Fig 1).

In vitro and in vivo studies suggest that this approach improves penetration into the central nervous system, minimizes systemic side effects, and offers a promising therapeutic alternative. This strategy could revolutionize GBM treatment, opening new possibilities in personalized medicine and enzyme-based therapies for neurological disorders.

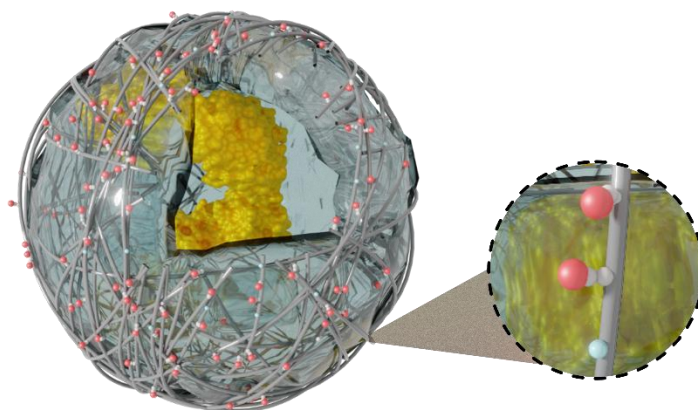


Fig 1. Catalase encapsulated within nanogels composed of different polymers

Referencias

[1] Ana Beloqui, Yu Kobitski Andrei, Nienhaus Gerd Ulrich, and Guillaume Delaittre, *Chemical science*, **2018**, 9, 1006-1013.

Agradecimientos

This work was supported by the Juan de la Cierva Fellowship (2023), the University of Granada (UGR), and POLYMAT – Institute for Polymer Materials of the University of the Basque Country (UPV/EHU).

O9 - ANTI-EGFR CISPLATIN LIPID-BASED NANOPARTICLES FOR THE TREATMENT OF HEAD AND NECK SQUAMOUS CELL CARCINOMA

Elena Domínguez-Jurado¹, Almudena del Campo¹, Carmen Martín-Hernández^{2,4}, Cristina Herrero-Igartua^{2,4}, Iván Bravo¹, Carlos Alonso-Moreno¹, Corina Lorz^{2,3,4}

¹Universidad de Castilla-La Mancha. Unidad NanoDrug, Facultad de Farmacia de Albacete, Albacete-02008, Spain

²Biomedical Oncology Unit, CIEMAT (ed 70A), Ave Complutense 40, 28040 Madrid, Spain;

³Centro de Investigación Biomédica en Red de Cáncer (CIBERONC), Ave Monforte de Lemos 3-5, 28029 Madrid, Spain

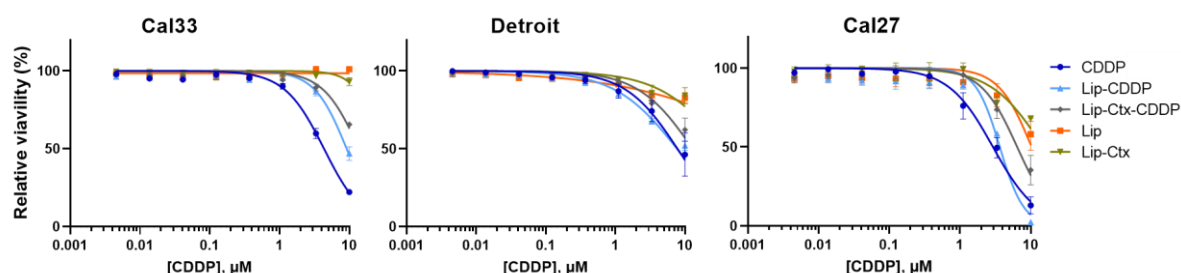
⁴Research Institute 12 de Octubre i+12, University Hospital 12 de Octubre, Ave Córdoba s/n, 28041 Madrid, Spain

⁵Centro de Investigación Biomédica en Red de Cáncer (CIBERONC), Ave Monforte de Lemos 3-5, 28029 Madrid, Spain

Almudena.delcampo@uclm.es

Head and neck squamous cell carcinoma (HNSCC) is one of the most common tumors worldwide. Currently, the most promising treatment for this tumor is a combination of docetaxel and cisplatin. However, recent advances in immunotherapy and targeted therapy suggest that monoclonal antibody-based drugs, including nivolumab, cetuximab and nimotuzumab, may emerge as viable treatment options in the future¹. Although cisplatin-based chemotherapy is used in the first-line treatment of HNSCC, this drug is associated with severe toxicities that negatively impact survival. Typically, acute toxicities of cisplatin, such as nephrotoxicity and ototoxicity, lead to dose reductions, treatment delays or discontinuation (chemotherapy dose-limiting toxicity, CDLT) in at least 30% of treated patients². On the other hand, it has been shown that epidermal growth factor receptor (EGFR) is overexpressed in more than 90% of head and neck tumors, so in this study we proposed a more targeted, efficient and less toxic treatment of HNSCC by generating anti-EGFR conjugated cisplatin liposomes³.

The present study demonstrates that in vitro, the use of cisplatin liposomes conjugated with the cetuximab antibody maintains the cytotoxic activity of the free drug. Furthermore, in vivo biodistribution studies have shown that conjugation with cetuximab achieves its goal of targeting the therapy to the tumor, which, in combination with the encapsulation of the drug, aims to decrease the toxicity of the treatment. Finally, a tumor reduction study is underway in mice.



Referencias

- [1] Kozakiewicz P, Grzybowska-Szatowska L. *Application of molecular targeted therapies in the treatment of head and neck squamous cell carcinoma (Review)*. *Oncol Lett*. 1 de mayo de **2018**;15(5):7497-505.
- [2] Chargi N, Molenaar-Kuijsten L, Huiskamp LFJ, Devriese LA, De Bree R, Huitema ADR. *The association of cisplatin pharmacokinetics and skeletal muscle mass in patients with head and neck cancer: The prospective PLATISMA study*. *Eur J Cancer*. enero de **2022**; 160:92-9.
- [3] Rehmani HS, Issaeva N. *EGFR in head and neck squamous cell carcinoma: exploring possibilities of novel drug combinations*. *Ann Transl Med*. julio de **2020**;8(13):813.

O10 - FABRICACIÓN SOSTENIBLE DE PELÍCULAS DE ÁCIDO POLI(LÁCTICO-CO-GLICÓLICO) CON PROPIEDADES ANTIBACTERIANAS

María del Pilar Maldonado Illescas^{1,2}, María Fernández Grajera³, Verónica Luque Agudo⁴, Amparo María Gallardo Moreno^{1,2,3} y María Luisa González Martín^{1,2,3}

¹ Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Extremadura, Badajoz, España

² Instituto Universitario de Investigación Biosanitaria de Extremadura (INUBE), Badajoz, España

³ Centro de Investigación Biomédica en Red: Bioingeniería, Biomateriales y Nanomedicina (CIBER-BBN), Badajoz, España

⁴ Departamento de Sistemas y Recursos Naturales, Escuela Técnica de Ingeniería de Montes, Forestal y del Medio Natural, Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España

pilarmalill@unex.es

El desarrollo de películas poliméricas mejoradas es clave en el ámbito biomédico para reducir infecciones, especialmente en recubrimientos de dispositivos médicos. Por ello, la búsqueda de materiales antibacterianos y biocompatibles es un área de gran interés [1]. Los materiales compuestos con matrices poliméricas han emergido como una estrategia prometedora por su versatilidad y eficacia. Recientemente, el uso de copolímeros ha cobrado relevancia por su capacidad de ajustar propiedades mecánicas, térmicas y de degradación, optimizando su desempeño biomédico [2]. Entre ellos, el copolímero de ácido poliláctico y poliglicólico (PLA-PGA) destaca por su biocompatibilidad, biodegradabilidad y posibilidad de modificar sus propiedades fisicoquímicas mediante dopantes o cambios en su procesamiento. Para la producción de películas de PLA-PGA es común la utilización de disolventes orgánicos que permiten la disolución del polímero y su posterior deposición en sustratos adecuados. Sin embargo, muchos de los disolventes tradicionalmente empleados en este proceso pertenecen a la familia de los halogenados, en particular los clorados, como el cloroformo [3]. Estos compuestos presentan una elevada toxicidad y pueden generar riesgos tanto para la salud humana como para el medio ambiente. En este sentido, la utilización de disolventes verdes surge como una alternativa viable con menor impacto ambiental y mayor seguridad para su empleo. Uno de los candidatos más prometedores en esta línea de investigación es el carbonato de dimetilo (DMC), un disolvente que se considera una opción más sostenible y menos tóxica en comparación con los convencionales [4]. En este estudio, se ha realizado la síntesis de películas de PLA-PGA en diferentes proporciones empleando carbonato de dimetilo como disolvente para su elaboración. En trabajos previos [5] comprobamos que la inclusión de Mg y bromuro de hexadeciltrimetilamonio (CTAB) en películas de PLA permitía a ese material presentar una respuesta efectiva frente a la colonización bacteriana. Por ello, hemos considerado la valoración de la inclusión de estos dos dopantes en las películas basadas en este copolímero teniendo en cuenta que las diferentes condiciones de trabajo pueden afectar a la configuración de las cadenas del polímero en las películas fabricadas. En concreto, se valorarán las propiedades fisicoquímicas superficiales de las películas, tales como la hidrofobicidad y tensión superficial, obtenidas mediante goniometría, y propiedades térmicas y estructurales, analizadas mediante calorimetría diferencial de barrido y difracción de rayos X. La actividad antibacteriana de las mismas se estudiará frente a *Staphylococcus epidermidis*, una cepa recurrente en infecciones de dispositivos médicos, empleando ensayos de adhesión bacteriana inicial y formación de biocapas.

Referencias

1. Kalirajan C. et al. *Polymers* (Basel) (2021) 6;13(17):3015.
2. Yoon S.K. et al. *Polymers* (Basel) (2022) 16;14(16):3322.
3. Clarke, C. J. et al. *Chem Rev* (2018) 118, 747–800.
4. Gironi, F. et al. *Energ Source, Part A* (2011) 33, 1949–1959.
5. Fernández-Grajerá M. et al. *Polymers* (Basel) (2022), 14, 4976.

Agradecimientos

Este trabajo es parte del proyecto PID2022-140422OB-I00 financiado por MICIU/AEI /10.13039/501100011033 y por FEDER, UE. Las mediciones de goniometría fueron realizadas por la ICTS "NANBIOSIS," U16: "Caracterización de Superficies y Colonización Bacteriana" del CIBER en Bioingeniería, Biomateriales y Nanomedicina (CIBER-BBN).

O11 - CO₂ CAPTURE FROM WATER USING A COPPER/CHROMIUM-ADENINE SUPRAMOLECULAR ASSEMBLED POROUS METAL-ORGANIC MATERIAL

Ekain Maiza-Razkin^a, Garikoitz Beobide^{a,b}, Oscar Castillo,^{a,b,*} Antonio Luque^{a,b}, Rubén Pérez-Aguirre^{a,*}, Sonia Pérez-Yañez^{a,b}

^aDepartamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencia y Tecnología, Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea, UPV/EHU, E-48940 Leioa, Spain.

^bBCMaterials, Basque Center for Materials, Applications and Nanostructures, UPV/EHU Science Park, E-48940 Leioa, Spain.

*Corresponding authors. E-mail addresses: oscar.castillo@ehu.eus (O. Castillo), ruben.pereza@ehu.eus (R. Pérez-Aguirre)

ABSTRACT:

A supramolecular metal-organic porous material of formula $[\text{CrCu}_6(\mu\text{-OH})_6(\mu\text{-adeninato-}\kappa\text{N3}:\kappa\text{N9})_6(\mu\text{-OH}_2)_6]_2(\text{SO}_4)_3$ (**Cu₆Cr**) has been tested for CO₂ capture from water. The features of this compound: being insoluble in water, having a flexible supramolecular structure and presenting protonable positions on the adeninato ligands, made it a potential candidate for this task. The experimental determination of the CO₂ capture from water was completed by two techniques: magnetic sustentation and gravimetric measurements. Both techniques verified the CO₂ capture but the information provided is not equal but complementary. The magnetic sustentation experiment measures the mass being incorporated into the porous material (which will depend on the specific chemical form in which is being captured: physisorption, hydrogen carbonate or carbamate) and the gravimetric measurement provides the data of the CO₂ mass being captured in the aqueous suspension of the **Cu₆Cr** particles without determining its chemical form in which this capture is being taking place. The results after 1h of CO₂ bubbling (300 ml·min⁻¹) in the aqueous suspension of **Cu₆Cr** particles is a captured mass of 24.8% for the magnetic sustentation and 17.1% for the gravimetric technique. The difference accounts for the fact, corroborated by FTIR spectroscopy, that the CO₂ is captured in the form of adenine/HCO₃⁻ pairs. These values normalize to almost identical values: 5.5 HCO₃⁻/**Cu₆Cr** molecular unit and 5.3 CO₂/**Cu₆Cr** molecular unit and are very close to the theoretical maximum value of 6 that the heptameric **Cu₆Cr** entity could capture because of the presence of six adeninato ligands per heptameric unit. CO₂ adsorption isotherms, adsorption kinetic, desorption kinetic and cycling are also reported.

O12 - PHOTO-RESPONSIVE Ru(II) COMPLEXES WITH MONODENTATE LIGANDS

Guglielmo Spinelli^{1,3}, Amal Ferchichi², Albert Gallen¹, Manuel Martínez¹, Montserrat Ferrer¹, Pere Fontova^{4,5}, Vanessa Soto-Cerrato^{4,6}, Ana B. Caballero^{1,3}, Patrick Gamez^{1,3}

¹Departament de Química Inorgànica i Orgànica, Facultat de Química, Secció de Química Inorgànica, Universitat de Barcelona, Martí i Franquès, 1-11, 08028 Barcelona, Spain

²Laboratory of Material Chemistry, Faculty of Sciences of Bizerte, University of Carthage, Bizerte Zarzouna, Tunisia

³Institute of Nanoscience and Nanotechnology (IN2UB), Universitat de Barcelona, Barcelona, Spain

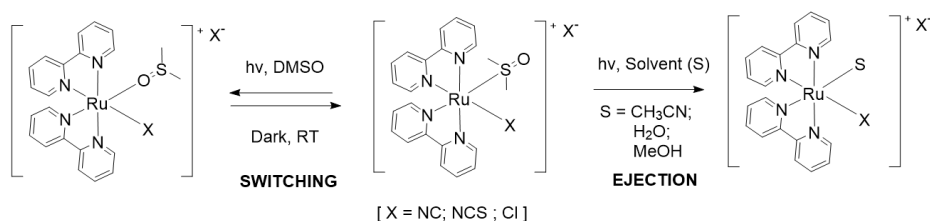
⁴Department of Pathology and Experimental Therapeutics, Faculty of Medicine and Health Sciences, Universitat de Barcelona, Campus Bellvitge, Feixa Llargà s/n, 08907 L'Hospitalet de Llobregat, Barcelona, Spain

⁵Department of Chemistry, Universidad de Burgos, 09001 Burgos, Spain

⁶Oncobell Program, Institut d'Investigació Biomèdica de Bellvitge (IDIBELL), L'Hospitalet de Llobregat, Barcelona, Spain

gspinesp8@alumnes.ub.edu

Ruthenium(II) complexes are well known for their interesting photochemical properties and are widely used in nanoparticles [1], solar cells [2], and hydrogels [3] to obtain photo-responsive materials. Ru(II) complexes with the general formula $\text{Ru}(\text{bpy})_2(\text{L})_2$, where bpy is 2,2'-bipyridine and L is a monodentate photolabile ligand, are commonly used in these systems. In this work we describe ruthenium(II) complexes with the general formula *cis*- $\text{Ru}(\text{bpy})_2(\text{X})_2$ or *cis*- $\text{Ru}(\text{bpy})_2(\text{X})(\text{Y})$, where X represents an anionic monodentate ligands (Cl^- ; NCS^- ; CN^-), and Y is dimethylsulfoxide (DMSO). The photochemical and photophysical properties of these complexes were studied in solution under light irradiation using ^1H NMR spectroscopy, UV/Vis spectrophotometry and HPLC-MS. Upon light irradiation in acetonitrile, methanol or water, the complexes undergo photodissociation of their ligands X and/or Y. However, in DMSO solution, a photochemical $\text{S} \rightarrow \text{O}$ linkage isomerization of the DMSO ligand (Y) occurs. This kind of mechanistic studies can be useful to understand the behavior of light-responsive metal complexes and explore diverse applications in medical and material-related fields.



Referencias

- [1] Meijer, M. S., Natile, M. M., & Bonnet, S. (2020). 796 nm Activation of a Photocleavable Ruthenium(II) Complex Conjugated to an Upconverting Nanoparticle through Two Phosphonate Groups. *Inorganic Chemistry*.
- [2] Li, G., Yella, A., Brown, D. G., Gorelsky, S. I., Nazeeruddin, M. K., Grätzel, M., ... Shatruk, M. (2014). Near-IR Photoresponse of Ruthenium Dipyrrinate Terpyridine Sensitizers in the Dye-Sensitized Solar Cells. *Inorganic Chemistry*, 53(11), 5417–5419.
- [3] Sara Tavakkoli Fard, Boonya Thongrom, Katharina Achazi, Guoxin Ma, Rainer Haag and C. Christoph Tzschucke. Photo-responsive hydrogels based on a ruthenium complex: synthesis and degradation. *Soft Matter*, 2024, 20, 1301-1308

Agradecimientos

Financial support from the Spanish Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades (Project PID2020-115537RB-I00, MCIN/AEI /10.13039/501100011033) is kindly acknowledged.

O13 - NUEVOS CATALIZADORES BIMETÁLICOS BASADOS EN PORFIRINAS PARA LA VALORIZACIÓN DE CO₂

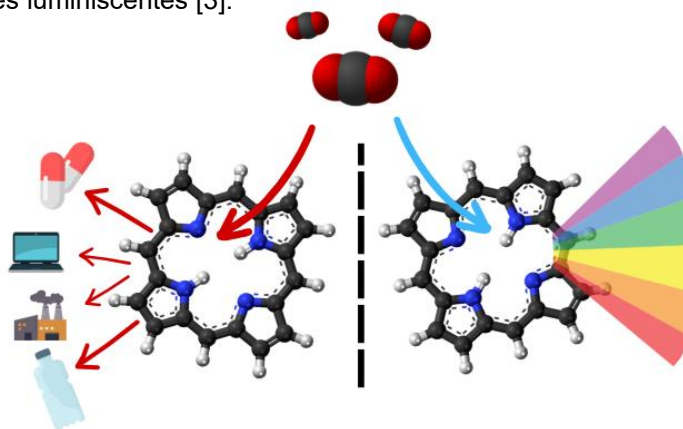
G. Gortázar¹, Maialen Terceño-Carrillo², J. Cepeda², S. Carrasco¹, P. Horcajada¹

¹ Unidad de Materiales Porosos Avanzados, IMDEA Energía. Avda. Ramón de la Sagra 3, 28935, Móstoles

² Departamento de Química Aplicada, Facultad de Química, Universidad del País Vasco/Euskal Herriko Unibertsitatea (UPV/EHU), 20018 Donostia, Spain

guillermo.gortazar@imdea.org

El desarrollo de nuevas tecnologías para la valorización de CO₂ es uno de los principales campos de estudio hacia una completa descarbonización de la economía y la lucha contra el cambio climático. En este sentido, los polímeros de coordinación porosos (redes metal-orgánicas o, por sus siglas en inglés, MOFs) han sido ampliamente estudiados como sistemas de captura de carbono debido a sus elevadas áreas superficiales, su gran capacidad de adsorción y el fácil ajuste de sus propiedades fisicoquímicas, entre otras [1]. Con objeto de solventar sus mayores limitaciones, *i.e.* estabilidad, eficiencia catalítica y reciclabilidad, se ha propuesto el desarrollo de MOFs basados en ligandos altamente conjugados (*e.g.*, porfirinas) y metales en alto estado de valencia (III-IV). Además, el uso de estos ligandos macrocíclicos abre la puerta al desarrollo de catalizadores bimetálicos a través de la combinación de diferentes centros activos insaturados. En este trabajo, se presenta la síntesis de dos nuevas familias de MOFs basadas en dos porfirinas comerciales de tipo *trans*-A2-B2 con grupos coordinantes de tipo carboxilato, denominadas 5,15-(di-4-carboxifenil)-10,20-(difenil)porfirina (DCPP) y 5,15-(di-4-carboxifenil)porfirina (BDP), apenas descritas hasta la fecha, con una gran variedad de cationes lantánidos (*e.g.*: Ce, Nd, Tb, Dy). Estos materiales han sido preparados mediante síntesis tanto solvotérmicas como microondas [2], dando lugar a diferentes series isoestructurales porosas (BET > 700 m²/g). Dichos materiales han sido caracterizados mediante difracción de rayos X, espectroscopía FTIR y UV-vis, adsorción de gases, microscopía electrónica o análisis termogravimétrico, entre otras; y su estabilidad evaluada en diferentes condiciones (disolventes orgánicos y medios acuosos a diferentes pH). En la actualidad, estos nuevos materiales están siendo testados como potenciales catalizadores en reacciones de valorización de CO₂ y en el desarrollo de sensores luminiscentes [3].



Referencias

- [1] Liang, J., Huang, Y., Cao, R. *Coordination chemistry reviews*, **2017**, 378, 32-65
- [2] Carrasco S., Orcajo G., Martínez F., *et al Materials Today Advances* **2023**, 19, 100390
- [3] Razquin-Bobillo L., Zabala-Lekuona A., García JÁ., *et al Advanced optical materials*, **2024**, 12, 2401472

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado por el Ministerio Español de Ciencia e Innovación/ FEDER-UE en el marco del proyecto "Nuevos Polímeros de Coordinación Avanzados para la Valorización de CO₂" (NAPOLION) (Generación de Conocimiento, PID2022-139956OB-I00).

O14 - SÍNTESIS DE POLICARBONATOS MEDIANTE COPOLIMERIZACIÓN DE EPÓXIDOS Y CO₂: INFLUENCIA DE LA ESTRUCTURA DEL CATALIZADOR EN LA POLIMERIZACIÓN

Jesús Naranjo¹, Pablo Salcedo², Antonio Rodríguez-Diéguez², Felipe de la Cruz-Martínez^{*1}, Agustín Lara-Sánchez^{*1}

¹Universidad de Castilla-La Mancha, Departamento de Química Inorgánica, Orgánica y Bioquímica-Centro de Innovación en Química Avanzada (ORFEO-CINQA), Facultad de Ciencias y Tecnologías Químicas and Instituto Regional de Investigación Científica Aplicada-IRICA, 13071-Ciudad Real.

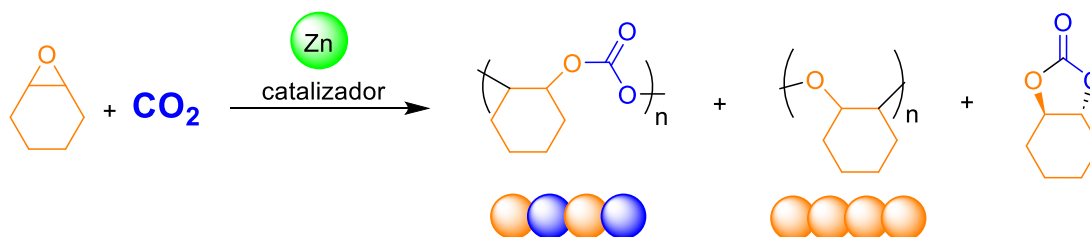
²Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071-Granada.

Jesus.NaranjoRodrigu@uclm.es

La copolimerización de epóxidos y dióxido de carbono (CO₂) es una vía altamente atractiva para la síntesis de policarbonatos, constituyendo una alternativa más sostenible a los policarbonatos tradicionales, que emplean bisfenol A y fosgeno.^[1] Además, el uso de CO₂ como monómero es muy interesante, pues, aunque es uno de los principales gases de efecto invernadero, es una fuente de carbono abundante, económica y no inflamable.^[2]

Estos materiales tienen diversas aplicaciones, las cuales derivan de su estructura y peso molecular, usándose como elastómeros, adhesivos o como material para ingeniería de polímeros.^[3] Debido a su alta demanda industrial, es fundamental desarrollar catalizadores que minimicen los riesgos asociados a sus residuos, priorizando el uso de metales biocompatibles, como el zinc.^[4]

En este trabajo, describimos la síntesis y caracterización estructural de una serie de complejos de zinc soportados por ligandos heteroescorpionato, y su uso como catalizadores en el proceso de copolimerización de epóxidos y CO₂ (Esquema 1). Los resultados muestran diferencias estructurales en función del ligando empleado, lo que a su vez influye en la actividad y selectividad catalítica del proceso, así como en el peso molecular del policarbonato obtenido.



Esquema 1

Referencias

- [1] G. Abts, T. Eckel, R. Wehrmann, In *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry*, **2014**.
- [2] S. J. Poland, D. J. Darensbourg, *Green Chem.*, **2017**, 19, 4990–5011.
- [3] G. S. Sulley, G. L. Gregory, T.T.D. Chen, L. Peña-Carrodeguas, G. Trott, A. Santmarti, K. Lee, N. J. Terrill, C. K. Williams, *J. Am. Chem. Soc.*, **2020**, 142, 4367–4378.
- [4] F. de la Cruz-Martínez, M. Martínez de Sarasa Buchaca, J. Martínez, J. Tejeda, J. Fernández-Baeza, C. Alonso-Moreno, A. M. Rodríguez, J. A. Castro-Osma, A. Lara-Sánchez, *Inorg. Chem.*, **2020**, 59, 8412–8423.

Agradecimientos

Los autores agradecen la financiación procedente del Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades/Agencia Estatal de Investigación (PID2023-147240OB-I00, RED2022-134287-T), Junta de Comunidades de Castilla-La Mancha (SBPLY/21/180501/000132, SBPLY/23/180225/000094) y Universidad de Castilla-La Mancha (2021-GRIN-31240).

O15 - OPTIMIZACIÓN DEL COEFICIENTE DE EXPANSIÓN TÉRMICA Y PROPIEDADES ELECTROQUÍMICAS DE $(\text{PrBa})_{0.98}\text{FeO}_{3-\Delta}$ MEDIANTE DOPAJE CON CATIONES DE ALTA VALENCIA

Abraham Sánchez-Caballero¹, Lucía dos Santos-Gómez¹, Javier Zamudio-García², José M. Porras-Vázquez¹, David Marrero-López³

¹ Universidad de Málaga, Dpto. de Química Inorgánica, Cristalografía y Mineralogía, 29071-Málaga, España.

² Department of Energy Conversion and Storage, Technical University of Denmark, Fysikvej, Building 310, 2800 Kgs., Lyngby, Denmark.

³ Universidad de Málaga, Dpto. de Física Aplicada I, 29071-Málaga, España.

abraham11sc@uma.es

Lograr un equilibrio entre estabilidad estructural, compatibilidad de expansión térmica y desempeño electroquímico es un desafío clave en el desarrollo de materiales para celdas de combustible de óxido sólido (SOFC)^{1,2}. En este trabajo, investigamos el efecto de dopantes de alta valencia sobre las propiedades estructurales, térmicas y electroquímicas de los electrodos de aire $(\text{PrBa})_{0.98}\text{Fe}_{0.9}\text{M}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$ ($\text{M} = \text{Ga}^{3+}, \text{Ti}^{4+}, \text{Zr}^{4+}, \text{Nb}^{5+}, \text{Mo}^{6+}, \text{W}^{6+}$ y Re^{7+}) para SOFC. El análisis termogravimétrico muestra que un mayor estado de oxidación del dopante disminuye la pérdida de oxígeno durante el calentamiento, lo que sugiere una mayor estabilidad de la subred de oxígeno. La dilatometría indica además una reducción en los coeficientes de expansión térmica, desde $22.3 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ para las muestras dopadas con Ga^{3+} hasta $15.1 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ para las dopadas con W^{6+} . La espectroscopía de impedancia revela una correlación clara entre la resistencia a la polarización del electrodo y el estado de oxidación del dopante, con un ligero aumento desde $0.14 \Omega \cdot \text{cm}^2$ en la muestra dopada con Ga^{3+} hasta $0.21 \Omega \cdot \text{cm}^2$ en la dopada con W^{6+} a 700°C . Estos resultados destacan que, aunque los dopantes de alta valencia estabilizan la subred de oxígeno y reducen la expansión térmica, no necesariamente mejoran la actividad de reducción de oxígeno. En general, este estudio sistemático aporta información clave para optimizar las estrategias de dopaje y mejorar el rendimiento de los materiales de electrodos de aire en SOFC.

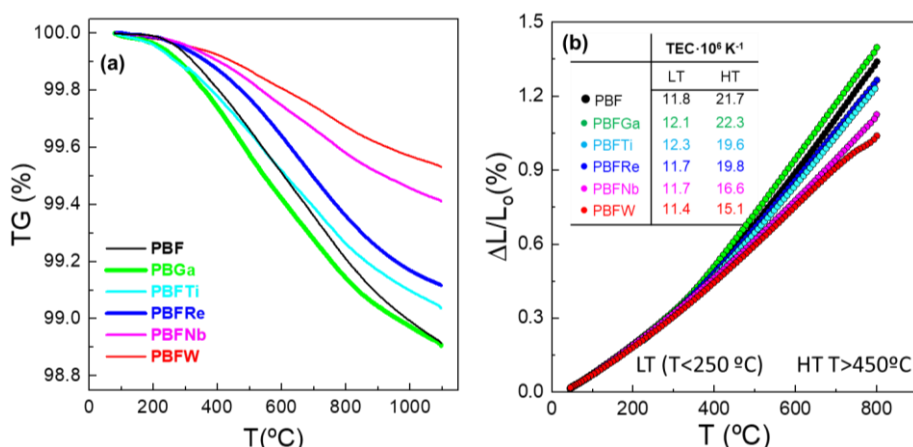


Figura 1. Análisis termogravimétrico y dilatometría de la serie $(\text{PrBa})_{0.98}\text{Fe}_{0.9}\text{M}_{0.1}\text{O}_{3-\delta}$.

Referencias

- [1] D. Kim, S.J. Son, M. Kim, H.J. Park, J.H. Joo, $\text{PrBaFe}_2\text{O}_{5+\delta}$ promising electrode for redox-stable symmetrical proton-conducting solid oxide fuel cells, *Journal of the European Ceramic Society*, **2021**, 41(12), 5939-5946.
- [2] T. Chen, S. Pang, X. Shen, X. Jiang, W. Wang, Evaluation of Ba-deficient $\text{PrBa}_{1-x}\text{Fe}_2\text{O}_{5+\delta}$ oxides as cathode materials for intermediate-temperature solid oxide fuel cells, *RSC Advances*, **2016**, 6(17), 13829-13836.

O16 - INTEGRACIÓN DE MATERIALES BIDIMENSIONALES DE TiO_2 LAMINAR EN DISPOSITIVOS DE MEMORIA.

Inés García-Benito,¹ José Carlos Pérez,² Josefa Ortiz Bustos,¹ Miguel Díaz Sánchez,¹ Isabel del Hierro,¹ Beatriz Romero,² Santiago Gómez-Ruiz¹

¹Departamento de Biología y Geología, Física y Química Inorgánica, Universidad Rey Juan Carlos, Móstoles, Madrid, 28933, España

²Departamento de Matemática Aplicada, Ciencia e Ingeniería de los Materiales y Tecnología Electrónica, Universidad Rey Juan Carlos, Móstoles, Madrid, 28933, España

ines.garcia.benito@urjc.es

Los memristores son nuevos dispositivos electrónicos que combinan el funcionamiento como resistencia con características de memoria. Su capacidad para almacenar información a través de su resistencia interna los posiciona como una tecnología clave en aplicaciones de memoria no volátil, almacenamiento de datos y computación neuromórfica. Este tipo de dispositivos exhiben una relación entre el voltaje y la corriente que depende del historial de excitación. Gracias a su habilidad para simular las propiedades de las sinapsis neuronales, los memristores están emergiendo como componentes fundamentales en el desarrollo de sistemas de procesamiento neuromórfico y dispositivos de memoria de alta densidad.

Recientemente, los avances en el campo de los materiales bidimensionales (2D) han abierto nuevas posibilidades para mejorar el rendimiento de este tipo de dispositivos.¹ En particular, los materiales basados en TiO_2 están emergiendo como componentes prometedores en la fabricación de memristores con alta capacidad, dada su estructura cristalina, su área superficial y sus propiedades electrónicas excepcionales.³ Utilizando como base la experiencia del grupo de investigación en la síntesis y preparación de TiO_2 , se emplea este tipo de materiales en dispositivos de memoria con el fin de alcanzar una mejor modulación de la resistencia, mayor estabilidad y una significativa mejora en la velocidad de respuesta de los dispositivos. Además, el TiO_2 en su forma 2D presenta una gran versatilidad, ya que puede ajustarse fácilmente a diferentes configuraciones de dispositivos memristivos, lo que lo hace ideal para su incorporación en la fabricación de memoria avanzada, pese a que su integración sigue siendo el principal reto.

Estudios recientes muestran que el uso de TiO_2 en memristores puede mejorar la capacidad de almacenamiento, además de optimizar el rendimiento eléctrico, incrementando la fiabilidad y la durabilidad de los dispositivos.³ Nuestra investigación comienza con la integración de materiales 2D, como el TiO_2 laminar, con el fin de ampliar sus aplicaciones en sistemas de memoria de próxima generación y computación a gran escala.

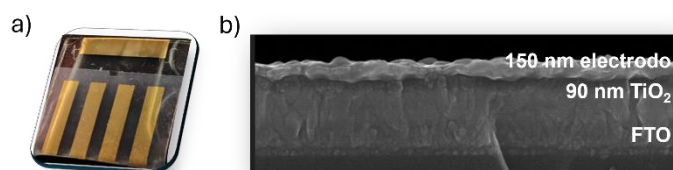


Figura 1. a) Dispositivo tras finalizar la fabricación; b) Imagen de microscopía electrónica de barrido de la sección transversal.

Referencias

- [1] K. Tang, *et al.*, *Adv. Electron. Mater.*, 2022, 8, 2101099.
- [2] M. U. Rashid, *et al.*, *Current Applied Physics*, 2024, 64, 16-24.
- [3] W. Jia *et al.*, *Materials Science in Semiconductor Processing*, 2024, 182, 108688.

O17 - SUPERFICIES MICROESTRUCTURADAS DE ÁCIDO POLILÁCTICO PARA SU USO EN BIOMEDICINA

Margarita Hierro Oliva^{1,2,3}, Clara Escudero Duch^{1,4}, Juan Manuel Casares López^{2,3}, María Fernández Grajera^{1,2,3}, Amparo María Gallardo Moreno^{2,1,3}, Nuria Vilaboa Díaz^{1,4}, María Luisa González Martín^{2,1,3}

¹ Centro de Investigación Biomédica en Red: Bioingeniería, Biomateriales y Nanomedicina (CIBER-BBN).

² Departamento de Física Aplicada, Facultad de Ciencias, Universidad de Extremadura, Badajoz, España.

³ Instituto Universitario de Investigación Biosanitaria de Extremadura (INUBE), Badajoz, España.

⁴ Hospital Universitario La Paz-IdiPAZ, 28046 Madrid, España.

margahierro@unex.es

En el campo de la ingeniería de materiales y la biotecnología, el desarrollo de biomateriales con superficies que mejoren la integración y tengan propiedades antimicrobianas es un tema de gran interés que está en constante evolución y ha crecido exponencialmente en los últimos años [1]. En la actualidad, el desarrollo de estos biomateriales se orienta hacia la fabricación de superficies a las que se aplican modificaciones químicas y/o físicas para impedir la adhesión o la supervivencia de las bacterias [2], evitando así la inclusión de antibióticos. En esta línea, hay estudios que muestran que la producción de determinadas topografías en la superficie de biomateriales puede beneficiar la formación de tejido y/o reducir la probabilidad de desarrollar una infección debido al obstáculo que determinadas microestructuras muestran a la adhesión microbiana [3]. Por tanto, las características superficiales que influyen directamente en la biocompatibilidad son determinantes a la hora de desarrollar con éxito un biomaterial. En esta comunicación se presenta un método de producción de películas fabricadas con un polímero biodegradable y bioadsorbible, como es el ácido poliláctico (PLA), que puede realizarse a escala masiva y que resulta económicamente muy atractivo, ya que no requiere ningún equipo basado en litografía, grabado láser, autoensamblado molecular, pulverización de plasma o implantación de iones, que son las técnicas que se utilizan actualmente con polímeros para generar superficies estructuradas. Este método consiste en incorporar tensioactivos a una matriz de PLA que, tras el contacto con un medio acuoso, presenta una superficie microestructurada con propiedades mejoradas en términos de capacidad antimicrobiana y angiogénesis. Existe una amplia variedad de tensioactivos que pueden interactuar de forma diferente con el polímero y generar topografías distintas. Para este trabajo se han seleccionado tensioactivos con características diferentes, uno aniónico (dodecilsulfato sódico, SDS), uno catiónico (bromuro de hexadeciltrimetilamonio, CTAB) y uno no iónico (polisorbato 20, Tween-20, T20). La superficie de los films de PLA con los distintos tensioactivos incorporados se ha caracterizado mediante microscopía de fuerza atómica (AFM), perfilometría y goniometría de ángulo de contacto. Además de ver las características superficiales de estos films, se ha evaluado la respuesta antibacteriana y la bioactividad de las películas de PLA con los diferentes surfactantes, utilizando *Staphylococcus epidermidis* ATCC 35983 (ATCC, American Type Collection Culture) y células inmortalizadas de queratinocitos humanos (HaCaT), respectivamente.

Tras la caracterización de las muestras se observa cómo la inclusión de los distintos surfactantes produce diferentes estructuras en la superficie de los films de PLA. Dependiendo de si el surfactante que se integra en la matriz es SDS, CTAB o T20, en la superficie de los films se producen estructuras cónicas, agujeros circulares o estructuras en forma de espiral, respectivamente. También se observa una variación en la topografía y la hidrofobicidad de la superficie dependiendo del tensioactivo que se incluya en la matriz polimérica. Los experimentos realizados con bacterias muestran que la introducción de surfactantes en la matriz polimérica provoca una disminución de la adhesión bacteriana con respecto al PLA, excepto en el caso del SDS, cuyos resultados son muy similares a los de la muestra de control. Por otro lado, se observa que la presencia de tensioactivos reduce la adhesión y viabilidad de células humanas medidas a lo largo del tiempo para los films que contienen SDS y CTAB. Hecho que no ocurre para la

muestra que contienen T20, para la cual la viabilidad de las células sembradas se muestra en aumento a lo largo del tiempo. En conclusión, estos resultados *in vitro* muestran que para llegar a un compromiso entre actividad antimicrobiana y viabilidad celular sobre films de PLA enriquecidos con surfactantes es necesario seleccionar cuidadosamente el tipo molécula activa: todo señala a que el T20 puede ser un buen candidato para generar superficies microestructuras de PLA con una biocompatibilidad mejorada.

Referencias

[1] Mark Sheridan, Caitriona Winters, Fernanda Zamboni, Maurice N. Collins, *Current Opinion in Biomedical Engineering*, **2022**, 22, 100373.

[2] Emad Naseri, Ali Ahmadi, *European Polymer Journal*, **2022**, 173, 111293.

[3] Sang Won Lee, K. Scott Phillips, Huan Gu, Mehdi Kazemzadeh-Narbat, Dacheng Ren, *Biomaterials*, **2021**, 268, 120595.

Agradecimientos

Este trabajo ha sido financiado con un proyecto intramural CIBER-BBN EARLY STAGE PLUS. También forma parte del proyecto PID2022-140422OB-I00 financiado por MCIN/AEI/10.13039/501100011033/ y FEDER «Una manera de hacer Europa». Además, las medidas de goniometría, perfilometría y AFM fueron realizadas por la ICTS «NANBIOSIS», concretamente por la Unidad U16: «Caracterización de Superficies y Colonización Bacteriana» del CIBER en Bioingeniería, Biomateriales y Nanomedicina (CIBER-BBN).

O18 - LANTHANIDE SENSITIZATION IN SELF-ASSEMBLED AQUEOUS SOLUTION FOR BIOIMAGING APPLICATIONS

Amparo Navarro,¹ Álvaro Ruiz-Arias,² Francisco Fueyo-González,³ Carolina Izquierdo-García,³ Marta Gutiérrez-Rodríguez,^{3,4} Rosario Herranz,³ Chiara Burgio,⁵ Antonio Reinoso,⁵ Juan M. Cuerva,⁶ Juan A. González-Vera,² and Angel Orte²

¹Departamento de Química Física y Analítica. Universidad de Jaén. Facultad de Ciencias Experimentales, 23071 Jaén, Spain, ²Nanoscopy-UGR Laboratory. Departamento de Físicoquímica. Unidad de Excelencia de Química Aplicada a Biomedicina y Medioambiente, Facultad de Farmacia. University of Granada. Campus Cartuja, 18071, Granada, Spain, ³Instituto de Química Médica (IQM-CSIC). Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid, Spain, ⁴PTI-Global Health CSIC, Juan de la Cierva 3, 28006 Madrid, Spain, ⁵Departamento de Bioquímica y Biología Molecular II, Facultad de Farmacia, Universidad de Granada, Campus Cartuja, 18071 Granada, Spain, ⁶Departamento de Química Orgánica, Unidad de Excelencia de, Química Aplicada a Biomedicina y Medioambiente, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada Campus Fuentenueva, 18071 Granada, Spain.

anavarro@ujaen.es

We present a luminophore, 8-methoxy-2-oxo-1,2,4,5-tetrahydrocyclopenta [de]quinoline-3-phosphonic acid which is able to dynamically self-assemble in water, coordinate with Tb(III) and Eu(III), and acts as a sensitizing antenna for photoluminescent emission from lanthanides in aqueous media.¹ This system has been tested to determine the degree of photobleaching in human embryonic kidney (HEK)-293 cells.² An in-depth photophysical and time-dependent density functional theory (TD-DFT) computational study has revealed different sensitization mechanisms for Eu(III) and Tb(III), Förster and Dexter, in which stable complexes are formed in water.

The knowledge of the photophysical mechanisms behind this behavior is key for the rational design and the development of applications of lanthanide antennas specifically designed to PLIM microscopy in cellulo. The emission from the lanthanide emitter is characterized by narrow emission bands and very long photoluminescent lifetimes which makes them especially interesting for the progress of areas such as luminescent bioprobes and medical diagnostics. These applications require luminophores that are stable in aqueous media while in most lanthanide-based emitters, the emission is usually quenched through the vibrational relaxation of water molecules bonded to the lanthanide in aqueous solution.

References:

- [1] A. Navarro, A. Ruiz-Arias, A. Fueyo-González, C. Izquierdo-García, T. Peña-Ruiz, M. Gutiérrez-Rodríguez, R. Herranz, J.M. Cuerva, J.A. González-Vera, A. Orte, Multiple pathways for lanthanide sensitization in self-assembled aqueous complexes. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* **2024**, 323 124926.
[2] A. Ruiz-Arias, F. Fueyo-González, C. Izquierdo-García, A. Navarro, M. Gutiérrez-Rodríguez, R. Herranz, C. Burgio, A. Reinoso, J.M. Cuerva, A. Orte, J.A. González-Vera, Exchangeable Self-Assembled Lanthanide Antennas for PLIM Microscopy. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2024**, 63, e202314595.

Acknowledgements

We would like to acknowledge for the funding support Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades PID2023-148243OB-I00, PID2020-114256RB-I00, Grant PID2022-137214OB-C22 funded by MICIU/AEI/10.13039/501100011033 and by "ERDF/EU". Universidad de Jaén through Programa Operativo FEDER Andalucía 2021–2027/Junta de Andalucía-Consejería de Universidades, Investigación e Innovación (Project M.1.B.B TA_000722, Grant 2024/00216).

O19 - DESIGN OF A NANO-INSECTICIDE BASED ON CAP-NPs FUNCTIONALIZED WITH BIOACTIVE BOTANICAL COMPOUND FOR PEST CONTROL

M. Salvachúa-de la Fuente¹, G.B. Ramírez-Rodríguez¹, J.M. Delgado-López¹

¹Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Avda. de Fuente Nueva s/n, 18071, Granada

martasalvachua@ugr.es

Invertebrate pests, weeds and various pathogens have consistently caused significant agricultural losses worldwide. While chemical pesticides initially enhanced agricultural productivity, their extensive use has resulted in severe consequences, including soil and water contamination, pest resistance and resurgence, and toxicity to non-target organisms [1]. Additionally, biological invasions result in annual losses of \$30-50 billion, underscoring the urgent need for effective management strategies [2].

Botanical insecticides have gained attention as eco-friendly alternatives due to their biodegradability, minimal toxicity to mammals and beneficial fauna, and selective action [3]. Derived from plant secondary metabolites, their agricultural application is limited by poor aqueous solubility and vulnerability to degradation caused by ultraviolet radiation, high temperatures, and oxidation [3]. These drawbacks reduce their persistence and efficacy in the field, requiring frequent application to maintain their effectiveness.

Nanotechnology has emerged as a promising solution to overcome these challenges. Among various nanocarriers, calcium phosphate nanoparticles (CaP-NPs) stand out for their composition, biocompatibility, biodegradability, and bioactivity. CaP-NPs can protect bioactive compounds from environmental degradation, enhance adhesion to plant surfaces, and enable controlled release of active ingredients [4, 5].

This work aims at the development of a green nano-insecticide based on the adsorption of a bioactive botanical compound onto CaP-NPs. We evaluated the performance of this nano-insecticide revealing a sustainable release and protection against thermal degradation of the active molecule, resulting in an enhanced pest control efficiency. By integrating nanotechnology into sustainable agriculture practices, this approach aligns with global initiatives such as the UN Sustainable Development Goals and the European Green Deal's "Farm to Fork" strategy.

References:

- [1] Hofmann, T., Lowry, G. V., Ghoshal, S., Tufenkji, N., Brambilla, D., Dutcher, J. R., ... & Wilkinson, K. J. (2020). Technology readiness and overcoming barriers to sustainably implement nanotechnology-enabled plant agriculture. *Nature Food*, 1(7), 416-425.
- [2] Franco Oliveira, F., Takeshita, V., Zuverza-Mena, N., Milagres, J., Tamez, C., da Silva, W. L., ... & White, J. C. (2025). Zein-Based Nanocarrier of the Insecticide Cyantraniliprole for the Control of Bemisia tabaci MEAM1 (Whitefly). *ACS Agricultural Science & Technology*.
- [3] Campos, E. V., Proença, P. L., Oliveira, J. L., Bakshi, M., Abhilash, P. C., & Fraceto, L. F. (2019). Use of botanical insecticides for sustainable agriculture: Future perspectives. *Ecological indicators*, 105, 483-495.
- [4] Ramírez-Rodríguez, G. B., Dal Sasso, G., Carmona, F. J., Miguel-Rojas, C., Pérez-de-Luque, A., Masciocchi, N., ... & Delgado-López, J. M. (2020). Engineering biomimetic calcium phosphate nanoparticles: a green synthesis of slow-release multinutrient (NPK) nanofertilizers. *ACS Applied Bio Materials*, 3(3), 1344-1353
- [5] Parra-Torrejón, B., Cáceres, A., Sánchez, M., Sainz, L., Guzmán, M., Bermúdez-Perez, F. J., ... & Delgado-López, J. M. (2023). Multifunctional nanomaterials for biofortification and protection of tomato plants. *Environmental Science & Technology*, 57(40), 14950-14960.

Acknowledgments:

This work has been performed thanks to the funding of the project Nano-Bip (TED2021- 132151A-I00) funded by MCIN/AEI/ 10.13039/501100011033 and the "European Union NextGenerationEU/PRTR".

O20 - APLICACIÓN DE MATERIALES MULTIFUNCIONALES BIOPOLIMÉRICOS EN TINCIÓN TEXTIL: UNA ALTERNATIVA MÁS SOSTENIBLE

Ruperto Bermejo-Román¹, M^a Carmen Hurtado¹, M^a Carmen Murillo-Cruz¹, Cynthia V. González-López^{2,3} y F. Gabriel Acién-Fernández^{2,3}

¹Departamento de Química Física y Analítica, Escuela Politécnica Superior de Linares, Campus Científico Tecnológico de Linares, Universidad de Jaén, 23700 Linares (Jaén), Spain

²Departamento de Ingeniería Química, Universidad de Almería, 04120 Almería, Spain

³ Centro de Investigaciones de la Energía Solar (CIESOL), 04120 Almería, Spain

rbermejo@ujaen.es

En la actualidad, existe un creciente interés en la aplicación de colorantes naturales en los procesos de tinción textil debido a su biodegradabilidad y alta compatibilidad con el medio ambiente, con el objetivo de reducir el uso de compuestos de naturaleza sintética.

Las biliproteínas son una familia de pigmentos procedentes de micro y macroalgas, que destacan por su elevado carácter multifuncional gracias a sus propiedades antioxidantes y antibacterianas, así como por su potencial utilización como colorantes naturales y reactivos fluorescentes. Por ello, presentan múltiples aplicaciones en sectores tales como los de alimentación, cosmética y medicina (inmunoensayos, efectos antioxidantes y anticancerígenos, ensayos FRET con anticuerpos, citometría de flujo, conteo individual de moléculas, colorantes naturales, etc.) [1]. Adicionalmente, este tipo de pigmentos tienen elevando potencial para ser utilizados como colorantes en la industria textil, contribuyendo a mitigar el impacto ambiental generado por los compuestos sintéticos [2,3].

Nuestro grupo posee amplia experiencia en la obtención y caracterización de biliproteínas procedentes de diversas algas, habiendo implementado una metodología sostenible para la extracción de pigmentos y en cantidades suficientes para proceder a ensayarlos en tinción textil. Así, se ha optimizado una metodología de tinción de diferentes tipos de tejidos utilizando diferentes extractos de biliproteínas y habiendo ensayado diferentes compuestos para realizar el proceso de mordentado del tejido. Además, se ha realizado la caracterización fisicoquímica de los tejidos teñidos y se ha estudiado la estabilidad del color alcanzado en función del tiempo y la exposición a la luz, utilizando medidas espectrocolorimétricas como variable de seguimiento. En términos generales, los mejores resultados de tinción se obtuvieron con un extracto azul de ficocianinas usando un tejido mixto (algodón 50%: viscosa 25 %: poliéster 25%), siendo el método de mordentado más eficaz el basado en tratamiento con NaCl.

Referencias

- [1] Ji, L., Qiu, S., Wang, Z., Zhao, C., Tang, B., Gao, Z. & Fan, J., Phycobiliproteins from algae: current updates in sustainable production and applications in food and health, *Food Research International*, **2023**, 126,112737.
- [2] R. Repon, Barshan, D., A. Rahman, S. Jurkoniene, A. Haji, A. Alim and E. Kumpikaite, Textile dyeing using natural mordants and dyes: a review, *Environmental Chemistry Letters*, **2023**, 22, 1473-1520.
- [3] B. Pizzicato, S. Pacifico, D. Cayuela, G. Mijas and M. Riba-Moliner, Advancements in sustainable natural dyes for textile applications: a review, *Molecules*, **2023**, 28, 5954.

Agradecimientos

M. Murillo agradece al Ministerio de Ciencia e Innovación del Gobierno de España por su contrato postdoctoral dentro del proyecto ALGA-HUB (TED 2021-131555B-C21). M. Hurtado agradece al Ministerio de Trabajo y Economía Social del gobierno de España por su contrato de investigación dentro del "Programa Investigo" del Servicio Público de Empleo estatal (SEPE-NextGenerationEU).

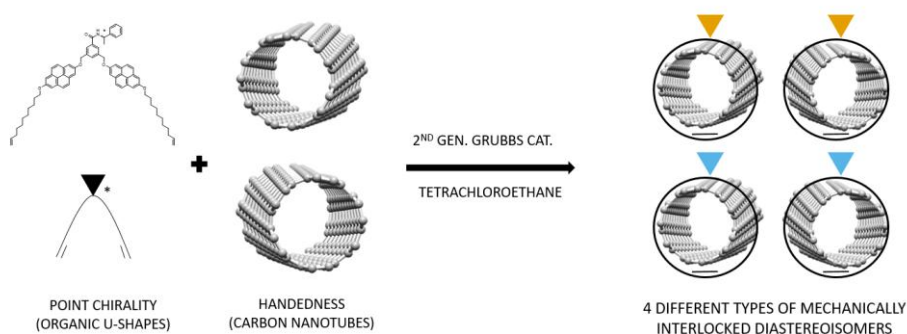
O21 - EXPLORING SUPRAMOLECULAR CHIRALITY IN MOLECULARLY-INTRLOCKED CARBON NANOTUBES

Dean Milanović¹, Sylwia Parzyszek¹, David Jiménez Merino¹, Alejandro López-Moreno¹, Emilio M. Pérez¹

¹Fundación IMDEA Nanociencia, Calle Faraday 9, 28049, Madrid

Single-walled carbon nanotubes (SWCNTs) are interesting structures that have been studied for over three decades. Transforming them into mechanically interlocked carbon nanotubes (MINTs) is an interesting way of functionalizing them without affecting the structure the nanotubes [1]. In recent years different synthetic strategies towards MINTs and their potential advantages for applications have been found [2], in particular in polymer reinforcement [3] and catalysis. [4] However, no chiral MINTs have been described to date. Such species would open up the possibility of studying the the interaction between a chiral macrocycle and a chiral nanotube in MINTs.

In this communication, we show some examples of chiral U-shapes which we used to prepare MINTs with chiral macrocycles in order to study the diastereoisomers we obtained. The chiral MINTs were characterized by UV/VIS, PLE, CD, Raman spectroscopy and thermogravimetric analysis. Potential future applications and research might be focused on the application of the described reaction for enantiomeric enrichment or separation of SWCNTs.



References

- [1] de Juan, A.; Pouillon, Y.; Ruiz-González, L.; Torres-Pardo, A.; Casado, S.; Martín, N.; Rubio, Á.; Pérez, E. M. Mechanically Interlocked Single-Wall Carbon Nanotubes. *Angew. Chem., Int. Ed.* **2014**, 53 (20), 5394–5400. <https://doi.org/10.1002/anie.201402258>
- [2] López-Moreno, A.; Villalva, J.; Pérez, E. M. Mechanically Interlocked Derivatives of Carbon Nanotubes: Synthesis and Potential Applications. *Chem. Soc. Rev.* **2022**, 51 (23), 9433–9444. <https://doi.org/10.1039/D2CS00510G>
- [3] Mena-Hernando, S.; Eaton, M.; Fernández-Blázquez, J. P.; López-Moreno, A.; Pedersen, H.; Pérez, E. M. Mechanical Interlocking to Unlock the Reinforcing Potential of Carbon Nanotubes. *Chem. Eur. J.* **2023**, 29 (58), e202301490. <https://doi.org/10.1002/chem.202301490>
- [4] Blanco, M.; Nieto-Ortega, B.; de Juan, A.; Vera-Hidalgo, M.; Melle-Franco, M.; Zamora, F.; Pérez, E. M. Positive and Negative Regulation of Carbon Nanotube Catalysts through Encapsulation within Macrocycles. *Nat. Commun.* **2018**, 9, 2671. <https://doi.org/10.1038/s41467-018-05183-8>

Acknowledgements

This research was carried out with funding from Nanocore ApS (Copenhagen, Denmark). The authors would also like to acknowledge funding from the European Research Council (PoC-842606-PINT) the Ministerio de Ciencia e Innovación (PID2020-116661RB-I00 and PID2023-152267NB-I00) and the Comunidad de Madrid (PR47/21 MAD2D-CM PRTR-CM). IMDEA Nanociencia receives support from the “Severo Ochoa” Programme for Centres of Excellence in R&D (MICINN, Grant CEX2020-001039-S).

O22 - COORDINATION COMPLEXES BASED ON LEVOFLOXACIN: A PHOTOPHYSICAL STUDY

María Mar Quesada-Moreno¹, María Elena Pestaña-Ocaña¹, Pablo Salcedo-Abraira², Sara Rojas², Antonio Rodríguez-Diéguez², Amparo Navarro¹

¹Departamento de Química Física y Analítica, Facultad de Ciencias Experimentales, Campus Las Lagunillas, Universidad de Jaén, 23071-Jaén, Spain

²Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Campus Fuentenueva, Universidad de Granada, 18071-Granada, Spain

mqmoreno@ujaen.es

In the future, antibiotics may be used to treat certain types of tumors. One such example is levofloxacin, a third-generation quinolone that has been extensively studied for its anti-tumor properties. To enhance its effectiveness, this antibiotic has been utilized as a ligand in coordination compounds with metal ions. Levofloxacin and its derivative compounds have gained significant attention due to their luminescent properties. Thus, this organic compound could be used as antenna in coordination complexes to combine its antibiotic properties with the superior luminescence properties of lanthanide ions, which make levofloxacin complexes particularly appealing for probing biological environments.^[1] Among the rare earths, Eu(III) and Tb(III) ions have some unique characteristics that differentiate them from other lanthanides, making them particularly appealing for fluorescence sensor applications.

This work is focused on studying electronic and photophysical properties of levofloxacin and its coordination compounds with the metallic ion Zn(II) and the lanthanide ions Tb(III) and Eu(III) experimentally and theoretically (Figure 1). In solution, the emission spectra of levofloxacin and its Zn(II), Tb(III) and Eu(III) coordination complexes show the same profile, which is indicative of a lack of antenna effect. However, in the solid state a clear antenna effect is shown in the Tb(III) and Eu(III) complexes, whereas the Zn(II) compound show the same emission spectra as in solution. We report a detailed photophysical and Time-Dependent Density Functional Theory (TD-DFT) computational investigation that unveils antenna effect's performance and provides an explanation for why sensitization occurs in certain complexes but not in others.

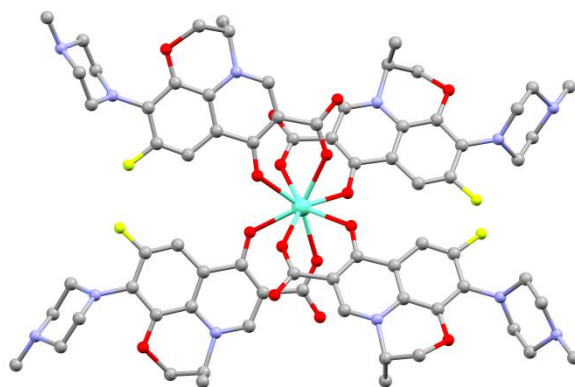


Figure 1. Crystal structure of the levofloxacin-Eu(III) complex. Hydrogen atoms are omitted for clarity. Color code: Eu cyan, C grey, O red, N blue, F green.

References

[1] Y. Yang, X. Hu, Z. Yang, W. Huang, *Adv. Funct. Mater.* **2025**, 35, 2412970.

Acknowledgements

Financial support from Consejería de Universidad, Investigación e Innovación and ERDF Andalusia Program 2021-2027 (projects C-EXP-140-UGR23 and M.1.B.B TA_000722). The authors acknowledge CSIRC for computational time and facilities. M. M. Q. M. thank Ministerio de Ciencia e Innovación for a Ramón y Cajal contract (RYC2021-034288-I, funded by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and the European Union «NextGenerationEU»/PRTR»).

O23 - INTERDISCIPLINARY STUDY OF THE MECHANISM RULING THE SELF-ASSEMBLY OF SUPRAMOLECULAR PHOTOREVERSIBLE GELS

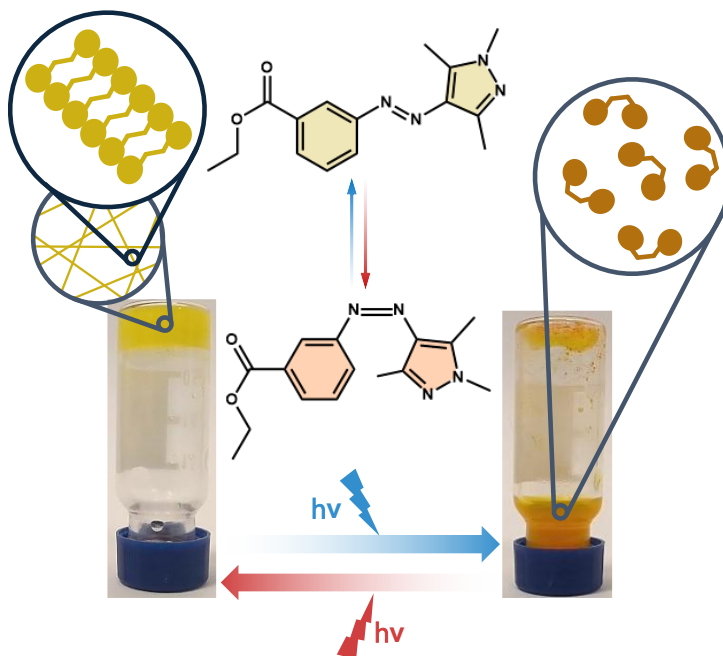
Federico Movilla¹, Ángel Orte¹, Rafael Contreras Montoya¹.

¹ Laboratorio Singular Nanoscopy-UGR, Departamento de Fisicoquímica, Facultad de Farmacia, Universidad de Granada, Avda. del Hospicio s/n, 18010, Granada

fmovilla@ugr.es

Gels are a unique kind of material formed by a three-dimensional solid network that could enclose and retain a fluid inside. Strikingly, although the system is composed almost entirely of the fluid phase, it presents a solid-like mechanical response, which demonstrates the hybrid nature of these materials. Of all the gels reported in bibliography, a particular group has raised great interest in the last decade due to its capacity to self-assemble, either spontaneously or externally stimulated, to develop a non-covalent three-dimensional network: **supramolecular gels**. Thanks to the rational design of its building blocks, these materials could be tailored to develop properties as diverse as self-healing,^[1] biocompatibility,^[2] or the selective retention of an industrially interesting fluid.^[3] Due to the reversible nature of these systems, the different self-assembly pathways that they can take has a significant impact on the macroscopic properties obtained. Therefore, having a clear insight into the mechanism that rule the self-assembly process is crucial to predict its properties and design new materials.

In this work we present an interdisciplinary study of the mechanism ruling the self-assembly and disassembly of a photoreversible supramolecular gel based on an arylazopyrazole derivative, a molecule capable of altering its conformational state when irradiated with light of different wavelength. To fully understand the mechanism, the system was studied at different scales using a variety of techniques, including FLIM, scanning electron microscopy, molecular dynamics simulations, and multiple spectroscopies. The use of this synergic approach allowed us to reconstruct a detailed description of the photoinduced changes, one piece at the time.



Referencias

- [1] S. Chen, Y. Fan, J. Song, B. Xue, *Mater. Today Chem.* **2022**, 23, 100719.
- [2] C. Gila-Vilchez, M. C. Mañas-Torres, Ó. D. García-García, A. Escribano-Huesca, L. Rodríguez-Arco, V. Carriel, I. Rodríguez, M. Alaminos, M. T. Lopez-Lopez, L. Álvarez De Cienfuegos, *ACS Appl. Polym. Mater.* **2023**, 5, 2154.
- [3] F. Movilla, J. M. Rey, C. Huck-Iriart, F. Di Salvo, *Cryst. Growth Des.* **2021**, 21, 3487.

O24 - RATIONAL DESIGN OF POTENTIAL BENZOTRIAZOLE-BASED MULTIFUNCTIONAL MATERIALS

Iván Torres Moya^{1,2}, Basanta Saikia³, Pablo Fernández¹, Carlos Tardío¹, Esther Pinilla-Peñalver⁴, Beatriz Donoso¹.

¹ Department of Inorganic, Organic Chemistry and Biochemistry, Faculty of Chemical Science and Technologies, Instituto Regional de Investigación Científica Aplicada (IRICA), University of Castilla-La Mancha, 13071 Ciudad Real, Spain.

² Department of Organic Chemistry, Faculty of Chemical Sciences, Campus of Espinardo, University of Murcia, 30010 Murcia, Spain.

³ Department of Chemistry, Molecular Imaging and Photonics, KULAK—KU Leuven, E. Sabbelaan 53, 8500 Kortrijk, Belgium

⁴ Department of Analytical Chemistry and Food Technology, University of Castilla-La Mancha, Avenue Camilo José Cela, s/n, 13071 Ciudad Real, Spain

Ivan.TorresMoya@uclm.es

The development of multifunctional derivatives plays a crucial role in material science, considering factors such as sustainability, practicality, and potential application. Benzothiadiazole (BTD) and benzotriazole (BTZ) are promising molecular cores for creating multifunctional materials due to their ability to act as electron-accepting units that can be readily modified with various electron-donating groups attached to the benzene rings. Furthermore, in the case of BTZ, the presence of a reactive N-H bond allows for additional functionalization through alkylation or arylation reactions, broadening the range of possible modifications. Thoughtful and well-planned functionalization of BTD and BTZ, through the careful selection of molecular fragments, enables the fine-tuning of desired properties for designing advanced materials (Figure 1). This study highlights the significance of rational molecular design in organic synthesis for developing versatile materials with extensive applications in organic photonics and electronics, as smart materials responsive to external stimuli, or as gelators aiding drug crystallization in pharmaceutical applications. [1,2].

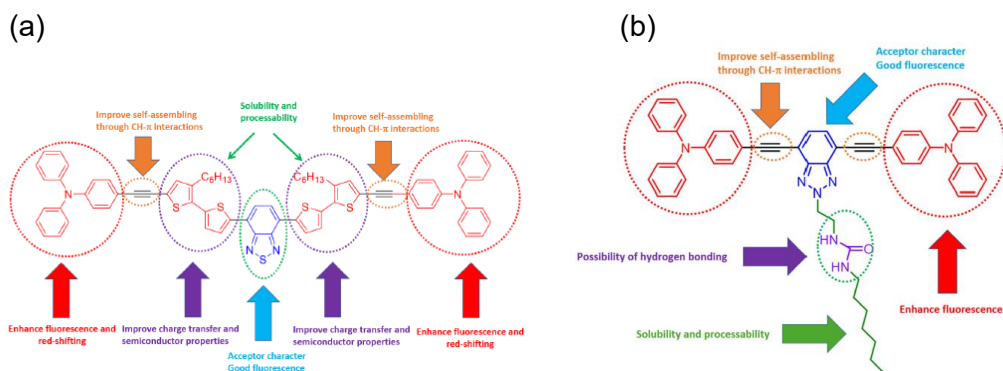


Figure 1. (a) Rational design of BTD-based compound with the different properties that provide each fragment of the desired multifunctional compound. (b) Rational design of BTZ-based derivative with the different functionalities that can provide each fragment of the designed multifunctional compound.

Referencias

- [1] C. Tardío, B. Donoso, P. Fernández, I. Torres-Moya. *Chem. Eur. J.* **2023**, 29, e202302524.
- [2] C. Tardío, E. Pinilla-Peñalver, B. Donoso, B. Saikia, P. Fernández, I. Torres-Moya. *Dyes Pigm.* **2024**, 229, 112310.

Agradecimientos: I. Torres-Moya is indebted by Juan de la Cierva Formación 2020 FJC2020-043684-I with assistance financed by MCIN/AEI/10.13039/501100011033 and for the Unión Europea Next Generation EU/PRTR

O25 - SÍNTESIS Y APLICACIÓN DE ECO-GRAFENO COMO ADSORBENTE PARA LA REMOCIÓN DE CADMIO (II) EN SOLUCIÓN ACUOSA

Génesis D. Valdez-García, Roberto Leyva-Ramos, Esmeralda Mendoza-Mendoza, Damarys H. Carrales-Alvarado, Uziel-Ortiz Ramos

Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Facultad de Ciencias Químicas, Centro de Investigación y Estudios de Posgrado, Ave. Dr. Manuel Nava 6, Zona Universitaria, San Luis Potosí S.L.P. México, C.P. 28210.

rlr@uaslp.mx

El agua es un recurso vital para la vida en la tierra y el acceso a agua de buena calidad es un derecho humano básico de todas las personas. Sin embargo, en los últimos años la calidad del agua está siendo afectada por la extrema contaminación ambiental, especialmente la contaminación por metales pesados como el cadmio debido a su alta toxicidad y tendencia a la acumulación en las cadenas alimentarias. El Cd(II) es un elemento que puede provocar daños severos a la salud como insuficiencia renal, trastornos óseos, neurológicos, reproductivos e incluso cáncer [1]. Una de las técnicas más eficientes para la eliminación de metales en agua es la adsorción, que es un fenómeno superficial que involucra la acumulación de una sustancia sobre una superficie sólida [2]. El objetivo principal de este proyecto es obtener grafeno por una ruta de síntesis amigable con el medio ambiente (Eco-Grafeno), caracterizar el material obtenido por diferentes técnicas, evaluar su capacidad para adsorber Cd(II) en solución acuosa y modificarlo (Eco-Grafeno-AC) para incrementar su capacidad de adsorción. También, evaluar el efecto del pH, temperatura y fuerza iónica de la solución, así como evaluar la reversibilidad del proceso de adsorción. Los resultados mostraron que los materiales exhiben morfología esférica con estructuras laminares y amorfas. La superficie presenta carácter ácido, al contar con mayor cantidad de sitios ácidos que básicos. Se encontró que la capacidad de adsorción del Eco-Grafeno incrementó considerablemente al modificar su química superficial (Figura 1). El mecanismo de adsorción involucra interacciones electrostáticas atractivas entre los iones metálicos y la superficie del adsorbente. Al incrementar el pH de la solución se observó un aumento considerable en la capacidad de adsorción, además, la presencia de otros iones provocó disminución de la cantidad adsorbida como resultado del aumento de la fuerza iónica de la solución. Esto indicó que las fuerzas electrostáticas e intercambio iónico juegan un papel importante en el proceso de adsorción.

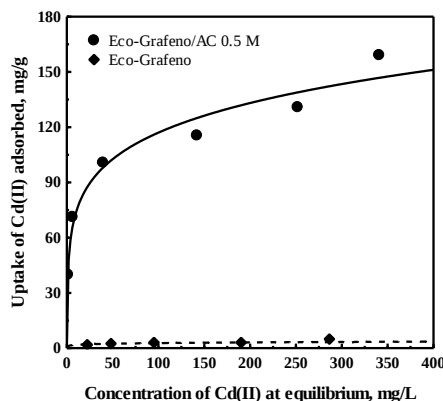


Figura 1. Isotermas de adsorción de Cd(II) sobre Eco-Grafeno y Eco-Grafeno modificado con ácido cítrico, a $T = 25^{\circ}\text{C}$ y $\text{pH} = 7$. Las líneas representan el modelo de Radke-Prausnitz.

Referencias

- [1] J. Briffa, E. Sinagra, R. Blundell. Heavy metal pollution in the environment and their toxicological effects on humans, *Heliyon*, **2020**, 9, e04691.
- [2] D. O. Cooney. **1998**. Adsorption design for wastewater treatment. CRC press.

Agradecimientos

Por la beca Postdoctoral otorgada por SECIHTI para realizar investigación en Ingeniería Química en la UASLP.



Comunicaciones Flash

F1 - INDUCCIÓN DE QUIRALIDAD Y POLIMERIZACIÓN DE UN SMM DE TIPO bis(ZnDy): ESTUDIO MAGNÉTICO Y LUMINISCENTE

Andoni Zabala-Lekuona¹, Laura F. Mazzei¹, Aitor Uriarte-Erroz¹, Hanae Boulehour², Javier Cepeda¹, Antonio Rodríguez-Diéguez³, Pablo Salcedo-Abraira³, Carlos M. Cruz⁴, Araceli G. Campaña⁴, José M. Seco¹, Enrique Colacio³

¹Dpto. de Química Aplicada, Facultad de Química, UPV/EHU, Manuel Lardizabal 3, 20018 Donostia

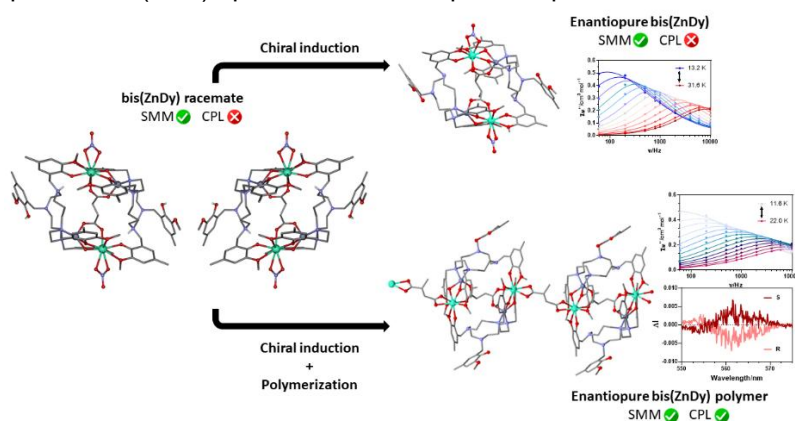
²Donostia International Physics Center (DIPC), 20018, Donostia

³Dpto. de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, C/ Severo Ochoa s/n, 18071, Granada

⁴Dpto. de Química Orgánica, Unidad de Excelencia de Química, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, 18071, Granada

andoni.zabala@ehu.eus

Entre los imanes monomoleculares (SMMs, single-molecule magnets), los que están basados en lantánidos han atraído la mayor parte del interés en los últimos años debido a la gran anisotropía que poseen, lo que da lugar a elevadas barreras de energía (U_{eff}) y temperaturas de bloqueo (T_B).¹ Además, las transiciones intraconfiguracionales 4f-4f que ocurren en estos iones pueden proporcionar bandas de emisión estrechas tanto en la región visible como en la del infrarrojo cercano (NIR) características de cada lantánido (Ln).² Por lo tanto, los compuestos de coordinación basados en Ln son candidatos potenciales para generar materiales multifuncionales. En nuestro trabajo anterior,³ describimos un compuesto bis(ZnDy) (Figura, izquierda), donde las dos entidades ZnDy están conectadas por un puente succinato y estas moléculas cocrystalizan como un racemato debido a las aminas cuaternarias generadas *in situ*. Este compuesto se comporta como un SMM en ausencia de campo con una $U_{eff} = 261$ K. En esta comunicación, presentamos las propiedades magnéticas y ópticas de los compuestos monoméricos y poliméricos con quiralidad inducida (Figura, derecha). Como se observa, el comportamiento SMM se mantiene en todos los compuestos, mientras que la luminiscencia circularmente polarizada (CPL) aparece en los compuestos poliméricos.



Referencias

- [1] F.-S. Guo, B. Day, Y.-C. Chen, M.-L. Tong, A. Mansikkamäki, R. Layfield, *Science*, **2018**, 362, 1400-1403.
- [2] J. Heine, K. Müller-Buschbaum, *Chem. Soc. Rev.*, **2013**, 42, 9232-9242.
- [3] A. Zabala-Lekuona, X. Lopez de Pariza, I. F. Díaz-Ortega, J. Cepeda, H. Nojiri, N. P. Gritsan, A. Dmitriev, A. López-Ortega, A. Rodríguez-Diéguez, José M. Seco, E. Colacio, *Dalton Trans.*, **2024**, 53, 7971-7984.

Agradecimientos

Eusko Jaurlaritz (GV/EJ; IT1755-22) y Red Guipuzcoana de Ciencia, Tecnología e Innovación (FA-EP-2024-0395; DG24/12).

F2 - MODIFICACIONES INDUCIDAS POR PLASMA PARA LA MEJORA DE LA ACTIVIDAD ELECTROCATALÍTICA DE NANOMATERIALES TIPO ZIF-67

Víctor K. Abdelkader-Fernández, F. Javier López-Garzón, Manuel J. Pérez-Mendoza

Grupo MolMatNano, Departamento de Química Inorgánica, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Avd. de Fuentenueva S/N, 18071, Granada

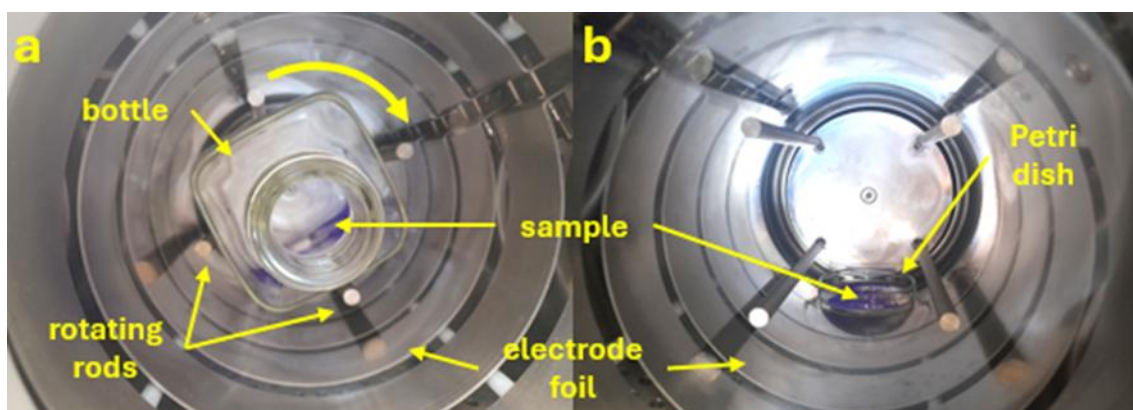
victorkarim@ugr.es

Las interesantes propiedades de los MOFs —alta cristalinidad, porosidad bien definida, grandes áreas superficiales, notable versatilidad estructural y composicional, numerosos nodos metálicos que pueden considerarse potenciales centros activos en diversos procesos (electro)catalíticos— se encuentran opacadas por ciertas limitaciones, tales como la baja accesibilidad a los sitios activos, escasa conductividad eléctrica y estabilidad moderada bajo condiciones operativas exigentes.

En el presente estudio hemos demostrado la idoneidad de los tratamientos basados en plasmas fríos —sistemas fuera del equilibrio térmico, altamente reactivos y generados mediante la ionización parcial de gases— para la mejora de las prestaciones (electro)catalíticas de los MOFs y, de este modo, para el aumento de su aplicabilidad como electrocatalizadores de la reacción de evolución de oxígeno (OER), proceso clave en la producción de hidrógeno verde mediante electrólisis del agua.

En este estudio, se ha aplicado plasma de oxígeno sobre nanomateriales tipo ZIF-67 —compuestos por nodos de iones Co^{2+} y ligandos de 2-metilimidazol— evaluándose detalladamente la influencia de ciertos factores sobre las modificaciones estructurales inducidas por el plasma en la red tridimensional de las muestras de ZIF-67. Además, se ha tratado de correlacionar dichos cambios estructurales con las mejoras observadas en la actividad electrocatalítica frente al proceso de OER.

Los parámetros estudiados han sido, el tipo de nanomaterial ZIF-67 (canónico y no canónico), la duración del tratamiento de plasma (30, 45 y 60 minutos), y el modo de aplicación del plasma a la muestra (rotacional [a] o estático [b], véase la figura).



Agradecimientos.

Víctor Karim Abdelkader Fernández agradece a la Junta de Andalucía su contrato de investigación EMERGIA.